



**The VII All-Russian with
International Participation
Bakeyev Conference
"MACROMOLECULAR
NANOOBJECTS AND POLYMER
NANOCOMPOSITES"**

BOOK OF ABSTRACTS

**October 07-12, 2018
Moscow, Russia**



**VII БАКЕЕВСКАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
КОНФЕРЕНЦИЯ
«МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НАНООБЪЕКТЫ
И
ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ»**

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ РАН
ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
ИМ. А. Н. НЕСМЕЯНОВА РАН
ИНСТИТУТ СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ
ИМ. Н. С. ЕНИКОЛОПОВА РАН
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН
ПО ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ СОЕДИНЕНИЯМ
РОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ ФОНД
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

07-12 октября 2018 г.

Москва

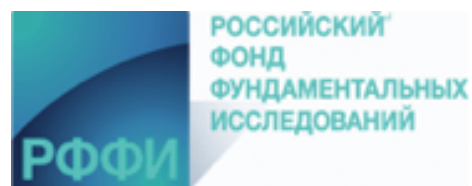
*При финансовой поддержке
МИНИСТЕРСТВА ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РОССИЙСКОГО ФОНДА ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ*

**VII БАКЕЕВСКАЯ ВСЕРОССИЙСКАЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ КОНФЕРЕНЦИЯ
«МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НАНООБЪЕКТЫ И
ПОЛИМЕРНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ»**

Проводится при финансовой поддержке:



Российский
научный
фонд



**Институт Новых Углеродных
Материалов и Технологий**

Наши информационные партнеры:

**КОМПОЗИТНЫЙ
МИР**

ХИМИЯ И БИЗНЕС
МЕЖДУНАРОДНЫЙ ХИМИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Аналитика
ТЕХНОСФЕРА
www.j-analytics.ru
НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
**ЛАБОРАТОРИЯ И
ПРОИЗВОДСТВО**

itc **СОЮЗ**
ИННОВАЦИОННО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ЦЕНТРОВ РОССИИ

ПОИСК
ГАЗЕТА НАУЧНОГО СООБЩЕСТВА

БИОТЕХНОСФЕРА

 **ISJAEE**

**ПОЛИМЕРНЫЕ
МАТЕРИАЛЫ**
ИЗДЕЛИЯ ОБОРУДОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ

Пластикс
RUSSIAN & INTERNATIONAL PLASTICS MEDIA

PLAST INFO

RCC group
rccNEWS

at
аддитивные
технологии

**ТОНКИЕ
ХИМИЧЕСКИЕ
ТЕХНОЛОГИИ** | **Fine
Chemical
Technologies**

**ПЛАСТИЧЕСКИЕ
МАССЫ**

Председатель конференции – акад. РАН А.М. МУЗАФАРОВ

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

чл.-корр. РАН Озерин А.Н. (*со-председатель*)

д.х.н. Чвалун С.Н. (*со-председатель*)

акад. РАН Алфимов М.В.

Prof. M. Möller

акад. РАН Берлин А.А.

акад. РАН Овчаренко В.И.

чл.-корр. РАН Иванов В.К.

чл.-корр. РАН Панарин Е.Ф.

чл.-корр. РАН Калмыков С.Н.

чл.-корр. РАН Пономаренко С.А.

чл.-корр. РАН Куличихин В.Г.

д.х.н. Прокопов Н.И.

чл.-корр. РАН Кукушкин В.Ю.

Prof. S. Sheiko

акад. РАН Лунин В.В.

акад. РАН Синяшин О.Г.

д.ф.-м.н. Люлин С.В.

акад. РАН Хохлов А.Р.

д.х.н. Малкин А.Я.

чл.-корр. РАН Шибяев В.П.

акад. РАН Минкин В.И.

чл.-корр. РАН Ярославов А.А.

к.х.н. Молодцова Ю.А. (*ученый секретарь*)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

д.х.н. Серенко О.А. (*председатель*)

чл.-корр. РАН Волынский А.Л.

д.х.н. Выгодский Я.С.

д.ф.-м.н. Крамаренко Е.Ю.

д.х.н. Кузнецов А.А.

чл.-корр. РАН Озерин А.Н.

д.х.н. Папков В.С.

д.ф.-м.н. Патлажан С.А.

чл.-корр. РАН Пономаренко С.А.

д.х.н. Сергеев В.Г.

д.х.н. Чвалун С.Н.

д.х.н. Шевченко В.Г.

д.ф.-м.н. Юдин В.Е.

чл.-корр. РАН Ярославов А.А.

PROGRAM

07/10/18, Sunday

14:00-16:00	<i>Registration at the INEOS RAS (Vavilov str., 28, Moscow) departure to the conference venue</i>	
18:00-19:00	<i>Dinner</i>	
19:00-19:30	<i>Opening ceremony Aziz Muzafarov, Martin Moeller</i>	
19:30-20:10	PL-1	Advanced materials by externally controlled ATRP <i>Krzysztof Matyjaszewski</i> J.C. Warner University Professor of Natural Sciences, Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA
20:15-22:00	<i>Welcome reception</i>	

08/10/18, Monday

09:00-13:35	Macromolecular nanoobjects <i>Chairpersons: Aziz Muzafarov, Krzysztof Matyjaszewski</i>	
09:00-09:40	PL-2	Can we use computer simulations to design nanocomposites for health care? <u>Mikko Karttunen</u> Department of Chemistry & Department of Applied Mathematics, Western University, London, Ontario, CANADA
09:45-10:25	PL-3	Interfacial activity of microgels and arborescent polymers: molecules or colloids <u>Martin Möller</u> DWI – Leibniz-Institut für Interaktive Materialien e.V., Aachen, Germany
10:30-11:10	PL-4	From inherently strained macromolecules to strain-adaptive tissue-mimetic materials <u>Sergey Sheiko</u> University of North Carolina at Chapel Hill, USA
11:15-11:35	Coffee break	
11:35-12:15	PL-5	Development of an enzyme immunoassay for the detection of pg-quantities of galactomannan - the antigenic polysaccharide of the mycopathogen <i>Aspergillus fumigatus</i> <i>Krylov B.A., Argunov D.A., Tukunova N.V., Matveyev A.L., Lebedin Yu.S., Nifantsev N.E.</i> Zelinsky Institute of Organic Chemistry of RAS, Moscow, Russia
12:20-13:00	PL-6	Microfluidic-assisted elaboration of polymeric micro- and nanoparticles as potential carriers for biomedical applications <u>Christophe Serra</u> L'Institut Charles Sadron, Strasbourg, France
13:05-13:35	Round table <i>Chairpersons: Aziz Muzafarov, Krzysztof Matyjaszewski</i>	
14:00-15:00	Lunch	
15:00-18:20	Macromolecular nanoobjects <i>Chairpersons: Nikolay Nifantsev, Oleg Borshchev</i>	
15:00-15:30	O-1	Polymer stars: synthesis, structure, properties, application <u>Kuznetsov A.A.</u> Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials of RAS, Moscow, Russia
15:35-15:50	O-2	Enzymatically-Cleavable Branched Polymers Grafted on Upconverting Nanoparticles for Theranostics <i>Kavand A., Serra C.A., Anton N., Vandamme T., Chan-Seng D.</i> Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France

15:55-16:10	O-3	<p>A Facile Method to Control the Growth of Upconversion Nanocrystals: A Focus on Heat Treatment</p> <p><i>Kavand A., Serra C.A., Chan-Seng D., Anton N., Vandamme T., Przybilla F.</i></p> <p>Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, Strasbourg, France</p>
16:15-16:30	O-4	<p>Layer By Layer Surface Treatment for the Formation of Double Emulsions in PDMS Microchips</p> <p><i>Funfschilling D., Peter B., Dumas N., Serra C.A.</i></p> <p>Université de Strasbourg, CNRS, ICube UMR 7357, 2 rue Boussingault, Strasbourg, France</p>
16:35-16:55	Coffee break	
16:55-17:05		<p>Reagents and Equipment for Sample Preparation and Work with Nanoscale Objects</p> <p><i>Paramonov D.A., Ellis B.B.</i></p> <p>“Laboratorka” Ltd., Moscow, Russia</p>
17:05-17:20	O-5	<p>Application of the light scattering method for studying the formation of macroporous nanostructured polymeric materials</p> <p><i>Blagodatskikh I.V., Vyshivannaya O.V.</i></p> <p>A.N.Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of RAS, Moscow, Russia</p>
17:25-17:40	O-6	<p>Synthesis and nano-organization of poly (1-trimethylsilyl-1-propyne) with a high content of cis-units</p> <p><i>Matson C.M., Kossov A.A., Levin I.S., Khotimsky V.S.</i></p> <p>A.V.Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Moscow, Russia</p>
17:45-18:00	O-7	<p>Cyclic organosilicon triperoxides as promising initiators of the peroxide vulcanization of liquid polysiloxanes</p> <p><i>Deryabin K.V., Islamova R.M., Terentiev A.O.</i></p> <p>St Petersburg State University, Russia</p>
18:05-18:20	O-8	<p>Influence of particle rearrangement on the effect of magnetostriction in magneto-sensitive elastomers</p> <p><i>Romeis D., Toshevnikov V., Grenzer M.</i></p> <p>Leibniz Institute for Polymer Research, Dresden, Germany</p>
18:30	Dinner	

09/10/18, Tuesday

09:00-13:20	Функциональные полимерные нанообъекты и нанокompозиты <i>Chairpersons: Sergey Chvalun, Sergey Ponomarenko</i>	
09:00-09:40	PL-7	Nanoparticles and polymer nanoobjects in functional polymeric nanocomposites: dielectric properties and methods of investigation <i>Vitaliy Shevchenko</i> Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials of RAS, Moscow, Russia
09:45-10:25	PL-8	New (X-DADAD)_n donor-acceptor copolymers for optoelectronic devices <i>Akkuratov A.V., Kuznetsov I.E., Klimovich I.V., Susarova D.K., Prudnov F.A., Troshin P.A.</i> Institute for Problems of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia
10:30-11:10	PL-9	Photo and electroactive liquid crystal polymers and composites <i>Alexey Bobrovskiy, Valeriy Shibaev</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
11:15-11:35	Coffee break	
11:35-11:55	O-9	Metal Polymer Hybrid Nanocomposites <i>Djardimalieva G.I., Irzhak V.I., Bogdanova L.M., Golubeva N.D., Kydralieva K.A., Uflyand I.E.</i> Institute for Problems of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia
12:00-12:20	O-10	Photochemical reduction of graphene oxide nanosheets with monochromatic vacuum ultraviolet radiation of 123.6 nm <i>Vasilets V.N., Shulga Yu.M.</i> V.I. Talroze Institute of Energy Problems of Chemical Physics of RAS (Branch), Chernogolovka, Russia
12:25-12:45	O-11	The assembly of metallic nanostructures in irradiated dispersions and films of interpolymer complexes: nucleation and growth processes of nanoparticles <i>Zezin A.A., Feldman V.I., Abramchuk S.S., Verkhovsky V.A., Zharikov A.A., Zakurdaeva O.A., Zezina E.A., Pergushev D.V.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
12:50-13:20	Round table <i>Chairmen: Sergey Chvalun, Sergey Ponomarenko</i>	
14:00-15:00	Lunch	

15:00-18:00	Functional polymer nanoobjects and nanocomposites <i>Chairpersons: Olga Serenko, Alexey Bobrovskiy</i>	
15:00-15:15	O-12	Complexes of polyelectrolytes with metal ions as precursors in the synthesis of nano-sized particles <i>Ozerin A.S., Radchenko F.S., Novakov I.A.</i> Volgograd State Technical University, Russia
15:20-15:35	O-13	Polymer-Surfactant Soft Network <i>Molchanov V.S., Kvyatkovsky A.L., Orekhov A.L., Vasiliev A.L., Philippova O.E.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
15:40-15:55	O-14	The preparation and physicochemical properties of composites based on crosslinked, non-crosslinked sulfonated poly (2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide) and poly (3,4-ethylenedioxythiophene) <i>Shepeleva A.S., Kubarkov A.V., Pyshkina O.A., Sergeyev V.G.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
16:00-16:15	O-15	Supercritical carbon dioxide in the synthesis of metal-polymer supramolecular nanoscale structures <i>Said-Galiyev E.E., Naumkin A.V., Khokhlov A.R., Shtykova E.V.</i> A.N.Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of RAS, Moscow, Russia
16:20-16:40	Coffee break	
16:40-16:55	O-16	Copper-polymer nanostructured coatings with increased thermal conductivity <i>Silayeva A.A., Kvasnikov M.Yu., Makarova A.V.</i> D.Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia
17:00-17:15	O-17	Porous composite materials based on biocompatible polymers for tissue engineering <i>Grigoriev T.E., Lukanina K.I., Shepelev A.D., Antipova K.G., Krasheninnikov S.V., Chvalun S.N.</i> National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia
17:20-17:35	O-18	Biodegradable polymers based on lactide: from surgical threads to fasteners and smart implants <i>Sedush N.G., Demina V.A., Krasheninnikov S.V., Kalinin K.T., Chvalun S.N.</i> MIREA - Russian Technological University, Moscow, Russia
17:40-19:00	POSTER SESSION 1 (P1 – P51)	
19:00	Dinner	

10/10/16, Wednesday

09:00-13:30	Theory and computer modeling of polymer nanocomposites <i>Chairpersons: Stanislav Patlazhan, Sergey Lyulin</i>	
09:00-09:40	PL-10	Modeling of Thermo-mechanical Behavior of Polymer and Polymer Nanocomposites with the Effects of Porosity: Towards Application in Membranes for Water Treatment <i>Said Ahzi</i> Qatar Environment & Energy Research Institute HAMAD BIN KHALIFA UNIVERSITY, Qatar Foundation, QATAR
09:45-10:25	PL-11	Prospects of atomistic modeling: from the mechanisms of formation of carbon nanostructures to the properties of polymer composites <i>Vladimir Stegailov</i> Joint Institute for High Temperatures of RAS, Moscow, Russia
10:30-10:50	O-19	Flow state diagrams of two-phase liquid in coaxial capillaries <i>Vagner S.A., Patlazhan S.A.</i> Institute of Problem of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia
10:55-11:15	Coffee break	
11:15-11:55	PL-12	Multiscale Simulation of Polymer Nanocomposites with Crosslinked Matrix <i>Khokhlov A.R.</i> Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
12:00 -12:30	O-20	Molecular switches based on the grafted layers of amphiphilic homopolymers: computer modeling <i>Vasilevskaya V.V., Lazutin A.A.</i> Nesmeyanov Institute of Organoelement compounds of RAS, Moscow, Russia
12:35- 12:55	O-21	Microphase separation in polyelectrolyte melts: mesoscale simulation <i>Gavrilov A., Chertovich A.</i> Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
13:00 -13:30	Round table <i>Chairpersons: Stanislav Patlazhan, Sergey Lyulin</i>	
14:00-15:00	Lunch	

15:00-18:05	Theory and computer modeling of polymer nanocomposites <i>Chairperson: Elena Kramarenko</i>	
15:00-15:15	O-22	Comparative analysis of intramolecular mobility of siloxane and carbosilane dendrimers. Computer modelling <i>Kurbatov A.O., Balabayev N.K., Mazo M.A., Kramarenko E.Yu.</i> Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
15:20-15:35	O-23	The effect of the size of polar groups on the conformational behavior of a rigid dipole chain <i>Gordiyevskaya Yu.D., Kramarenko E.Yu.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
15:40-15:55	O-24	Dynamics of Conformational Transitions in nano-DNA <i>Zubova E.A., Kovaleva N.A.</i> N.N. Semenov Institute of Chemical Physics of RAS, Moscow, Russia
16:00-16:15	O-25	Investigation of the thermodynamic properties of polysiloxane nano-gels and dendrimers <i>Sarmini Yu.A., Sologubov S.S., Smirnova N.N., Muzafarov A.M.</i> Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Russia
16:20-16:40	Coffee break	
16:45-17:25	PL-13	Nanostructured multifunctional particles: production, properties, biomedical applications <i>Gorin D.A.</i> Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia
17:30-17:45	O-26	Triazin-triazole hyperbranched polymers as a class of new promising energy-intensive binders <i>Petrov A.O., Malkov G.V., Karpov S.V., Gavrishova T.N., Shastin A.V., Badamshina E.R.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
17:50-18:05	O-27	Oligo- and polydimethylsiloxane derivatives based on renewable natural resources <i>Drozhdov F.V., Tarasenzov A.N., Milenin S.A., Ardabievskaya S.N., Demchenko N.V., Buzin M.I., Muzafarov A.M.</i> Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials of RAS, Moscow, Russia
19:00	Dinner	

11/10/18, Thursday

08:30-12:10	Polymer composite nanomaterials for additive technologies <i>Chairpersons: Alexander Ozerin, Maxim Shcherbina</i>	
08:30-09:10	PL-14	Rheology of oil <u><i>Malkin A.Ya.</i></u> A.V.Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis of RAS, Moscow, Russia
09:15-09:55	PL-15	Application of additive technologies for printing products with heat-resistant polymers and nanocomposites based on them <i>Vladimir Yudin, G. Vaganov, I. Polyakov</i> Institute of Macromolecular Compounds of RAS, St-Petersburg, Russia
10:00-10:20	Coffee break	
10:20-11:00	PL-16	Predictive Modeling of Additive Production Processes based on High Performance Computing <i>Potapkin B.V., Zakirov A.V., Korneyev B.A., Bogdanova M.V., Belousov S.A., Perepelkina A.Yu., Levchenko V.D., Stepanov A.E.</i> National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia
11:05-11:45	PL-17	Additive Technologies for Biomedicine <u><i>Panchenko V.Ya.</i></u> Institute of Problems of Laser and Information Technologies of RAS, Moscow, Russia
11:50-12:10	O-28	Composite materials based on carbon nanotubes <u><i>Nasibulin A.G.</i></u> Skolkovo Institute of Science and Technology, Moscow, Russia
12:15-13:00	POSTER SESSION 2 (P52 – P112)	
13:00-14:00	Lunch	

14:00-18:45	ROUND TABLE “The state and prospects of the development of additive technologies” <i>Chairpersons: Sergey Chvalun, Vladimir Yudin</i>
14:00-14:05	Opening ceremony
14:05-18:45	Oral presentations
18:45-19:30	<i>Summing up the Roundtable. Cocktail reception</i>
19:30	<i>Dinner</i>

12/10/18, Friday

09:00-12:20	Modern methods for studying nanoparticles and polymeric nanocomposites <i>Chairpersons: Alexander Ozerin, Stanislav Patlazhan</i>	
09:00-09:40	PL-18	Quantitative Measurement of Dislocation Parameters in Semicrystalline Polymers for the Optimization of Mechanical Properties <i>Michael Zehetbauer</i> University of Vienna, Faculty of Physics, Vienna, Austria
09:45-10:15	PL-19	Computer modeling of polymer systems <i>Chertovich A.V.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
10:20-10:50	PL-20	The program complex <i>Materials Studio</i> - molecular modeling for solving structural problems for partially ordered systems <i>Shcherbina M.A., Bakirov A.V., Chvalun S.N.</i> Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials of RAS, Moscow, Russia
10:55-11:15	<i>Coffee break</i>	
11:15-11:45	O-29	Nano-sized lamellar formations in long-chain molecular crystals and polyethylene: specificity of phase transitions in crystals of the CSC type and folded crystals <i>Marikhin V.A., Egorov V.M., Myasnikova L.P.</i> Ioffe Physico-Technical Institute of RAS, St Petersburg, Russia
11:50-12:20	Round table <i>Chairpersons: Alexander Ozerin, Stanislav Patlazhan</i>	
12:20-13:00	<i>Closing ceremony</i>	
13:00-14:00	<i>Lunch</i>	

14:30 – departure to Moscow

ПРОГРАММА

07/10/18, воскресенье

14:00-16:00	<i>Регистрация в ИНЭОС РАН (Москва, ул. Вавилова 28), отъезд в пансионат</i>	
18:00-19:00	<i>Ужин</i>	
19:00-19:30	<i>Открытие конференции: Музафаров А.М., Martin Moeller ИНЭОС РАН, Москва, Россия</i>	
19:30-20:10	PL-1	Advanced materials by externally controlled ATRP <i><u>Krzysztof Matyjaszewski</u></i> J.C. Warner University Professor of Natural Sciences, Department of Chemistry, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA
20:15-22:00	<i>Фуршет</i>	

08/10/18, понедельник

09:00-13:35	Макромолекулярные нанобъекты <i>Председатели: А.М. Музафаров, Krzysztof Matyjaszewski</i>	
09:00-09:40	PL-2	Can we use computer simulations to design nanocomposites for health care? <u>Mikko Karttunen</u> Western University, London, Ontario, CANADA
09:45-10:25	PL-3	Interfacial activity of microgels and arborescent polymers: molecules or colloids <u>Martin Möller</u> DWI – Leibniz-Institut für Interaktive Materialien e.V., Aachen, Germany
10:30-11:10	PL-4	From inherently strained macromolecules to strain-adaptive tissue-mimetic materials <u>Sergey Sheiko</u> University of North Carolina at Chapel Hill, USA
11:15-11:35	Кофе-брейк	
11:35-12:15	PL-5	Разработка иммуноферментного диагностикума для обнаружения пг-количеств галактоманнана - антигенного полисахарида микопатогена <i>Aspergillus fumigatus</i> <i>Крылов В.Б., Аргунов Д.А., Тикунова Н.В., Матвеев А.Л., Лебедин Ю.С., Нифантьев Н.Э.</i> Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва
12:20-13:00	PL-6	Microfluidic-assisted elaboration of polymeric micro- and nanoparticles as potential carriers for biomedical applications <u>Christophe Serra</u> L'Institut Charles Sadron, Strasbourg, France
13:05-13:35	Круглый стол <i>Председатели: А.М. Музафаров, Krzysztof Matyjaszewski</i>	
14:00-15:00	Обед	
15:00-18:20	Макромолекулярные нанобъекты <i>Председатели: Н.Э. Нифантьев, О.В. Борщев</i>	
15:00-15:30	О-1	Полимерные звезды: синтез, структура, свойства, применение <u>Кузнецов А.А.</u> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва

15:35-15:50	O-2	Enzymatically-Cleavable Branched Polymers Grafted on Upconverting Nanoparticles for Theranostics <i>Kavand A., Serra C.A., Anton N., Vandamme T., Chan-Seng D.</i> Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France
15:55-16:10	O-3	A Facile Method to Control the Growth of Upconversion Nanocrystals: A Focus on Heat Treatment <i>Kavand A., Serra C.A., Chan-Seng D., Anton N., Vandamme T., Przybilla F.</i> Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, Strasbourg, France
16:15-16:30	O-4	Layer By Layer Surface Treatment for the Formation of Double Emulsions in PDMS Microchips <i>Funfschilling D., Peter B., Dumas N., Serra C.A.</i> Université de Strasbourg, CNRS, ICube UMR 7357, 2 rue Boussingault, Strasbourg, France
16:35-16:55	Кофе-брейк	
16:55-17:05		Реактивы и Оборудование для Пробоподготовки и Работы с Наноразмерными Объектами <i>Парамонов Д.А., Эллис В.В.</i> Компания «Лабораторка», Москва
17:05-17:20	O-5	Применение метода рассеяния света для исследования процессов формирования макропористых наноструктурированных полимерных материалов <i>Благодатских И.В., Вышиванная О.В.</i> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва
17:25-17:40	O-6	Синтез и nanoорганизация поли(1-триметилсилил-1-пропина) с высоким содержанием цис-звеньев <i>Матсон С.М., Коссов А.А., Левин И.С., Хотимский В.С.</i> Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН, Москва
17:45-18:00	O-7	Циклические кремнийорганические трипероксиды как перспективные инициаторы перекисной вулканизации жидких полисилоксанов <i>Дерябин К.В., Исламова Р.М., Терентьев А.О.</i> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
18:05-18:20	O-8	Influence of particle rearrangement on the effect of magnetostriction in magneto-sensitive elastomers <i>Romeis D., Toshevnikov V., Grenzer M.</i> Leibniz Institute for Polymer Research, Dresden, Germany
19:00	Ужин	

09/10/18, вторник

09:00-13:20	Функциональные полимерные нанообъекты и нанокompозиты <i>Председатели: С.Н. Чвалун, С.А. Пономаренко</i>	
09:00-09:40	PL-7	Наночастицы и полимерные нанообъекты в функциональных полимерных нанокompозитах: диэлектрические свойства и методы исследования <i>Шевченко В.Г.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
09:45-10:25	PL-8	New (X-DADAD)_n donor-acceptor copolymers for optoelectronic devices <i>Akkuratov A.V., Kuznetsov I.E., Klimovich I.V., Susarova D.K., Prudnov F.A., Troshin P.A.</i> Institute for Problems of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia
10:30-11:10	PL-9	Фото- и электроактивные ЖК полимеры и композиты <i>Бобровский А.Ю., Шубаев В.П.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова
11:15-11:35	Кофе-брейк	
11:35-11:55	О-9	Металлополимерные гибридные нанокompозиты <i>Джардималиева Г.И., Иржак В.И., Богданова Л.М., Голубева Н.Д., Кыдралиева К.А., Уфлянд И.Е.</i> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка
12:00-12:20	О-10	Фотохимическое восстановление нанолитов оксида графена монохроматическим вакуумным ультрафиолетовым излучением 123,6 нм. <i>Василец В.Н., Шульга Ю.М.</i> Филиал института энергетических проблем химической физики РАН им. В.Л. Тальрозе, г. Черноголовка
12:25-12:45	О-11	Сборка металлических наноструктур в облученных дисперсиях и пленках интерполимерных комплексов: процессы зародышеобразования и роста наночастиц <i>Зезин А.А., Фельдман В.И., Абрамчук С.С., Верховский В.А., Жариков А.А., Закурдаева О.А., Зезина Е.А., Пергушев Д.В.</i> Московский государственный университет им. Ломоносова, Химический факультет, Москва
12:50-13:20	Круглый стол <i>Председатели: С.Н. Чвалун, С.А. Пономаренко</i>	
14:00-15:00	Обед	

15:00-17:40	Функциональные полимерные нанообъекты и нанокомпозиты <i>Председатели: О.А. Серенко, А.Ю. Бобровский</i>	
15:00-15:15	О-12	Комплексы полиэлектролитов с ионами металлов как прекурсоры в процессах синтеза наноразмерных частиц <i>Озерин А.С., Радченко Ф.С., Новаков И.А.</i> Волгоградский государственный технический университет, Волгоград
15:20-15:35	О-13	Polymer-Surfactant Soft Network <i>Molchanov V.S., Kvyatkovsky A.L., Orekhov A.L., Vasiliev A.L., Philippova O.E.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
15:40-15:55	О-14	Получение и физико-химические свойства композитов на основе сшитого, несшитого сульфированного поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида) и поли(3,4-этилендиокситиофена) <i>Шепелева А.С., Кубарьков А.В., Пышкина О.А., Сергеев В.Г.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, Хим. ф-т, Москва
16:00-16:15	О-15	Сверхкритический диоксид углерода в синтезе металлополимерных супрамолекулярных наноразмерных структур <i>Саид-Галиев Э.Е., Наумкин А.В., Хохлов А.Р., Штыкова Э.В.</i> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва
16:20-16:40	Кофе-брейк	
16:40-16:55	О-16	Медь-полимерные наноструктурированные покрытия с повышенной теплопроводностью <i>Силаева А.А., Квасников М.Ю., Макарова А.В.</i> Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва
17:00-17:15	О-17	Пористые композиционные материалы на основе биосовместимых полимеров для тканевой инженерии <i>Григорьев Т.Е., Луканина К.И., Шепелев А.Д., Антипова К.Г., Крашенинников С.В., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», Москва
17:20-17:35	О-18	Биоразлагаемые полимеры на основе лактида: от хирургических нитей к крепежным изделиям и «умным» имплантатам <i>Седуш Н.Г., Демина В.А., Крашенинников С.В., Калинин К.Т., Чвалун С.Н.</i> РТУ МИРЭА, Москва
17:40-19:00	СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ 1 (P1 – P51)	
19:00	Ужин	

10/10/16, среда

09:00-13:30	Теория и компьютерное моделирование полимерных нанокомпозитов <i>Председатели: С.А. Патлажан, С.В. Люлин</i>	
09:00-09:40	PL-10	Modeling of Thermo-mechanical Behavior of Polymer and Polymer Nanocomposites with the Effects of Porosity: Towards Application in Membranes for Water Treatment <i>Said Ahzi</i> Qatar Environment & Energy Research Institute HAMAD BIN KHALIFA UNIVERSITY, Qatar Foundation, QATAR
09:45-10:25	PL-11	Перспективы атомистического моделирования: от механизмов образования углеродных наноструктур до свойств полимерных композитов <i>Стегайлов В.В., Логунов М.О., Орехов Н.Д., Остроумова Г.М.</i> ОИВТ РАН, Москва
10:30-10:50	O-19	Flow state diagrams of two-phase liquid in coaxial capillaries <i>Vagner S.A., Patlazhan S.A.</i> Institute of Problem of Chemical Physics of RAS, Chernogolovka, Russia
10:55-11:15	Кофе-брейк	
11:15-11:55	PL-12	Multiscale Simulation of Polymer Nanocomposites with Crosslinked Matrix <i>Хохлов А.Р.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический ф-т, Москва
12:00 -12:30	O-20	Molecular switches based on the grafted layers of amphiphilic homopolymers: computer modeling <i>Vasilevskaya V.V., Lazutin A.A.</i> Nesmeyanov Institute of Organoelement compounds of RAS, Moscow, Russia
12:35- 12:55	O-21	Microphase separation in polyelectrolyte melts: mesoscale simulation <i>Gavrilov A., Chertovich A.</i> Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
13:00 -13:30	Круглый стол <i>Председатели: С.В. Люлин, С.А. Патлажан</i>	
14:00-15:00	Обед	

15:00-18:05	Теория и компьютерное моделирование полимерных нанокомпозитов <i>Председатель: Е.Ю. Крамаренко</i>	
15:00-15:15	О-22	Сравнительный анализ внутримолекулярной подвижности силоксановых и карбосилановых дендримеров. Компьютерное моделирование <i>Курбатов А.О., Балабаев Н.К., Мазо М.А., Крамаренко Е.Ю.</i> Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
15:20-15:35	О-23	Влияние размера полярных групп на конформационное поведение жесткой дипольной цепи <i>Гордиевская Ю.Д., Крамаренко Е.Ю.</i> МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва
15:40-15:55	О-24	Dynamics of Conformational Transitions in nano-DNA <i>Zubova E.A., Kovaleva N.A.</i> N.N. Semenov Institute of Chemical Physics of RAS, Moscow, Russia
16:00-16:15	О-25	Исследование термодинамических свойств полисилоксановых наногелей и дендримеров <i>Сармини Ю.А., Сологубов С.С., Смирнова Н.Н., Музафаров А.М.</i> Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород
16:20-16:40	Кофе-брейк	
16:45-17:25	PL-13	Наноструктурированные multifunctional частицы: получение, свойства, биомедицинские применения <i>Горин Д.А.</i> Сколковский институт науки и технологий, Москва
17:30-17:45	О-26	Триазин-триазольные сверхразветвленные полимеры как класс новых перспективных энергоемких связующих <i>Петров А.О., Малков Г.В., Карпов С.В., Гавришова Т.Н., Шастин А.В., Бадамшина Э.Р.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
17:50-18:05	О-27	Олиго- и полидиметилсилоксановые производные на основе возобновляемых природных ресурсов <i>Дроздов Ф.В., Ардабьевская С.Н., Музафаров А.М., Тарасенков А.Н., Демченко Н.В., Бузин М.И., Миленин С.А.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
19:00	Ужин	

11/10/18, четверг

08:30-12:10	Полимерные композиционные наноматериалы для аддитивных технологий <i>Председатели: А.Н. Озерин, М.А. Щербина</i>	
08:30-09:10	PL-14	Реология нефти <i>Малкин А. Я.</i> Институт нефтехимического синтеза РАН, Москва
09:15-09:55	PL-15	Применение аддитивных технологий для печати изделий термостойкими полимерами и нанокompозитами на их основе <i>Юдин В.Е., Ваганов Г.В., Поляков И.В.</i> ИВС РАН, Санкт-Петербург
10:00-10:20	Кофе-брейк	
10:20-11:00	PL-16	Предсказательное Моделирование Процессов Аддитивного Производства на Основе Высокопроизводительных Вычислений <i>Потапкин Б.В., Закиров А.В., Корнеев Б.А. Богданова М.В. Белоусов С.А. Перепелкина А. Ю., Левченко В.Д., Степанов А.Е.</i> НИЦ "Курчатовский институт", Москва
11:05-11:45	PL-17	Аддитивные технологии для биомедицины <i>Панченко В.Я.</i> ИПЛИТ РАН, Москва
11:50-12:10	О-28	Композитные материалы на основе углеродных нанотрубок <i>Насибулин А.Г.</i> Сколковский институт науки и технологий, Москва
12:15-13:00	СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ 2 (P52 – P112)	
13:00-14:00	Обед	
14:00-18:45	КРУГЛЫЙ СТОЛ «Состояние и перспективы развития аддитивных технологий» <i>Председатель: С.Н. Чвалун, В.Е. Юдин</i>	
14:00-14:05	Открытие Круглого Стола	
14:05-14:35	R-1	Применение аддитивных технологий в химических исследованиях и смежных областях <i>Гордеев Е.Г., Анаников В.П.</i> ИОХ РАН, Москва
14:40-15:10	R-2	Аддитивные технологии в производстве композитов <i>Полежаев А.В.</i> ИНЭОС РАН им. А.Н. Несмеянова, Москва

15:15-15:35	R-3	Технология аддитивного производства изделий из композитных материалов, армированных непрерывными волокнами <u>Гольдт И.В.</u> Кластер Промышленных Технологий Фонда “Сколково”, Москва
15:40-16:10	R-4	Синхротронные и нейтронные методы визуализации - от объектов культурного наследия до изделий аддитивных технологий <u>Сенин Р.А.</u> НИЦ "Курчатовский институт", Москва
16:15-16:35	<i>Кофе-брейк</i>	
16:40-17:10	R-5	Российские достижения в медицинской 3D печати <u>Горбатов Р.А.</u> Ассоциация специалистов по 3D печати в медицине, Москва
17:15-17:25	R-6	Получение и исследование полиимидных композиционных материалов с применением аддитивных технологий <u>Поляков И.В., Ваганов Г.В., Юдин В.Е., Иванькова Е.М., Попова Е.Н., Елоховский В.Ю.</u> ИВС РАН, Санкт-Петербург, Россия
17:30-17:50	R-7	Армированные компосты для 3D печати <u>Шульга Е.В.</u> Сколковский институт науки и технологий, Москва
17:55-18:15	R-8	Проектирование и серийное аддитивное производство <u>Косырева А.Н., Ермолин И.Ю.</u> ООО «ФИТНИК», Москва
18:20-18:40	R-9	<u>Годовский Д.Ю.</u> LG Chem, Москва
18:45-19:30	<i>Подведение итогов Круглого стола. Фуришет</i>	
19:30	<i>Ужин</i>	

12/10/18, пятница

09:00-12:20	Современные методы исследования наночастиц и полимерных нанокомпозитов <i>Председатели: А.Н. Озерин, С.А. Патлажан</i>	
09:00-09:40	PL-18	Quantitative Measurement of Dislocation Parameters in Semicrystalline Polymers for the Optimization of Mechanical Properties <i>Michael Zehetbauer</i> University of Vienna, Faculty of Physics, Vienna, Austria
09:45-10:15	PL-19	Компьютерное моделирование полимерных систем <i>Чертович А.В.</i> МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва
10:20-10:50	PL-20	Программный комплекс Materials Studio - молекулярное моделирование при решении структурных задач для частично упорядоченных систем <i>Щербина М.А., Бакиров А.В., Чвалун С.Н.</i> ИСПИМ РАН, Москва, Россия
10:55-11:15	Кофе-брейк	
11:15-11:45	О-29	Наноразмерные ламелярные образования в длинно-цепочечных молекулярных кристаллах и полиэтилене: специфика фазовых переходов в кристаллах типа КВЦ и складчатых кристаллах <i>Марихин В.А., В.М. Егоров, Л.П. Мясникова</i> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург
11:50-12:20	Круглый стол <i>Председатели: А.Н. Озерин, С.А. Патлажан</i>	
12:20-13:00	Заккрытие конференции	
13:00-14:00	Обед	

14:30 – отправление в Москву

Poster session 1 (October 09) / Стендовая сессия 1 (09 октября): P1-P51

P-1	<p>Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии химической структуры поверхностного слоя композиционных полимерных мембран <i>Алтынов В.А., Кравец Л.И., Яблоков М.Ю., Ярмоленко М.А.</i> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна</p>
P-2	<p>Новые борорганические производные стереорегулярного <i>цис</i>-тетрафенилциклотетрасилоксана для получения супрамолекулярных систем нового поколения <i>Анисимов А.А., Дроздов Ф.В., Долгушин Ф.М., Щеголихина О.И., Музафаров А.М.</i> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова, Москва</p>
P-3	<p>Пленочные материалы из возобновляемого сырья на основе полиамидсилоксановых блок-сополимеров, наполненные наночастицами TiO₂ для придания антибактериальной активности <i>Ардабьевская С.Н., Селезнева Е.В., Миленин С.А., Бузин М.И., Музафаров А.М.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва</p>
P-4	<p>Стабильность металлосодержащих эпоксидных нанокомпозитов <i>Богданова Л.М., Шеринёв В.А., Спиринов М.Г., Иржак В.И., Джардималиева Г.И.</i> Институт проблем химической физики РАН, г.Черноголовка Московской обл.</p>
P-5	<p>Исследование полимеризации дихлорзамещенного <i>п</i>-ксилилена методом <i>in situ</i> ДСК <i>Бузин А.И., Стрельцов Д.Р., Дмитрияков П.В., Чвалун С.Н.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва</p>
P-6	<p>Влияние молекулярной массы хитозана на кинетику восстановления серебра в его растворах <i>Волков Д.А., Малахов С.Н., Григорьев Т.Е.</i> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва</p>
P-7	<p>Последовательное гидротилирование и гидросилилирование как новый подход к созданию амфифильных кремнийорганических структур <i>Высочинская Ю.С., Анисимов А.А., Темников М.Н., Щеголихина О.И., Музафаров А.М.</i> ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва</p>
P-8	<p>Перспективные направления в разработке перевязочных средств <i>Гадельшина И.Н., Зенитова Л.А.</i> КНИТУ, Казань</p>
P-9	<p>Синтез и свойства полидиметилсилоксанов с фрагментами карбоновых кислот различного строения <i>Городов В.В., Тихонов П.А., Миленин С.А., Андропова У.С., Бузин М.И., Васильев В.Г., Шрагин Д.И., Музафаров А.М.</i> ИСПМ РАН им. Н.С. Ениколопова, Москва</p>
P-10	<p>Композиты биомедицинского назначения на основе полилактида и модифицированных фосфатов кальция <i>Демина В.А., Бабичева А.А., Седуш Н.Г., Крашенинников С.В., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва</p>
P-11	<p>Получение силиконовых вулканизатов на основе графт-сополимеров винилполисилоксана и стирола по реакции гидросилилирования <i>Добрынин М.В., Маслородова Е.А., Исламова Р.М.</i> Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург</p>

P-12	<p>Гидросилилирование полисилоксанов с помощью комплексов Rh(I), Pt(II) и Ir(III) <i>Добрынин М.В., Исламова Р.М.</i> Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург</p>
P-13	<p>Надмолекулярная структура реакционноспособных олигомеров при смешении и в условиях химических превращений <i>Жаворонок Е.С., Сенчихин И.Н., Чалых А.Е.</i> РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва</p>
P-14	<p>Синтез наночастиц серебра в облученных водных суспензиях поливинилтриазола: кинетика формирования и pH-контроль размеров <i>Жариков А.А., Климов Д.И., Зезин А.А., Абрамчук С.С., Фирсова Г.Ф., Поздняков А.С., Емельянов А.И.</i> МГУ им. Ломоносова, Химический факультет, Москва</p>
P-15	<p>Влияние биоразлагаемого наполнителя на основе полилактида на реологическое поведение термотропных гидрогелей хитозана для челюстно-лицевой хирургии <i>Загоскин Ю.Д., Григорьев Т.Е., Кузнецов Н.М., Бухарова Т.Б., Васильев А.В., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва</p>
P-16	<p>Гидрогели на основе тройных блок-сополимеров лактида и полиэтиленгликоля: структура и свойства <i>Загоскин Ю.Д., Григорьев Т.Е., Бакиров А.В., Богданова О.И., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва</p>
P-17	<p>Tolyl-containing silsesquioxanes of different structures are precursors for obtaining of new supramolecular systems <i>P.A. Zader, A.A. Anisimov, A.A. Korlyukov, Shchegolikhina O.I., A.M. Muzafarov</i> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia</p>
P-18	<p>Влияние Способа Выделения Нанофибрилл β-хитина на Механические Свойства Композитов на Основе Полиакриловой Кислоты <i>А.П. Истомина, О.И. Богданова, Н.А. Глушкова, С.И. Белоусов, С.В. Крашенинников, Д.Р. Стрельцов, С.Н. Чвалун</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва</p>
P-19	<p>Термическая стабильность и биологическая устойчивость гибридного наноматериала на основе желатина и полиметилметакрилата <i>Морозова Е.А., Кузнецова Ю.Л., Вавилова А.С., Семеньчева Л.Л.</i> Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород</p>
P-20	<p>Структурные особенности образования сверхразветвленных полимеров из мономеров $AB_2 + B_3$ с различной и изменяющейся по ходу процесса реакционной способностью функциональных групп <i>Карпов С.В., Малков Г.В., Якуньков А.Г.</i> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка</p>
P-21	<p>Сверхразветвленные триазолсодержащие полимеры на основе изофорондиизоцианата <i>Карпов С.В., Малков Г.В., Перепелицина Е.О.</i> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка</p>
P-22	<p>Исследование процессов формирования макромолекулярных нанообъектов при полиприсоединении смесей мономеров $AB_2 + A_2 + B_4$ <i>Карпов С.В., Малков Г.В., Якуньков А.Г.</i> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка</p>

P-23	Дизайн и синтез комплексных соединений на основе бис-β-дикетонатов переходных металлов <i>Ким Э.Е., Кононович Ю.Н., Корлюков А.А., Володин А.Д., Музафаров А.М.</i> Российский Химико-Технологический Университет им. Д. И. Менделеева, Москва
P-24	Наноразмерные структуры в аморфных стеклообразных полимерах, их связь с особенностями в терагерцовых спектрах <i>Китай М.С., Назаров М.М.</i> ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва
P-25	Радиационно-химический метод синтеза биметаллических наночастиц в полимерных матрицах и покрытиях <i>Климов Д.И., Зезин А.А., Чвалун С.Н., Абрамчук С.С., Зезина Е.А.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
P-26	Computer modeling of microfiber formation in flowing binary blend of incompatible fluids <i>I.V. Kravchenko, S.A. Patlazhan</i> Institute of Problems of Chemical Physics of RAS, Moscow
P-27	Рентгенографическое исследование образцов поли(1-триметилсилил-1-пропина) в области широких углов дифракции <i>Левин И.С., Матсон С.М., Хотимский В.С.</i> Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва
P-28	Комбинированные режимы диффузии в гетерогенных средах <i>Лихоманова П.А., Калашиников И.Ю., Кудрявцев Е.М.</i> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
P-29	Исследование ориентационных эффектов в упорядоченных волоконных полимерных материалах, полученных методом электроспиннинга <i>Луканина К.И., Ребров И.Е., Григорьев Т.Е., Крашенинников С.В., Бузин А.И., Бакиров А.В., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», Москва
P-30	Исследование теплофизических свойств и фазового поведения гибридных дендримеров с различной жесткостью ядра и оболочки <i>Миленин С.А., Серкова Е.С., Селезнева Е.В., Краснова И.Ю., Бузин М.И., Корлюков А.А., Черкаев Г.В., Шифрина З.Б., Музафаров А.М.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
P-31	Кремнеземные наногели V-типа с нонильными и триэтиленоксидными группами в оболочке: самоорганизация на границе раздела вода–воздух и в растворах <i>Малахова Ю.Н., Бузин А.И., Бакиров А.В., Малахов С.Н., Стрельцов Д.Р., Горбачев О.Б., Казакова В.В., Музафаров А.М.</i> РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва
P-32	Влияние природы растворителя на стабильность комплекса тетраанилина с камфорсульфоновой кислотой и способность к формированию ленгмюровских монослоев <i>Малахова Ю.Н., Щербань В.В., Коровин А.Н., Малахов С.Н., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», КК НБИКС-пт, Москва
P-33	Synthesis of Magnetic Vitrimer Nanocomposites <i>A. I. Varabanova, V. S. Molchanov, O. E. Philippova, A. R. Khokhlov</i> Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

P-34	Комплексы из Червеобразных Мицелл Анионного Поверхностно-Активного Вещества и Гидрофобного Полимера <i>Квятковский А.Л., Молчанов В.С., Филиппова О.Е.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва
P-35	Влияние условий формирования на морфологию островковых пленок на начальных стадиях роста поли-пара-ксилиленовых покрытий <i>Несмелов А.А., Митько А.С., Стрельцов Д.Р., Дмитрияков П.В.</i> НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва
P-36	Комплексы поликатионов с кислотными остатками алифатических кислот <i>Повшедная М.Д., Зорин И.М., Фетин П.А, Билибин А.Ю.</i> СПбГУ, Санкт-Петербург
P-37	Синтез Представителей Нового Класса Триазин-Триазольных Сверхразветвленных Полимеров: Полимеризация в Блоке <i>Петров А.О., Малков Г.В., Гавришова Т.Н., Шастин А.В.</i> Институт проблем химической физики, Черноголовка
P-38	Синтез Представителей Нового Класса Триазин-Триазольных Сверхразветвленных Полимеров: Реакция CuAAC в Растворе <i>Петров А.О., Малков Г.В., Люденцан Н.А., Цыганова А.В., Карнов С.В., Гавришова Т.Н., Шастин А.В.</i> Институт проблем химической физики, Черноголовка
P-39	Microfluidic-Assisted Elaboration of Polymeric Nanoparticles as Potential Carriers for Biomedical Applications <i>S. Ding, W. Yu, A. Kavand, M.F. Attia, J. Wallyn, C.A. Serra, D. Chan-Seng, N. Anton, T.F. Vandamme</i> Université de Strasbourg, CNRS, Strasbourg, France
P-40	Enzymatically-Cleavable Branched Polymers Grafted on Upconverting Nanoparticles for Theranostics <i>A. Kavand, C.A. Serra, N. Anton, T. Vandamme, D. Chan-Seng</i> Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, Strasbourg, France
P-41	A Facile Method to Control the Growth of Upconversion Nanocrystals: A Focus on Heat Treatment <i>A. Kavand, C.A. Serra, D. Chan-Seng, N. Anton, T. Vandamme, F. Przybilla</i> Université de Strasbourg, CNRS, Strasbourg, France
P-42	Layer By Layer Surface Treatment for the Formation of Double Emulsions in PDMS Microchips <i>D. Funfschilling, B. Peter, N. Dumas, C.A. Serra</i> Université de Strasbourg, CNRS, Strasbourg, France
P-43	Морфология мицелл на основе ПЛА/ПЭО блок-сополимеров различного состава и строения в разбавленных водных растворах <i>Разуваева Е.В., Кулебякина А.И., Стрельцов Д.Р., Бакиров А.В., Штыкова Э.В., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», Москва
P-44	Амфифильные блок-сополимеры, синтезированные гетрофазной полимеризацией в присутствии полиакриловой кислоты с третиокарбонатной группой <i>Серхачева Н.С., Минеева К.О., Смирнов А.В., Черникова Е.В., Прокопов Н.И.</i> МИРЭА - Российский технологический университет, Москва
P-45	Синтез новых четырехлучевых звездообразных олигоимидов <i>Солдатова А.Е., Цегельская А.Ю., Семенова Г.К., Абрамов И.Г., Кузнецов А.А.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Ениколопова, Москва

P-46	Исследование закономерностей образования белковых конъюгатов золотых наночастиц методом флуоресцентной спектроскопии <i>Сотников Д.В., Иванов В.С., Жердев А.В., Дзантиев Б.Б.</i> Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН, Москва
P-47	Исследование кинетики полимеризации <i>n</i>-ксилилена и хлор-<i>n</i>-ксилилена методом <i>in situ</i> дифференциальной сканирующей калориметрии <i>Стрельцов Д.Р., Бузин А.И., Дмитрияков П.В., Чвалун С.Н.</i> Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва
P-48	Влияние формы мезогенной группы на структуру супрамолекулярных агрегатов, сформированных жесткими секторообразными и конусообразными дендронами <i>А.А. Ступников, Ю.Н. Малахова, А.В. Бакиров, М.А. Щербина, С.Н. Чвалун</i> МТУ, институт тонких химических технологий, Москва
P-49	Синтез и свойства звездообразных полимеров с карбосилановыми ядрами и полидиметилсилоксановыми (ПДМС) лучами <i>Тихонов П.А., Черкаев Г.В., Демченко Н.В., Татарина Е.А., Василенко Н.Г., Васильев В.Г., Бузин М.И., Музафаров А.М.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
P-50	Определение количества малых анионных липосом, связанных с термочувствительным положительно заряженным микрогелем <i>Якимова Т.М., Иваишков О.В., Ярославов А.А., Хи W., Rich A.</i> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва
P-51	Инкапсулирование полидиметилсилоксана <i>Борисов К.М., Бокова Е.С., Калинина А.А., Япрынцев А.Д., Стрельцов Д.Р., Музафаров А.М.</i> Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина, Москва

Poster session 2 (October 11) / Стендовая сессия 2 (11 октября): P52-P112

P-52	Композитные материалы на основе поли(3,4-этилендиокситиофена) и сульфированного поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида) <i>Бодаев В.О., Шепелева А.С., Пышкина О.А., Сергеев В.Г.</i> МТУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва
P-53	Композиционные материалы на основе частично фосфорилированного поливинилового спирта и полианилина <i>Скоробогатов Е.В., Шепелева А.С., Пышкина О.А.</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва
P-54	Структура наномодифицированных эпоксидных композитов <i>Абдрахманова Л.А., Хозин В.Г., Низамов Р.К.</i> Казанский государственный архитектурно-строительный университет, Казань
P-55	Получение и исследование свойств нанокомпозитов на основе полиимида и металлоалкоксисилоксанов <i>Андропова У.С., Тарасенков А.Н., Тебенева Н.А., Сапожников Д.А., Серенко О.А., Музафаров А.М.</i> Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва

P-56	Система ориентированной укладки нано- и микроволокнистых полимерных материалов с помощью генераторов высоковольтных импульсов методом электроспиннинга <i>Антипова К.Г., Ребров И.Е., Григорьев Т.Е., Чвалун С.Н.</i> а НИЦ «Курчатовский институт», Москва
P-57	Исследование механики модифицированных диафрагм крыс <i>Антипова К.Г., Луканина К.И., Крашенинников С.В., Григорьев Т.Е., Чвалун С.Н.</i> НИЦ «Курчатовский институт», Москва
P-58	Синтез и фотофизические свойства флуоресцентных красителей на основе силоксановых матриц и производных DBMBF₂ <i>Белова А.С., Кононович Ю.Н., Сажников В.А., Сурин Н.М., Свидченко Е.А., Музафаров А.М.</i> ИНЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва
P-59	Высокопроизводительные стабильные ультрафильтрационные мембраны на основе полисульфона и наноцеллюлозы <i>Анохина Т.С., Борисов И.Л., Василевский В.П., Петрова Д.А., Винокуров В.А., Волков А.В.</i> Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва
P-60	Новые эффективные люминофоры: только красивая химия или новые перспективы в органической фотонике и электронике <i>Борщев О.В., Скоротецкий М.С., Сурин М.Н., Пономаренко С.А.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
P-61	Synthesis and characterization of silver-chitosan nanocomposites: from powders to films <i>Budnikov A.V., Naumkin A.V., Elmanovich I.V., Rubina M.S., Vasil'kov A.Yu.</i> A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS, Moscow, Russia
P-62	Гетерогенные каталитические магнитоотделяемые пористые системы на основе дендритных макромолекул <i>Букина А.В., Сорокина С.А., Кучкина Н.В., Шифрина З.Б.</i> РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва
P-63	Изменение структуры и морфологии поверхности композита на основе ПТФЭ с квазикристаллическим наполнителем Al-Cu-Fe при трении <i>Головкова Е.А., Белоусов С.И., Кондратьев О.А., Кукуева Е.В., Теплов А.А., Цетлин М.Б.</i> НИЦ «Курчатовский институт», Москва
P-64	Effect of Counterion Excluded Volume on the Conformational Behavior of a Flexible Polyelectrolyte Chain in Low-polar Solvent <i>Gordievskaya Yu.D., Kramarenko E.Yu.</i> Lomonosov Moscow State University, Moscow
P-65	Формирование элементов интегрально-оптических устройств в электрооптических полимерах методом лазерного фотоосветления <i>Василенко Е.С., Ашарчук И.М., Горячук И.О., Крылов И.В., Погодина Ю.Е., Полунин Е.В., Соколов В.И.</i> Институт Фотонных Технологий РАН, ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, Москва
P-66	Физико-механические характеристики губчатых материалов на основе полилактонов <i>Григорьев Т.Е., Загоскин Ю.Д., Крашенинников С.В., Токаев К.В., Токаев Т.К., Севастьянов В.И., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

P-67	Металлсодержащие нанокompозиты на основе сополимеров 1-винил-1,2,4-триазола и винилацетата <i>Ермакова Т.Г., Кузнецова Н.П., Коржова С.А., Поздняков А.С., Зезин А.А., Прозорова Г.Ф.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
P-68	Получение кремнийорганических смол на основе сополимера регулярного строения <i>С.Н. Зимовец, М.Н. Темников, А.М. Музафаров</i> ИСПМ им. Н. С. Ениколопова РАН, Москва
P-69	Влияние содержания наполнителя в пленках полимерных нанокompозитов поли-<i>n</i>-ксилилен – PbSe на спектральные свойства и структуру <i>Иванова О.П., Криничная Е.П., Кривандин А.В., Завьялов С.А., Журавлева Т.С.</i> Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва
P-70	Синтез полиметилсилсесквиоксанов различной структуры <i>Калинина А.А., Холодков Д.Н., Мешков И.Б., Пигалева М.А., Эльманович И.В., Галлямов М.О., Музафаров А.М.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН, Москва
P-71	Новые реакционные олигоимиды с пропаргиловыми фрагментами <i>Колесников Т.И., Цегельская А.Ю., Дутов М.Д., Кузнецов А.А.</i> МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва
P-72	New pyridyl-phenylene macromolecular compounds as stabilizing agents for catalysis <i>Korolkova A.A., Torozova A.S., Serkova E.S., Shifrina Z.B.</i> D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia
P-73	Молекулярно-динамический анализ топологии переплетения линейных полимеров в контакте с углеродными наночастицами <i>Логунов М.А., Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</i> Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный
P-74	Изменение механических свойств композиционных полимерных стоматологических материалов полученных методом 3D печати в условиях форсированного теплового старения <i>Крашенинников С.В., Левченко И.М., Луканина К.И., Григорьев Т.Е., Чвалун С.Н., Арутюнов С.Д.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
P-75	Высокопористые губчатые материалы на основе хитозана – перспективный матричный материал для применения в тканевой инженерии <i>Крашенинников С.В., Луканина К.И., Григорьев Т.Е.</i> Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт», Москва
P-76	Влияние формы наполнителя на электрореологические свойства полимерных жидкостей <i>Кузнецов Н.М., Столярова Д.Ю., Бакиров А.В., Белоусов С.И., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
P-77	Исследование структурной организации дисперсной фазы электрореологических жидкостей под действием электрического поля <i>Кузнецов Н.М., Столярова Д.Ю., Бакиров А.В., Белоусов С.И., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва

Р-78	Новые трифениламинсодержащие донорно-акцепторные олигомеры: синтез, свойства и применение <i>Луносов Ю.Н., Солодухин А.Н., Балакирев Д.О., Дмитрияков П.В., Перегудова С.М., Чвалун С.Н., Пономаренко С.А.</i> Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
Р-79	Исследование механических свойств монокитов на основе полилактида и наночитов хитина, модифицированных полиэтиленгликолем <i>К.В.Малафеев, О.А. Москалюк, В.Е. Юдин, Е.Н.Попова, В.Ю. Елоховский, Е.М. Иванькова, Р. Morganti</i> Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Санкт-Петербург
Р-80	Использование нетканых материалов, получаемых методом электроформования расплава полилактида, для удаления масляных загрязнений из воды <i>Малахов С.Н., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
Р-81	Нетканые композиционные материалы на основе полипропилена и карбоната кальция, полученные электроформованием расплава полимера <i>Малахов С.Н., Чвалун С.Н.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
Р-82	Получение нановолокон методом электроформования водных растворов соли полиамидокислоты, наполненной углеродными наночастицами <i>Матреничев В.В., Мяжкова Л.А., Светличный В.М., Власова Е.Н., Елоховский В.Ю., Ваганов Г.В., Иванькова Е.М., Юдин В.Е.</i> Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург
Р-83	Проводящие композиционные полимерные материалы на основе полимерных нановолокон и полипиррола <i>В. В. Матреничев, М. А. Шишов, П. В. Попрядухин, И. Ю. Сапурина, Е. М. Иванькова, И. П. Добровольская, В. Е. Юдин</i> Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург
Р-84	Полиэлектролитные комплексы на основе полиакриловой кислоты и би- и тетрафункциональных амфифильных веществ <i>Мечтаева Е.В., Гаврилова Д.А., Фетин П.А., Зорин И.М., Билибин А.Ю.</i> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
Р-85	Синтез привитых со-полиимид-полисилоксанов <i>Орлова А.М., Солдатова А.Е., Цегельская А.Ю., Миленин С.А., Шрагин Д.И., Кузнецов А.А.</i> ИСПМ РАН им. Ениколопова, г. Москва
Р-86	Синтез полимеризацией in situ и свойства композиций на основе полипропилена и наночитов углеродных наполнителей <i>Палазник О.М., Недорезова П.М., Клямкина А.Н., Польщиков С.В., Шевченко В.Г., Крашенинников В.Г., Монахова Т.В.</i> Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва
Р-87	Синтез полидиметилсилоксанов с гидроксильными группами, распределенными по цепи <i>Поляков Г.В., Щеголихина О.И., Калинина А.А., Музафаров А.М.</i> ИСПМ им. Н.С.Ениколопова, Москва

Р-88	Адгезионные свойства пленок полиэтилентерефталата, модифицированных в разряде постоянного тока <i>Пискарев М.С., Зиновьев А.В., Кечекьян А.С., Гильман А.Б., Кузнецов А.А.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
Р-89	Контактные свойства, химическая структура и морфология поверхности пленок полиэтилентерефталата, модифицированных в разряде постоянного тока <i>Пискарев М.С., Гатин А.К., Гильман А.Б., Кузнецов А.А.</i> ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва
Р-90	Изучение влияния толщины мультислоев на рост и морфологию пленок на основе Na-КМЦ/хитозан <i>Савденбекова Б.Е., Оспанова А.К., Уваров Н.Ф.</i> Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан
Р-91	Формирование металлополимерных нанокомпозитов из термореактивных систем <i>Сенчихин И.Н., Урюпина О.Я., Уродкова Е.К.б, Хасанова Р.Р., Жаворонок Е.С.</i> ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва
Р-92	Luminescent bithiofensilane dendrimers with effective and fast intramolecular energy transfer <i>M.S. Skorotetcky, E.A. Kleymyuk, O.V. Borshchev, N.M. Surin, S.A. Ponomarenko</i> Enikolopov Institute of Synthetic Polymer Materials RAS, Moscow, Russia
Р-93	Синтез диметилсилоксандиолятов натрия в качестве реагентов для получения высокофункциональных олигомеров и полимеров <i>Талалаева Е.В., Калинина А.А., Чернов Е.В., Белова Л.О., Демченко Н.В., Музафаров А.М.</i> ИСПМ им. Н. С. Ениколопова, Москва
Р-94	О перспективности суспензий монтмориллонита модифицированного кватернизованным полидиметилсилоксаном в качестве электрореологической жидкости <i>Столярова Д.Ю., Кузнецов Н.М., Городов В.В., Белоусов С.И., Чвалун С.Н., Музафаров А.М.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
Р-95	Электрореологические свойства суспензий на основе силиконового масла и слоистых алюмосиликатов модифицированных кватернизованным полидиметилсилоксаном <i>Каприелова М.С., Неманова Н.В., Столярова Д.Ю., Городов В.В., Кузнецов Н.М., Белоусов С.И., Чвалун С.Н., Музафаров А.М.</i> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва
Р-96	Нанокомпозиты на основе эпоксидной смолы ЭД-20 и наночастиц серебра с олигостирилкарбоксилатными лигандами <i>Гурьева Л.Л., Кузуб Л.И., Тарасов А.Е., Бадамшина Э.Р.</i> Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка
Р-97	Исследование влияния фуллерена, функционализированного теломерами тетрафторэтилена, на свойства отвержденного эпоксиаминного нанокомпозита <i>Тарасов А.Е., Гарифуллин Н.О., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р., Кирюхин Д.П.</i> Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

P-98	Природа эффектов разного вида воздействий и наночастиц анатаза на поли-N-винилкапролактам <i>Тимаева О.И., Сафьянова Л.В., Чихачева И.П., Кузьмичева Г.М., Кубракова И.В.</i> МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва
P-99	Получение и физико-химические свойства композиционных гидрогелей на основе поли-N-винилпирролидона с наночастицами оксида титана(IV) <i>Тимаева О.И., Кузьмичева Г.М., Пашкин И.И.</i> МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва
P-100	ПДМС с регулярно распределенными функциональными группами <i>Темников М.Н., Зимовец С.Н.в, Музафаров А.М.</i> Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, Москва
P-101	Роль гребнеобразного полиэлектролита при создании упорядоченных структур интерполиэлектролитных комплексов <i>П.А. Фетин, И.А. Макаров, Е.В. Мечтаева, М.Д. Повшедная, И.М. Зорин, А.Ю. Билибин</i> Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
P-102	Obtaining functional fibrous materials based on polylactide by the mechanism of crazing <i>Khayrachev M.A., Trofimchuk E.S., Nikonorova N.I., Uspenskii S.A.</i> M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
P-103	Органо-неорганические наноконпозиты со структурой полувзаимопроникающих сеток <i>Трофимчук Е.С., Мешков И.Б., Никонова Н.И., Москвина М.А., Хавначев М.А., Музафаров А.М., Волынский А.Л.</i> Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
P-104	The development of building blocks for organometallic dendrimers <i>D.U. Khaitmetova, E.S. Serkova, A.A. Chamkin, Z.B. Shifrina</i> Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia
P-105	Синтез кремнеземных наногелей с амфифильным поверхностным слоем <i>Холодков Д. Н., Казакова В. В., Музафаров А. М.</i> Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН
P-106	Участие поли-N-винилкапролактама в синтезе нанодиоксида титана и композиций на его основе <i>Чихачева И.П., Пашкин И.И., Лобанова Н.А., Шумова Т.Б., Терехова Р.П.</i> МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва
P-107	Structural characterization of novel chitosan aerogels with silver nanoparticles prepared via eco-sustainable approach <i>Shulenina A.V., Elmanovich I.V., Rubina M.S., Vasil'kov A.Yu., Peters G.S., Svetogorov R.D.</i> Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia
P-108	Контроль размера и свойств коллоидного золота блок-сополимерами тирозина и этиленоксида <i>Якимов Н.П., Мелик-Нубаров Н.С., Еремина Е.А</i> МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
P-109	ИК-спектроскопическое исследование структуры наноконпозитов поливиниловый спирт/полиакриламид/клиноптилолит <i>Дабижжа О.Н.</i> Забайкальский государственный университет, Чита

P-110	<p>Синтез и строение кремнийсодержащего полиакрилонитрила <u>Попова Н.А., Молоткова Н.Н., Кузнецова М.Г., Мадоян А.М., Степанов Г.В.,</u> <u>Грачев А.А., Бровкина Е.Ю., Алексеева Е.И., Драчев А.И., Стороженко П.А.</u> АО “Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений”, Москва</p>
P-111	<p>Conducting composite materials based on polyimides filled with carbon nanotubes <u>Ivanov V.S., Yegorov A.S., Bogdanovskaya M.V., Gudeeva D.S., Chayka V.A.</u> Federal State Unitary Enterprise «State Scientific Research Institute of Chemical Reagents and High Purity Chemical Substances», Moscow, Russia</p>
P-112	<p>Разработка полиимидного связующего для получения полимерного композитного материала армированного непрерывным волокном методом трехмерной печати <u>Богдановская М.В., Иванов В.С., Егоров А.С.</u> НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА, Москва</p>

PLENARY LECTURES

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

PL-1

Advanced Materials by Externally Controlled Atom Transfer Radical Polymerization

Krzysztof Matyjaszewski

*Center for Macromolecular Engineering, Department of Chemistry, Carnegie Mellon University,
4400 Fifth Avenue, Pittsburgh, Pennsylvania 15213*

km3b@andrew.cmu.edu

Atom transfer radical polymerization (ATRP) can be externally controlled and fine-tuned by pressure, temperature, solvents, pH and also by light, electrical current and mechanical forces. Examples of using temporal and spatial control for synthesis of advanced polymeric materials with complex architecture as well as hybrids and bioconjugates will be presented.

References

- (1) Pan, X.; Fantin, M.; Yuan, F.; Matyjaszewski, K., Externally controlled atom transfer radical polymerization, *Chemical Society Reviews* **2018**, *47*, 5457-5490.
- (2) Dadashi-Silab, S.; Matyjaszewski, K., Temporal Control in Atom Transfer Radical Polymerization Using Zerovalent Metals, *Macromolecules* **2018**, *51*, 4250-4258.
- (3) Wang, Z.; Wang, Z.; Pan, X.; Fu, L.; Lathwal, S.; Olszewski, M.; Yan, J.; Enciso, A. E.; Wang, Z.; Xia, H.; Matyjaszewski, K., Ultrasonication-Induced Aqueous Atom Transfer Radical Polymerization, *ACS Macro Letters* **2018**, *7*, 275-280.
- (4) Matyjaszewski, K., Advanced Materials by Atom Transfer Radical Polymerization, *Advanced Materials* **2018**, *30*, 1706441.
- (5) Chmielarz, P.; Fantin, M.; Park, S.; Isse, A. A.; Gennaro, A.; Magenau, A. J. D.; Sobkowiak, A.; Matyjaszewski, K., Electrochemically mediated atom transfer radical polymerization (eATRP), *Progress in Polymer Science* **2017**, *69*, 47-78.
- (6) Pan, X.; Tasdelen, M. A.; Laun, J.; Junkers, T.; Yagci, Y.; Matyjaszewski, K., Photomediated controlled radical polymerization, *Progress in Polymer Science* **2016**, *62*, 73-125.
- (7) Ribelli, T. G.; Konkolewicz, D.; Bernhard, S.; Matyjaszewski, K., How are Radicals (Re)Generated in Photochemical ATRP?, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 13303-13312.
- (8) Matyjaszewski, K.; Tsarevsky, N. V., Macromolecular Engineering by Atom Transfer Radical Polymerization, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 6513-6533.

PL-2

Can we use computer simulations to design nanocomposites for health care?

Mikko Karttunen^{a,b} and Sergey V. Lyulin^a

^a Department of Chemistry and Department of Applied Mathematics, The University of Western Ontario, London, Ontario, Canada

^b Institute of Macromolecular Compounds, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russia

E-mail: mkarttu@uwo.ca

Over the last 20 years, computer simulations have become a predictive and viable method for materials design. This is manifested particularly well in soft and biological matter research where molecular mechanisms and processes have been discovered with the aid of computer simulations, in particular via the use of the molecular dynamics method. In our own research we have used simulations to establish lipid and porphyrin based light-triggered nanocarriers for cancer drugs [1], to decipher the mechanisms behind drug release using designer peptides [2] and to study the miscibility of polylactide (PLA)/polyhydroxybutyrate (PHB) blends (Fig. 1) to be used in health care application together with nanocellulose [3]. In this talk we will discuss some of these efforts, future directions and limitations of computer simulation in the design of nanocomposites. In addition, the link between polymer physics and characterization of biopolymers, in particular peptides, will be discussed.

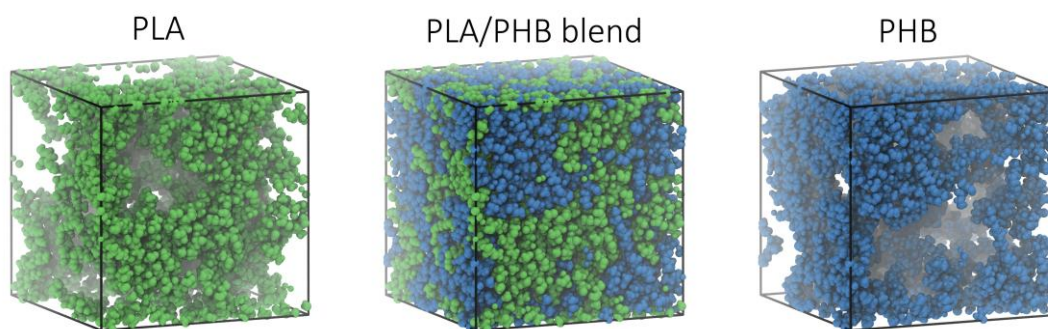


Fig. 1. Snapshots from an atomistic molecular dynamics simulation [3] of polylactide/polyhydroxybutyrate blends showing (left to right), the PLA component only, both PLA and PHB and the PHB component only. Figure: A. Glova.

References

- [1] Carter, K.A.; Shao, S.; Hoopes, M.I.; Luo, D.; Ahsan, B.; Grigoryants, V.M.; Song, W.; Huang, H.; Zhang, G.; Pandey, R.K.; Geng, J.; Pfeifer, B.A.; Scholes, C.P.; Ortega, J.; Karttunen, M.; Lovell, J.F. *Nature Comm.*, **2014**, 5, 3546.
- [2] S. Lu, S.; Bennett, W.F.D.; Ding, Y.; Zhang, L.; Fan, H.Y.; Zhao, D.; Zheng, T.; Ouyang, P.-K.; Li, J.; Wu, Y.; Xu, W.; Chu, D.; Yuan, Y.; Heerklotz, H.; Karttunen, M.; Chen, P. *Adv. Healthcare Mat.* **2015**, 4, 2709.
- [3] Glova, A; Falkovich, S.; Dmitrienko, S.; Lyulin, A.; Larin, S.; V. Nazaraychev, V.; Mikko Karttunen, M.; S. Lyulin, S. *Macromolecules*. **2018**, 51, 552.

This study has been supported by the Russian Ministry of Education and Science within State Contract 14.W03.31.0014 (MegaGrant).

PL-3

Interfacial activity of microgels and arborescent polymers: molecules or colloids

Martin Möller^{a,c}, Igor Potemkin^{a,b}, Xiaomin Zhu^a and Aziz Muzafarov^c

^a *DWI – Leibniz-Institute for Interactive Materials and RWTH Aachen University Institute of Technical and Macromolecular Chemistry, Forckenbeckstr. 50, 52056 Aachen*

^b *Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russian Federation*

^c *A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation*

E-mail: moeller@dwf.rwth-aachen.de

The presentation concerns the interfacial activity of branched polymers and small microgels with low- to medium-level cross-linking density. Compared to colloids that form a second, dispersed phase, the suspended swollen microgel particles are ultrahigh molecular weight molecules, which are dissolved like a linear polymer, so that solvent and solute constitute only one phase. In contrast to recent literature in which microgels are treated as particles with a distinct surface, we consider solvent–solute interaction as well as interfacial adsorption based on the chain segments that can form trains of adsorbed segments and loops protruding from the surface into the solvent. We point out experimental results that support this discrimination between particles and microgels. The time needed for swollen microgels to adsorb at the air/water interface can be 3 orders of magnitude shorter than that for dispersed particles and decreases with decreasing cross-linking density. Detailed analysis of the microgels deformation, in the dry state, at a solid surface enabled discrimination particle like microgel in which case spreading was controlled predominantly by the elasticity and molecule like adsorption characterized by a significant overstretching, ultimately leading to chain scission of microgel strands. Dissipative particle dynamics simulations confirm the experimental findings on the interfacial activity and spreading of microgel at liquid/air interface.

At the example of hyperbranched siloxane based polymers, it is demonstrated, how the interfacial activity can be employed for the formation of self-assembled hierarchical structures, such as stratified multilayer films, thin wall nanocapsules and silicasomes, high refractive index coatings, Janus-type particles for coatings with switchable surface properties and functional nanoparticles.

References

- [1] Zhao, Y., Liu, J., Chen, Z., Zhu, X., Möller, M., *Nature Communications* 2018, 9, 1918
- [2] Mourran, A., Wu, Y., Gumerov, R. A., Rudov, A. A., Potemkin, I. I., Pich, A., & Möller, M., *Langmuir*, 2016, 32(3), 723-730.

This work was supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) within the SFB 985 “Functional Microgels and Microgel Systems”, the Russian Foundation for Basic Research and the Government of the Russian Federation within Act 211, Contract No. 02.A03.21.0011, is gratefully acknowledged. M.M. thanks the Russian Ministry of Education and Science, Grant of the Government of the Russian Federation No.14.W03.31.0018 for the financial support.

PL-4

From inherently strained macromolecules to strain-adaptive tissue-mimetic materials

Sergei S. Sheiko

*Department of Chemistry, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, North Carolina, 27599-3290, USA
Email: sergei@email.unc.edu*

Mechanical activation of chemical bonds is usually regulated by external forces. However, many molecules exhibit inherent strain of their chemical bonds and angles as a result of constraints imposed by covalent bonding. Particularly strong strains are generated in brush-like macromolecules due to steric repulsion of densely grafted side chains. In addition to the tension amplification, branched architecture allows for accurate control of strain distribution, which enables focusing the internal mechanical tension to specific sections within individual macromolecules. In this case, chemically identical bonds in self-strained macromolecules become physically distinct since the difference in bond tension leads to the corresponding difference in the electronic structure and chemical reactivity. We outline different approaches to the design of strained macromolecules along with physical principles of tension management, including generation, amplification, and focusing of mechanical tension at specific chemical bonds. We also show that molecular bottlebrushes and combs can be used as building blocks for the programmable design of polymer networks with tissue-like mechanical properties. Initially supersoft, the brush-like elastomers rapidly enhances its stiffness with deformation. Through accurate control of the degree of polymerization (DP) of the side chains, the DP of the spacer between neighboring sidechains, and DP of the bottlebrush network strand, we are able to encode specific values for the Young's modulus, elongation-at-break, and strain-stiffening. These strain-adaptive synthetic materials may have vital implications in soft robotics, wearable electronics, and biomedical implants.

Разработка иммуноферментного диагностикума для обнаружения пг-количеств галактоманнана - антигенного полисахарида микопатогена *Aspergillus fumigatus*

Крылов В.Б.^a, Аргунов Д.А.^a, Тикунова Н.В.^b, Матвеев А.Л.^b, Лебедин Ю.С.^c
Нифантьев Н.Э.^a

^a *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

^b *ФГБУН Институт химической биологии и фундаментальной медицины СО РАН, Новосибирск, Россия*

^c *ООО «ХЕМА», Москва, Россия*

E-mail: nen@ioc.ru

Галактоманнан (ГМ) является специфическим углеводным антигеном, продуцируемым патогенными грибами рода *Aspergillus*. Использование ГМ в качестве биомаркера для диагностики инвазивного аспергиллеза у пациентов с ослабленным иммунитетом включено в российские и международные рекомендации, однако фактически монополюбно представленная на рынке иммуноферментная тест-система Platelia™ *Aspergillus* (BioRad), предназначенная для обнаружения ГМ, обладает существенными недостатками: высокой ценой и недостаточной специфичностью и кросс-реактивностью с полисахаридами ряда бактерий, включая компоненты нормальной микрофлоры ЖКТ.

В данном сообщении рассматриваются основные этапы в разработке новых «сэндвичевых» иммунологических диагностикумов двух типов на основе высокоспецифичных антигалактоманновых моноклональных антител [1], полученных с использованием впервые синтезированных олигосахаридных лигандов [2,3] и иммуногенов на их основе. При исследовании иммобилизации биотинилированных антител на покрытых стрептавидином лунках микропланшетов и магнитных частиц разработан протокол, позволяющий определять ГМ в биологических жидкостях в пикограммовых концентрациях (<100 пг/мл) при использовании диагностических приборов на основе роботизированных платформ. Разработанный иммуно-ферментный диагностикум проходит испытания для последующего внедрения в клиническую практику.

Литература

[1] Matveev A.L.; Krylov V.B.; Emelyanova L.A., Solovov A.S.; Khlusevich Y.A.; Baykov I.K.; Fontaine T.; Latgé J.-P.; Tikunova N.V.; Nifantiev N.E. *PLoS ONE* **2018**, *13*, e0193938.

[2] Krylov V. B.; Argunov D. A.; Vinnitskiy D. Z.; Verkhnyatskaya S. A.; Gerbst A. G.; Ustyuzhanina N. E.; Dmitrenok A. S. Huebner J.; Holst O.; Siebert H.-C.; Nifantiev N. E., *Chem. Eur. J.*, **2014**, *20*, 16516–16522.

[3] Argunov D.; Krylov V.; Nifantiev N., *Org. Lett.* **2016**, *18*, 5504–5507.

Работа выполнена при поддержке грантов РНФ 14-23-00199 (синтез олигосахаридов и иммуногенов, построение glycoarray-ев, анализ специфичности антител, построение тест-систем) и 16-14-00083 (получение моноклональных антител).

PL-6

Microfluidic-Assisted Elaboration of Polymeric Nanoparticles as Potential Carriers for Biomedical Applications

Shukai Ding¹, Wei Yu¹, Alireza Kavand^{1,2}, Mohamed F. Attia², Justine Wallyn²,
Christophe A. Serra^{1*}, Delphine Chan-Seng¹, Nicolas Anton², Thierry F. Vandamme²

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, CAMB UMR 7199, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

E-mail: mnpn@profcas.33mail.com

This lecture will address the development and application of advanced microfluidic technologies in nanoprecipitation and nanoemulsification for the preparation of monodisperse and size-controlled polymeric nanoparticles serving as nanocarriers for either the delivery of drugs or the encapsulation of contrast agents.

As an example, SPIONs-loaded PMMA NPs in the size range 100 to 200 nm were successfully prepared by two microfluidic methods, namely microfluidic-assisted nanoemulsification-evaporation and micromixer-assisted nanoprecipitation [1]. However, results shown that their morphologies and the distribution of SPIONs in the polymer nanoparticles were different. The former method allowed producing spherical nanoparticles with a homogeneous distribution of SPIONs (Fig. 1a) while the latter produced irregular nanoparticles with an unevenly distribution of inorganic nanoparticles at the surface (Fig. 1b). Nevertheless, the two methods allowed producing nanohybrids that exhibit strong magnetic responses and thus could serve as potential MRI contrast agents.

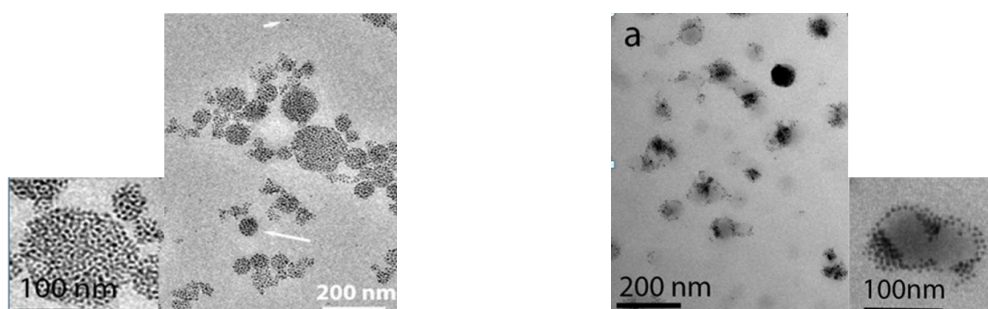


Fig. 1. SEM micrographs of SPIONs-loaded NPs produced by the nanoemulsification-evaporation method (a) and the micromixer-assisted nanoprecipitation method (b).

Reference

[1] Ding S., M.F. Attia, J. Wallyn, C. Taddei, C.A. Serra, N. Anton, M. Kassem, M. Schmutz, M. Er-Rafik., N. Messaddeq, A. Collard, W. Yu, M. Giordano and T.F. Vandamme, *Langmuir*, 34 (5) (2018) 1981–1991.

PL-7

Наночастицы и полимерные нанообъекты в функциональных полимерных нанокомпозитах: диэлектрические свойства и методы исследования

Шевченко В.Г.

Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук (ИСПМ РАН), г. Москва, Российская Федерация

E-mail: shev@ispm.ru

Наноразмерные частицы различной природы – одни из наиболее перспективных наполнителей при создании функциональных полимерных композитов. При этом наполнитель выступает в роли модификатора структуры и свойств полимера, движение которого связано с подвижностью окружающих частицу элементов структуры (полимерные цепи, кристаллиты, межфазные границы и интерфейсы), что позволяет изучать структуру нанокомпозита в масштабе, сопоставимом с размером наночастицы. Одним из мощных инструментов исследования такой подвижности является широкополосная диэлектрическая спектроскопия, охватывающая диапазон времен релаксации от 10^{-7} до 10^5 с.

В докладе рассмотрены как литературные данные, так и оригинальные результаты, полученные в тесном сотрудничестве с исследователями из ИХФ, ИСПМ и ИНЭОС РАН. В качестве нанонаполнителей использовали различные аллотропы наночуглерода (нанотрубки, производные графена, фуллерен), а также макромолекулярные нанообъекты – гибридные органо-неорганические частицы. Матрицей служили как кристаллические (полипропилен различной тактичности, ПЭО), так и аморфные (ПС, ПММА) полимеры.

Рассматриваются методы диэлектрических измерений и анализа полученных данных.

PL-8

New (X-DADAD)_n donor-acceptor copolymers for optoelectronic devices

Alexander V. Akkuratov (a), Iliya E. Kuznetsov (a), Irina V. Klimovich (a, b), Diana K. Susarova (a), Fedor A. Prudnov (a), and Pavel A. Troshin (a, b)

(a) *Institute for Problems of Chemical Physics of RAS, Semenov ave. 1, Chernogolovka, Moscow region, 142432, Russian Federation. E-mail: troshin2003@inbox.ru*

(b) *Skolkovo Institute of Science and Technology, Nobel st. 3, Moscow, 143026, Russian Federation*

Organic solar cells based on conjugated polymers demonstrated efficiencies approaching 8-10%. Unfortunately, the best-performing materials undergo rapid photochemical degradation. On the contrary, long operation lifetimes (7-15 years) have been projected for some less efficient polymers possessing robust chemical structures, e.g. PCDTBT.

In the present talk, we will present our strategy of designing PCDTBT-like polymers with narrowed band gaps using alternating DADAD architectures as building blocks (D – electron donor such as thiophene, while A is an acceptor like benzothiadiazole or benzoxadiazole) [1-3]. Synthesized polymers demonstrated diverse optoelectronic and photovoltaic characteristics. The best materials showed solar cell efficiencies approaching 7% in combination with long-term operation stability. Higher performances of 10-11% are feasible for single junction devices due optimal band gaps (1.60-1.65 eV) and deep-lying HOMO energy levels (~ -5.5 eV) of the designed materials.

The developed polymers enabled fabrication of larger area solar cells under ambient conditions in air using slot die coating which is a roll-to-roll compatible film deposition technology [4]. The roll-coated devices exhibited impressive power conversion efficiency of >6%. The applications of some of the designed polymers in organic field-effect transistors, chemical sensors, photodetectors and perovskite solar cells will also be discussed.

[1] A. V. Akkuratov, et al., *Macromolecules* **2015**, 48, 2013

[2] I. E. Kuznetsov, et al., *Chem. Comm.*, **2015**, 51, 7562

[3] A V. Akkuratov, et al., *J. Mater. Chem. C*, **2015**, 3, 1497

[4] I. Burgués-Ceballos et al., *ChemSusChem*, **2015**, 8, 4209

PL-9

Фото- и электроактивные ЖК полимеры и композиты

А.Ю. Бобровский, В.П. Шibaев

Химический факультет МГУ, Москва 119991

E-mail: bbrvsky@yahoo.com

В настоящий момент наблюдается колоссальный рост интереса исследователей всего мира к созданию так называемых «умных» стимул-чувствительных материалов. Среди различных типов таких систем особый интерес представляют фотохромные жидкокристаллические (ЖК) полимеры. Это связано с тем, что сочетание способности к спонтанной самоорганизации и образованию ЖК-фаз различной структуры с чувствительностью к внешним воздействиям позволяет реализовать локальное изменение ЖК-структуры и, как следствие, оптических, термических, механических и других свойств таких материалов.

В докладе будут рассмотрены последние результаты работы направленной на разработку новых принципов создания фото- и электро- чувствительных ЖК-полимеров и композитов на их основе. Нами были предложены подходы к созданию под действием облучения или электрического поля фотоуправляемых дифракционных решёток в плёнках на основе ЖК-полимеров, допированных хирально-фотохромными допантами. В ходе работы реализовано фоторегулирование периода и типа дифракционных решёток за счёт УФ-облучения.

Осуществлён цикл работ посвящённый процессам фотодеформации и массопереноса в плёнках фотохромных азобензол-содержащих аморфных и ЖК-полимеров. Обнаружено, что воздействие сильносфокусированного поляризованного света приводит к формированию анизотропных поверхностных структур (рис. 1), причём направление массопереноса совпадает либо с направлением поляризации, либо с ЖК-директором, что определяется химической структурой хромофора.

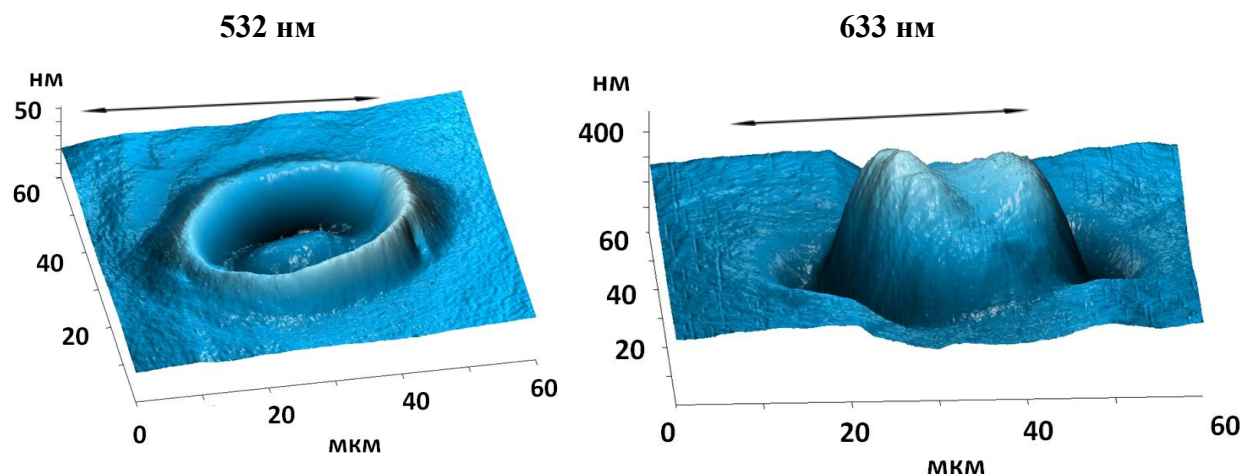


Рис. 1. Поверхностные структуры, образуемые воздействием сфокусированного зелёного (532 нм) и красного лазера (633 нм) на пленку фотохромного полимера.

Полученные и исследованные ЖК-системы являются перспективными для использования в фотонике и оптоэлектронике.

Работа поддержана грантами РФФИ и РНФ.

PL-10

Modeling of Thermo-Mechanical Properties of Polymers and Polymer Nanocomposites: Towards application in Membranes for Water Treatment

Said Ahzi

Qatar Environment & Energy Research Institute, Hamad Bin Khalifa University,
Qatar Foundation, Doha, Qatar

sahzi@hbku.edu.qa

In the first part of this presentation, we will address some of the new developments in the micromechanical modeling of the deformation behavior of polymers, and in the homogenization of the effective mechanical and physical properties of polymer nanocomposites. In this, the effects of the microstructural features such as fillers shape, orientation and distribution are accounted for. Different polymer matrices filled with different nanofillers are considered and our predicted results are compared to existing experimentally measured ones.

In the second part of the presentation, we will address the effect of porosity on the mechanical response of polymers and polymer nanocomposites. The aim of this work is to develop models which can be used to predict the mechanical behavior of polymer-based membranes for water treatment. For this purpose, the developed models predict the elastic properties as well as the stress-strain behavior for porous polymer nanocomposites. We will particularly present our recently developed three-phase model for the prediction of the elastic modulus and the yield behavior. We also used similar approach to predict the effect of porosity on the rubbery behavior. Results from these new approaches will be presented. We also note that the proposed rubbery modeling can be applied to biocompatible polymers used for scaffolds fabrication.

References

- 1- R. Matadi Boumbimba, K. Wang, N. Bahlouli, S. Ahzi, Y. Rémond, F. Addiego, “Experimental investigation and Micromechanical Modelling of high strain rate compressive yield stress of a melt mixing polypropylene/organoclay nanocomposite”; *Mechanics of Materials*, Vol. 52, pp. 58-68, 2012.
- 2- K. Wang, Ahzi, R. Matadi Boumbimba, N. Bahlouli, F. Addiego, Y. Rémond; “Micromechanical modeling of elastic behavior of a polypropylene based organoclay nanocomposites under a wide range of temperatures and strain rates/frequencies”; *Mechanics of Materials*, Vol. 64, pp. 56-68, 2013.
- 3- Wang K., Matadi Boumbimba R.M, Bahlouli N, Ahzi S., Muller R., Bouquey M “Dynamic compressive behavior of a melt mixed Polypropylene/organoclay nanocomposites ” *Journal of Engineering Material and Technology*, January 2012, Vol 134, Issue 1, pp. 010905-1/11
- 4- B. Mortazavi, M Baniassadi, J Bardon, S Ahzi; “Modeling of two-phase random composite materials by finite element, Mori-Tanaka and strong contrast methods”; *Composites Part B: Engineering*; Vol. 45, p1117-1125, 2013.
- 5- Reema Alasfar; “Modeling of the Mechanical Response of Polymers/Polymer Nanocomposites: Effects of Porosity and Fillers Content”; MS Thesis, Hamad Bin Khalifa University; April, 2018

PL-11

Перспективы атомистического моделирования: от механизмов образования углеродных наноструктур до свойств полимерных композитов

Стегайлов В.В.^{abc}, Логунов М.О.^{ab}, Орехов Н.Д.^{ab}, Остроумова Г.М.^{ab}

^a*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия*

^b*Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия*

^c*Высшая школа экономики, Москва, Россия*

E-mail: stegailov@gmail.com

Современные методы суперкомпьютерного атомистического моделирования представляют собой уникальный инструмент исследования макромолекулярных нанообъектов и полимерных нанокомпозитов. В докладе будут представлены результаты моделирования процесса нуклеации углеродных наноструктур и свойств полимерных матриц включающих в себя наночастицы.

Исследование процесса нуклеации углеродных структур проводится методами молекулярной динамики с использованием реакционных межатомных потенциалов. Подобные модели позволяют описывать реакции разрыва и образования связей с точностью, близкой к точности квантово-механических расчетов. В докладе будут представлены результаты по влиянию типа параметризации межатомного взаимодействия на кинетику процесса нуклеации и роста углеродных наноструктур.

Вторая часть доклада посвящена свойствам полимеров, находящихся в контакте с поверхностью наноразмерного наполнителя. При этом на свойства материала влияет множество параметров – форма и размер наночастиц, их распределение в полимерной матрице, тип и сила взаимодействия полимерной матрицы с наночастицами. Особый интерес при этом представляют наночастицы с высоким аспектным отношением, например, углеродные нанотрубки (УНТ). Вопрос о том, в рамках каких именно механизмов на молекулярном уровне УНТ оказывают столь серьезное воздействие на полимерную матрицу при столь малых объемных концентрациях, остается открытым. Описание подобной многопараметрической задачи на микроуровне крайне затруднительно и пока во многом носит эмпирический характер. В то же время предсказательные возможности методов молекулярной динамики позволяют изучать природу химических процессов, происходящих на атомарном уровне, и производить качественную и количественную оценку макропараметров нанокомпозитных материалов.

Обсуждаются возможности использования современных молекулярно-динамических подходов для анализа на молекулярном и мезоскопическом уровнях процессов деформирования и разрушения полимерных нанокомпозитов, расчета их базовых механических параметров и адгезионных свойств интерфейса полимер-нановключение. В качестве основной модели исследования рассматривается композит на основе полиэтиленовой матрицы с углеродными нановключениями.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ-14-50-00124.

PL-12

Multiscale Simulation of Polymer Nanocomposites with Crosslinked Matrix

A.R. Khokhlov

Physics Department, Moscow State University, Moscow, Russia

E-mail: khokhlov@polly.phys.msu.ru

One of the most promising organic-inorganic composite materials represents a polymer network (matrix) with incorporated filler nanoparticles (NPs), such as spherical silica NPs, surface-functionalized nanotubes, graphene, metal nanowires, etc. A common feature of this class of polymer nanocomposites (PNCs) is their structural heterogeneity, which occurs at different length scales, and the presence of a network-like architecture of the matrix with a complex topology of chemically connected and strongly entangled polymer chains. PNCs having both weakly and highly crosslinked matrix offer enormous opportunities to design novel material systems. In order to elucidate the structure–property relationships of these hybrid materials and provide the direct quantitative comparison between experiment and theory, molecular level modeling and simulation are required. Such simulations should normally use a computational strategy based on multiscale simulations. This strategy typically encompasses the following main stages: (i) coarse-graining of atomistic structures; (ii) crosslinking the coarse-grained monomers or precursor polymers in the presence of embedded filler particles and the subsequent equilibration; (iii) reverse mapping of the coarse-grained model to an atomistic representation and its further equilibration and refinement; (iv) large-scale fully atomistic molecular dynamics simulations for predicting the materials properties. We will provide details in developing this multiscale simulation framework and illustrate its challenges and opportunities by demonstrating its applicability to the large-scale molecular simulation of bulk nanocomposite systems and randomly crosslinked networks.

Наноструктурированные мультифункциональные частицы: получение, свойства, биомедицинские применения

Горин Д.А.^a

^a Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия
E-mail: d.gorin@skoltech.ru

В настоящее время быстро развивается новое направление медицины- тераностика, одно из направлений которой связано с использованием наноструктурированных мультифункциональных носителей для комплексного решения терапевтических и диагностических задач. Примерами таких носителей являются наноструктурированные частицы (например, пористые наночастицы из ватерита или диоксида кремния), липосомы, полимерные мицеллы, а также частицы «ядро-оболочка», полимерные и нанокомпозитные капсулы, полученные методом послойной сборки (Layer by Layer assembly (LbL))[1]. Каждый тип наноструктурированных носителей имеет свои преимущества и недостатки. Несомненными преимуществами LbL носителей являются высокая грузочная способность, широкие возможности контроля физических и химических свойств наноструктурированных носителей путем изменения структуры оболочки, ее толщины и химического состава [2,3]. Применение наноструктурированных носителей ограничено отсутствием методов их визуализации *in vivo* с достаточным пространственным разрешением и значительной глубиной проникновения ткани. Показано, что такие методы, как фотоакустическая томография [4], MRT [5] флуоресцентная микроскопия [6] и томография [7], OCT [8] позволяют эффективно визуализировать и обнаруживать наноструктурированные носители, а также изучать их биораспределение. Визуализация двух типов наноструктурированных носителей (ядро-оболочка, микрокапсула), полученных методом LbL сборки, была продемонстрирована в разбавленной и неразбавленной крови [4]. Было установлено, что полые микрокапсулы дают больший фотоакустический сигнал по сравнению с микрочастицами типа «ядро-оболочка» с тем же составом полимерной оболочки [4]. Оболочки капсул можно разрушать дистанционно с помощью УЗ воздействия [9].

Уникальная комбинация методов визуализации и наноструктурированных носителей дает клиницистам и исследователям значительные преимущества в разработке нового метода терапии, основанного на доставке наноструктурированных носителей, нагруженных биоактивными веществами, в очаг поражения, а также их визуализации и дистанционно контролируемого высвобождения инкапсулированных биоактивных веществ *in vivo*.

Литература

- [1] Sukhorukov G. B. et al, *Colloids and Surfaces A*, **1998**, 137, 253
 - [2] Delcea M. et al, *Adv. drug delivery reviews*, **2011**, 63(9), 730
 - [3] Timin, A.S. et al, *Adv. Mater. Interfaces*, **2016**, 4, 1600338 (22)
 - [4] Yashchenok A.M. et al, *J. Biophotonics*, **2016**, 9 (8), 792
 - [5] German S.V., et al, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2016**, 18, 32238
 - [6] Voronin D.V. et al, *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2017**, 9, 6885
 - [7] Gusliakova, O. et al, *Frontiers in Pharmacology*, **2018**, 9, 559
 - [8] Genina E.A., et al, *Biomed. Opt. Express*, **2016**, 7(6), 2082
 - [9] Korolovych V.F., et al, *Phys. Chem. Chem. Phys*, **2016**, 18, 2389
- Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-29-08046

PL-14

О реологии нефти

А.Я. Малкин

Институт нефтехимического синтеза РАН

Доклад представляет собой критический обзор современного состояния исследований в области реологии нефти.

На основе существующей базовой классификации нефти на легкую и тяжелую нефть обсуждены основные технологические проблемы, возникающие при транспортировке сырой нефти, которые определяются особенностями их реологических свойств, и способы решения этих проблем.

При анализе реологии легкой нефти основное внимание уделено проблеме образования парафинистой структуры, которое приводит к формированию геля и невозможности течения. Рассмотрены кинетические закономерности этого процесса и роль скорости деформирования. Обсуждены современные представления о реологической модели парафинистой нефти и ее использовании для технологических расчетов. Другой проблемой, связанной с транспортом легкой нефти, является течение в трубопроводах при высоких скоростях. Рассмотрены современные подходы и методы снижения гидравлического сопротивления в области турбулентного течения.

Актуальной проблемой современной технологии нефтяной промышленности является снижение вязкости тяжелой нефти. Значение этой проблемы постоянно возрастает в связи с увеличивающейся долей тяжелой нефти в общем балансе производства. Рассмотрены современные подходы к решению этой проблемы, в частности, возможность эмульгирования, удаление тяжелых компонентов, смешение с маловязкими углеводородами и др.

Применение аддитивных технологий для печати изделий термостойкими полимерами и нанокompозитами на их основе

Юдин В.Е.^{а, б}, Ваганов Г.В.^а, Поляков И.В.^б

^а *Институт высокомолекулярных соединений (ИВС) РАН, Санкт-Петербург, Россия*

^б *Политехнический университет (СПбПУ) Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: yudin@hq.macro.ru

В последние годы всё чаще в различных областях, от аэрокосмической до медицинской, на смену традиционным методам (литьё, экструзия или прессование) получения полимерных изделий приходят так называемые аддитивные технологии. Аддитивные технологии или 3D-печать — это получение изделия методом послойного нанесения полимерного (и не только!) материала на специальном оборудовании (3D-принтер) по заранее заданной компьютерной модели этого самого изделия. Аддитивные технологии позволяют быстро создавать уникальные объекты, которые иногда практически невозможно получить традиционными методами, если они, например, обладают сложными геометрическими формами или имеют разнообразную внутреннюю структуру.

На сегодняшний день доступен широкий выбор методов аддитивного производства полимерных материалов, основные различия которых заключаются в методе нанесения слоев, а также в используемых расходных материалах. Достаточно распространенными методами аддитивного производства полимерных материалов, о которых пойдёт речь в лекции, являются: 1) селективное лазерное спекание (SLS) - технология основана на последовательном спекании слоев порошкового материала с помощью лазеров высокой мощности; 2) метод послойного наплавления (FDM) или послойная печать изделия расплавленной полимерной нитью. В большинстве случаев для 3D-печати используют стандартные термопластичные полимерные материалы, такие как АБС-пластик, полилактид, поликарбонат и различные полиамиды. Однако изделия, полученные таким образом, в основном используются для прототипирования, поскольку они имеют более низкие механические характеристики, чем изделия, изготовленные методами экструзии или литья под давлением. Поэтому перспективным направлением в 3D-печати является использование высокоэффективных термостойких полимеров, например класса ароматических полиимидов.

В ИВС РАН ведутся работы по синтезу полиимидных материалов для получения термостойких трехмерных изделий по методам SLS и FDM. С использованием полиимидного порошка Р-ОДФО [В.Е.Юдин, В.М.Светличный, ВМС, сер.С, 2016, т.58, №1, с.19] впервые методом СЛС были получены образцы в виде плёнок. Исследованы свойства полученных плёнок в зависимости от способа синтеза, молекулярной массы и мощности лазера. По методу FDM на экспериментальной установке, созданной в ООО «ЛПМ-Механика» (Ленполиграфмаш), также получены опытные образцы полиимидных материалов и показано, что их механические свойства (прочность и модуль упругости) можно существенно улучшить в результате их наполнения углеродными нанотрубками и волокнами.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-03-00733а

Предсказательное Моделирование Процессов Аддитивного Производства на Основе Высокопроизводительных Вычислений

Потапкин Б.В.^{a,b}, Закиров А.В.^a, Корнеев Б.А.^a, Богданова М.В.^a, Белоусов С.А.^a,
Перепелкина А. Ю.^{c,a}, Левченко В.Д.^{c,a}, Степанов А.Е.^a

^a ООО «Кинтех Лаб», Москва, Россия

^b НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

^c ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, Москва, Россия

E-mail: potapkin@kintechlab.com

Аддитивные процессы являются одним из ключевых компонентов, составляющих новые промышленные технологии, которые будут определять лицо современного промышленного производства. При этом действительно широкое промышленное внедрение аддитивных технологий во многом зависит от возможности быстрой и эффективной оптимизации параметров процесса для выбранного материала (металла, полимера или композита) и формы детали с целью получения изделий с заданными свойствами. Предсказательное компьютерное моделирование, основанное на понимании детального физико-химического механизма, является одним из наиболее эффективных способов решения этой задачи без необходимости выполнения большого объема экспериментов в случае использования подхода на основе метода проб и ошибок [1].

В работе представлены результаты развития сверхвысокопроизводительной модели сплавления металлического или полимерного порошка под воздействием лазера или электронного пучка в диапазоне размеров от долей микрона до нескольких миллиметров, т.е. на микроскопическом и мезоскопическом уровнях. При этом, модель явным образом учитывает случайный характер распределения частиц порошка в засыпке и связанную с этим нестационарность движения расплава, а также напрямую описывает процессы энерговыделения в результате многократного отражения лазерного луча или рассеяния электронов пучка. Модель основана на использовании метода решеточных уравнений Больцмана и реализована на языке CUDA C++ для GPU и обладает производительностью более 100 млн. ячеек в секунду (1 мм дорожки расплава в час на одной видеокарте). При описании процесса сплавления модель учитывает следующие физические эффекты: фазовые переходы и связанное с ними выделение скрытой теплоты плавления, испарение и вызванное им давление отдачи, поверхностное натяжение, конвекцию Марангони, эффекты смачивания и движения частиц под действием сил поверхностного натяжения. В работе демонстрируется способность разработанной модели предсказывать измеряемые свойства одной дорожки (глубину, ширину и форму), слоя и получаемого материала (пористость и шероховатость поверхности), а также исследовать механизмы образования пор, разбрызгивания и зон денудации. Установлено хорошее совпадение получаемых результатов моделирование лазерного сплавления металлических порошков с соответствующими экспериментальными данными. Обсуждаются перспективы использования разработанной модели для ускорения и повышения качества трехмерной печати.

Литература

[1] Khairallah S. A., Anderson A. T., Rubenchik A., King W. E., *Acta Materialia*, **2016**, 108, 36.

Quantitative Measurement of Dislocation Parameters in Semicrystalline Polymers for the Optimization of Mechanical Properties

Michael J. Zehetbauer

Physics of Nanostructured Materials, Faculty of Physics, Vienna University, Wien, Austria

E-mail: michael.zehetbauer@univie.ac.at

For a long time dislocation defects have not been considered in polymer science not at least because of lack in experimental techniques in order to study the presence and arrangement after and especially during plastic deformation. Besides very recent mechanical methods like nanoindentation [1] and high resolution rheometry [2] which directly reflect the influence of dislocation movement to the macroscopic flow stress, there is a new tool multireflection X-ray diffraction technique called X-Ray Line Profile Analysis [3] which entirely changed that situation. This technique not only allows to accurately determine the lamella size [4], but provides a substantial check of dislocation presence in general, and a quantitative check of the density and arrangement of dislocations in particular. Meanwhile a considerable number of semicrystalline polymers such as alpha- and gamma-polypropylene, polyethylene, polyethylene-ethylenemethacrylic-acid co-polymers and also biodegradable polymers like poly(3-hydroxybutyrate) were investigated which show that the presence and movement of dislocations have a marked impact on the macroscopic strength [1-5]. Quantitative analyses [6] including such of thermal stability [7] indicated that the macroscopic strength is affected by up to a factor 2 through dislocation generation and mobility, and indicated how these quantities could be controlled in practice.

References

- [1] M.Zareghomsheh, F. Spieckermann, G. Polt, H. Wilhelm, M. Zehetbauer; *Polym.Intern.* **2015**, *64*, 1537-1543; M.Zareghomsheh, *PhD Thesis* **2018**, Univ.Vienna, Austria
- [2] H. Wilhelm, *PhD Thesis* **2017**, Univ.Vienna, Austria, to be published
- [3] M.B. Kerber, M.J. Zehetbauer, E. Schafner, F. C. Spieckermann, S. Bernstorff, T. Ungar, *JOM*, **2011**, *63*, 61-69
- [4] F. Spieckermann, H. Wilhelm, M. Kerber, E. Schafner, G. Polt, S. Bernstorff, F. Addiego, M. Zehetbauer, *Polymer*, **2010**, *51*, 4195-4199
- [5] G. Polt, F. Spieckermann, H. Wilhelm, M. B. Kerber, E. Schafner, S. Bernstorff, M. Zehetbauer *Mech.Mater.*, **2013**, *67*, 126-132
- [6] F. Spieckermann, H. Wilhelm. G. Polt, S. Ahzi. M. J. Zehetbauer, Rate Mechanism and Dislocation Generation in High Density Polyethylene and other semicrystalline polymers, *Polymer*. **2014**, *55*, 1217-1222
- [7] F. Spieckermann, G. Polt, H. Wilhelm, M. Kerber, E. Schafner, V. Soprunyuk, M. Reinecker, S. Bernstorff, M. Zehetbauer, *Macromolecules*. **2017**, *50*, 6362-6368

Компьютерное моделирование полимерных систем

Чертович А.В.^a^a МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия

E-mail: chertov@polly.phys.msu.ru

В докладе будет представлено общее видение развития современных методов компьютерного моделирования и доступных им пространственно-временных масштабов. Применение этих методов будет проиллюстрировано в первой части доклада на примере микрофазного расслоения блоксополимеров [1], исследования термомеханических свойств сшитых матриц на атомистическом уровне [2], изучения композитов на основе сшитых полимерных матриц и жесткого наполнителя [3]. Во второй части доклада будет рассмотрено имитационное моделирование процесса сополимеризации и самоорганизации в процессе полимеризации (PISA – Polymerization Induced Phase Separation) на примере гетерогенной сополимеризации в расплаве [4], мицеллярной полимеризации [5] и формирования структурированных микрогелей [6].

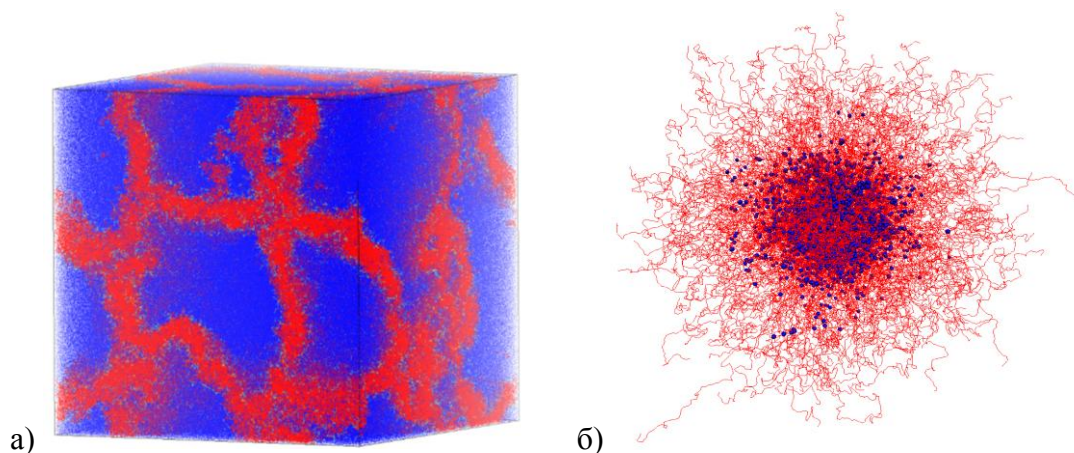


Рис. 1. Формирование сетки из цилиндрических мицелл (а) и микрогеля со структурой ядро-оболочка (б) при моделировании самоорганизации в процессе полимеризации.

Литература

- [1] A. A. Gavrilov, Y. V. Kudryavtsev, and A. V. Chertovich, *Journal of Chemical Physics*, 139 (22), 224901, 2013.
 [2] D. V. Guseva, V. Y. Rudyak, P. V. Komarov, B. A. Bulgakov, A. V. Babkin, and A. V. Chertovich, *Polymers*, 10, 792, 2018.
 [3] A. A. Gavrilov, A. V. Chertovich, P. G. Khalatur, and A. R. Khokhlov, *Macromolecules*, 47(15), 5400, 2014.
 [4] A. A. Gavrilov and A. V. Chertovich, *Macromolecules*, 50 (12), 4677, 2017.
 [5] R. Shupanov, A. Chertovich, P. Kos. *J. Comput. Chem.*, 39, 1275, 2018.
 [6] V. Y. Rudyak, A. A. Gavrilov, E. Y. Kozhunova, and A. V. Chertovich, *Soft Matter*, 14, 2777, 2018.

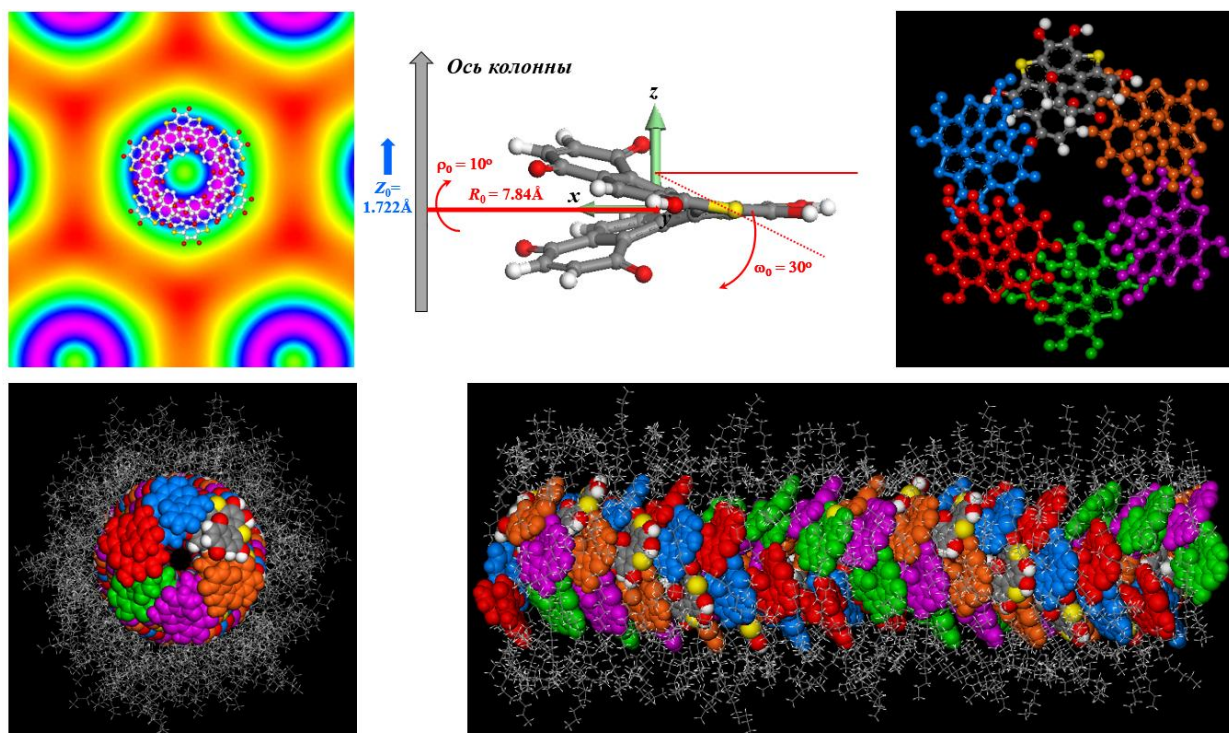
Работа выполнена при поддержке РФФИ и РНФ.

Программный комплекс Materials Studio – молекулярное моделирование при решении структурных задач для частично упорядоченных систем

Щербина М.А., Бакиров А.В., Чвалун С.Н.

*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,
Москва, Российская Федерация*

Частично упорядоченные системы представляют собой особый интерес с точки зрения структурных исследований, поскольку потеря порядка в одном или нескольких направлениях в веществе может приводить к появлению “неклассических” фаз и структурных отношений. Более того, метод рентгеноструктурного анализа часто приводит к неоднозначным результатам, поскольку частично упорядоченные системы обычно характеризуются сравнительно бедными картинами рентгеновского рассеяния. Поэтому применение молекулярного моделирования становится необходимым для получения дополнительной необходимой информации о возможном упорядочении молекул вещества. В докладе на ряде примеров – колончатых структур на основе гетерогелицена, а также звездообразных соединений на основе олиготиофенов различной химической структуры показаны возможности программного комплекса Materials Studio. Особое внимание уделено артефактам метода молекулярного моделирования.



Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 18-03-00967а).

ORAL PRESENTATIONS

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

О-1

Полимерные звезды: синтез, структура, свойства, применение

Кузнецов А.А.^{a,b}

^aИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,
Москва, Россия

^bРТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

E-mail: kuznets24@yandex.ru

Краткий обзор современного состояния исследований в области звездообразных полимеров. Полимерные звезды, благодаря интенсивному развитию новых методов синтеза, прежде всего, контролируемой радикальной полимеризации, сформировались как большой самостоятельный класс макромолекулярных нанообъектов, а исследования в этой области стали одним из наиболее быстро развивающихся направлений полимерной химии. В обзор включены вопросы структурной классификации звезд, рассмотрены новые методы синтеза, закономерности формирования звезд с узким молекулярным распределением, физико-химические свойства (реология, способность к самоорганизации), и т.д. [1]. Специальный раздел доклада посвящен синтезу полимерных звезд с лучами из поликонденсационных полимеров и, в частности, одностадийному синтезу трех- и тетралучевых олигоимидов с концевыми реакционными группами с использованием каталитически активной среды по схеме A_n+AB , где A_n -многофункциональный амин, $n=3,4$, AB -аминодикарбоновая кислота [2]. Обсуждаются наиболее интересные аспекты исследования полимерных звезд и перспективы их использования, в том числе, в виде молекулярных контейнеров, средств доставки лекарств, препаратов для магниторезонансной терапии, эффективных агентов межфазной стабилизации, сшивающих агентов, и т.д.

Литература

[1] Ren J.M, McKenzie G.H., Quang Fu, Wong E.H.H., Jingtao Xu, Zesheng An, Shanmugam S., Davis T.P., Boyer C., Qiao G.G.// *Chem.Rev.*, 2016, DOI: 10.1021/acschemrev.6b00008.

[2] Kuznetsov A.A., Soldatova A.E., Tokmashev R. Yu., Tsegelskaya A.Yu., Semenova G.K, Shakhnes A.Kh. Abramov I.G.// *J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem.*, 2018 DOI: 10.1002/pola.29088.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта 16-03-01119.

O-2

Enzymatically-Cleavable Branched Polymers Grafted on Upconverting Nanoparticles for Theranostics

Alireza Kavand^a, Christophe A. Serra^a, Nicolas Anton^b, Thierry Vandamme^b, Delphine Chan-Seng^a

^a *Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, 67000 Strasbourg, France*

^b *Université de Strasbourg, CNRS, Laboratory of Design and Application of Bioactive Molecules, 67000 Strasbourg, France*

E-mail: delphine.chan-seng@ics-cnrs.unistra.fr

Theranostics is a promising field in nanomedicine, which attempts to combine therapy and diagnosis in a single vector. The resulting system should act as a cargo for the transport and delivery of therapeutic agents, but also provide imaging capabilities for diagnosis and monitoring of the drug delivery system. Various approaches have been explored to develop theranostic vectors including systems based on dyes (e.g. BOPIDY [1] and porphyrin [2]) and nanoparticles [3] (e.g. quantum dots, iron oxide, gold and silica nanoparticles). Recently, upconverting nanoparticles (UCNPs) have emerged as good candidates for bioimaging and theranostics [4] as these inorganic nanoparticles are able to convert near-infrared excitation light into visible and ultraviolet emission light. This lecture will discuss an approach to modify UCNPs to grow branched polymers possessing enzymatically-cleavable branching points from the surface of UCNPs and their investigation as potential theranostic agents.

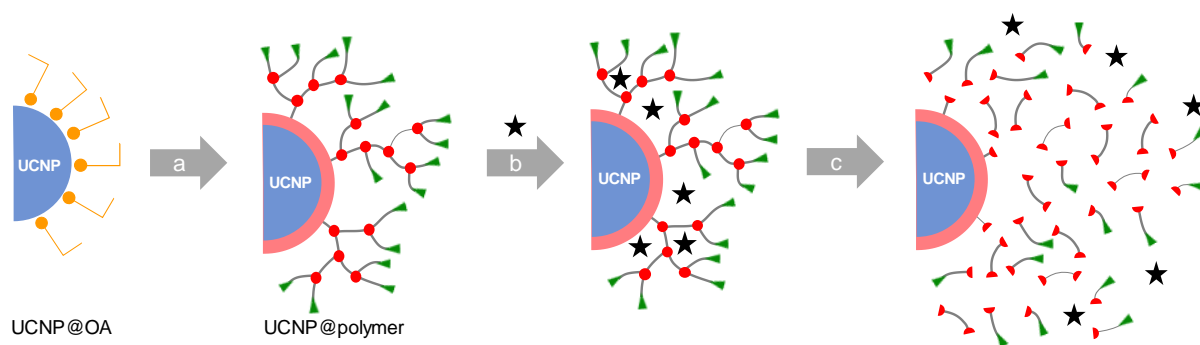


Fig. 1. Enzymatically-cleavable branched polymers grafted on UCNPs: a) synthesis, b) drug encapsulation and c) drug release upon exposure to enzyme.

References

- [1] Kamkaew, A.; Lim, S.H.; Lee, H.B., Kiew, L.V., Chung, L.Y., Burgess, K. *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42*, 77.
- [2] Ethirajan, M.; Chen, Y.; Joshi, O.; Pandey, R.K. *Chem. Soc. Rev.* **2011**, *40*, 340.
- [3] Xie, J.; Lee, S.; Chen, X. *Adv. Drug Deliv. Rev.* **2010**, *62*, 1064.
- [4] Chen, G.; Qiu, H.; Prasad, P.N.; Chen, X. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 5161.

This work was supported by the University of Strasbourg and the French National Center for Scientific Research (CNRS).

O-3

A Facile Method to Control the Growth of Upconversion Nanocrystals: A Focus on Heat Treatment

Alireza Kavand^{1,2}, Christophe A. Serra^{1*}, Delphine Chan-Seng^{1*}, Nicolas Anton², Thierry Vandamme², Frédéric Przybilla³

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, CAMB UMR 7199, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

³ *Université de Strasbourg, CNRS, LBP, UMR 7213, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

E-mail: mnpn@profcas.33mail.com / delphine.chan-seng@ics-cnrs.unistra.fr

The lanthanide ion-doped NaYF₄ upconversion nanoparticles (UCNPs) have shown great potential as optical imaging probes for biomedical applications. These UCNPs emit UV, visible or near-infrared (NIR) light under excitation with a 980 nm NIR light. This wavelength lies in an optically transparent window for tissues and is advantageous for *in vivo* imaging due to its penetration depth in tissue.

This study will show a simple and efficient method to produce UCNPs to be used as luminescent labels for biomedical applications. We have synthesized UCNPs using the co-precipitation method followed by a heat treatment at high temperature (ca. 300°C) performed with different reactors such as common glass flask and microtubes of various inner diameters and lengths.

In this study we have been trying to find a way to control the size and shape of UCNPs from ultrasmall sizes about 10 nm to 100 nm as well as to control their phase (cubic or hexagonal) just by changing the reactor and the heat treatment time.

As a result, we believe that this simple approach can be further be extended to the preparation of other nanocrystals.

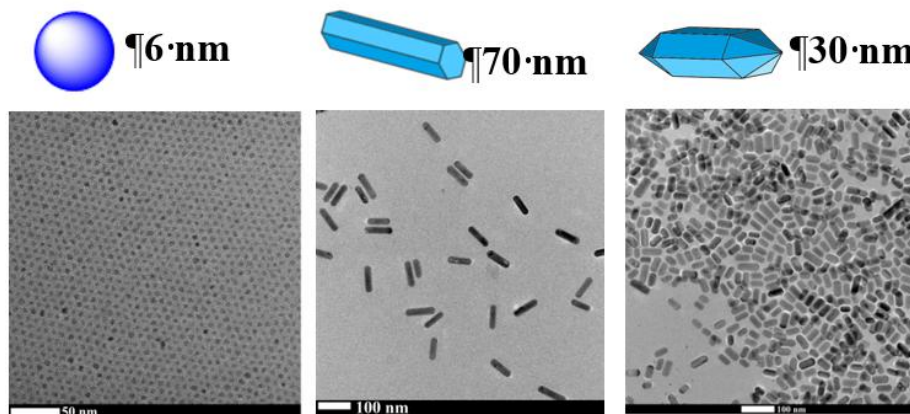


Fig. 1. TEM images of NaYF₄:Yb³⁺,Er³⁺ nanocrystals that have been prepared with different microtubes and heat treatment times but same formulation.

O-4

Layer By Layer Surface Treatment for the Formation of Double Emulsions in PDMS Microchips

Denis Funfschilling^{1*}, Benjamin Peter¹, Norbert Dumas¹, Christophe A. Serra²

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICube UMR 7357, 2 rue Boussingault, F-67000 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

E-mail: dfunfschilling@unistra.fr

By a layer-by-layer procedure of PAH (Poly(allylamine hydrochloride)) and PAA (Poly(acrylic acid)) polyelectrolytes, the PDMS surface of a microfluidic droplet generator is locally modified. This treatment is reliable and can last for months. This surface treatment is applied to a two steps flow-focusing chip, where the naturally hydrophobic PDMS is locally transformed in a hydrophilic surface. Thanks to this treatment, double emulsions of controlled size and thickness are formed in the chip. This work presents an interesting alternative to the commonly used imbricated glass capillary microdevices that have been used for the formation of double emulsions and has the advantage of the versatility and ease of use of the PDMS.

О-5

Применение метода рассеяния света для исследования процессов формирования макропористых наноструктурированных полимерных материалов

Благодатских И.В., Вышиванная О.В.

Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, Москва, Россия

E-mail: blago@ineos.ac.ru

В докладе рассматриваются возможности методов статического и динамического рассеяния света для выявления механизма формирования гидрогелей, являющихся прекурсорами макропористых полимерных систем, на примере двух наноструктурированных полимерных объектов: макропористого поливинилового спирта (ПВС) и диано-формальдегидного аэрогеля.

Аэрогели являются весьма востребованными материалами в современных технологиях в качестве фильтров для очистки воды и газовых смесей, носителей для катализаторов, элементов суперконденсаторов, акустических устройств и черенковских детекторов для анализа быстрых адронов. Исследования по управляемому лазерному термоядерному синтезу инициировали работы по получению аэрогелей сверхнизкой плотности - менее 10 мг/см^3 . Низкая плотность таких материалов обусловлена высоким поровым объемом. Недавно были получены [1, 2] новые органические диано-формальдегидные аэрогели с плотностью до 11 мг/см^3 . Формирование макропористых полимерных структур проходит через стадии растворов и гелей, поэтому для управления структурой конечного объекта важно исследовать механизмы процессов, приводящих к образованию геля. Изучение системы на стадии, предшествующей гелеобразованию, позволило впервые для органических аэрогелей экспериментально установить, что гелеобразование происходит в результате диффузионно-лимитированной кластер-кластерной агрегации частиц золя.

Новый метод синтеза жесткой макропористой ПВС-матрицы для создания аффинных сорбентов разработан нами на основе промышленного ПВС без применения органических порогенов [3]. Использование методов рассеяния света на стадии гелеобразования позволило сделать вывод о фазовом разделении с образованием микросфер и их фрактальной агрегации на первой стадии сшивки как о решающем факторе формирования макропористой структуры.

Литература

- [1] Sheveleva E.E., Pimenov V.G., Pikulin I.V., Sakharov A.M. *Polymer Sci Ser B*, **2016**, 58 (2), 173.
- [2] Sheveleva E.E., Pimenov V.G., Blagodatskikh I.V., Vyshivannaya O.V., Abramchuk S.S., Sakharov A.M. *Colloid and Polymer Science*, **2018** (8), 1313.
- [3] Tikhonov V.E., Blagodatskikh I.V., Postnikov V.A., Klemenkova Z.S., Vyshivannaya O.V., Khokhlov A.R. *Eur Polym J*, **2016**, 75,1.

О-6

Синтез и nanoорганизация поли(1-триметилсилил-1-пропина) с высоким содержанием цис-звеньев

Матсон С.М.^a, Коссов А.А.^a, Левин И.С.^a, Хотимский В.С.^a

^a *Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН, Москва, Россия*

E-mail: matson@ips.ac.ru

Поли(1-триметилсилил-1-пропин) [ПТМСП] и его аналоги представляют собой класс стеклообразных 1,2-дизамещенных полиацетиленов, обладающих рекордно высокими параметрами газо- и паропроницаемости. Уникальные характеристики этих полимеров обусловлены нанопористой архитектурой, где поры большего размера взаимосвязаны с селективными микропорами (< 2 нм). Формирование такой структуры является следствием высокой жесткости макромолекул 1,2-дизамещенных полиацетиленов, содержащих чередующиеся двойные связи С=С, и присутствием объемных заместителей, что приводит к рыхлой упаковке цепей и высокому свободному объему ПТМСП и его аналогов. Ранее на примере синтеза ПТМСП с использованием каталитических систем на основе пентахлоридов Nb и Ta нами была показана возможность регулирования условиями полимеризации цис-/транс-состава полимера и его влияние на упаковку, свободный объем, пористую структуру полимера и его свойства, такие как проницаемость и устойчивость к органическим растворителям, что важно для мембранных материалов для разделения промышленных смесей, содержащих органические компоненты [1]. В настоящей работе использование каталитических систем на основе пентабромидов Nb позволило повысить стереоспецифичность полимеризации и получить ПТМСП от смешанного состава звеньев цис-/транс-изомерии до цис-регулярного. С ростом содержания звеньев цис-конфигурации избирательность растворимости полимера в органических растворителях возрастает, достигая полной нерастворимости для полимеров цис-регулярного состава. Исследование полимеров разного конфигурационного состава методом РСА показало, что полимеры являются аморфными. Однако выявленные различия рентгенограмм полимеров с разной микроструктурой указывают на различия в упорядоченности надмолекулярной организации полимеров и рост упорядоченности соотносится с устойчивостью полимеров к органическим растворителям. Анализ пористой структуры полимеров методом низкотемпературной адсорбции/десорбции газов показал, что полученные полимеры демонстрируют высокие значения удельной поверхности по БЭТ (> 800 м²/г). В то же время большие значения удельной поверхности по БЭТ и доли микропор коррелируют с более высокими коэффициентами газопроницаемости. Результаты работы показывают, что тонкое регулирование упаковки цепей за счет цис/транс-состава позволяет достичь сочетания устойчивости полимера и высоких потоков.

Литература

[1] Matson S.M.; Litvinova E.G.; Sultanov E.Y.; Ezhov A.A.; Khotimskiy V.S. *Procedia Engineering*. 2012, 44, 948.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 18-13-00334).

Циклические кремнийорганические трипероксиды как перспективные инициаторы перекисной вулканизации жидких полисилоксанов

Дерябин К.В.^a, Исламова Р.М.^a, Терентьев А.О.^b

^a Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

^b Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского, Москва, Россия

E-mail: deriabin.k@pochta.com

В данной работе была реализована перспективная идея использования новых инициаторов перекисной вулканизации, которые близки по своей природе к полисилоксанам, с целью улучшения механических свойств сшитых материалов. В работе использовались циклические кремнийорганические пероксиды в качестве радикальных инициаторов термической вулканизации [1]. Применение этих пероксидов становится возможным благодаря разработке крупномасштабных методов их синтеза из дешевых и доступных исходных реагентов [2]. Важно отметить, что подобные циклические трипероксиды, не содержащие атома кремния в своей структуре, служат инициаторами свободно-радикальной полимеризации и вулканизации в промышленности. Таким образом, результаты этого исследования могут быть полезны для промышленного производства кремнийсодержащих полимеров.

В данной работе было показано, что полученные циклические кремнийорганические трипероксиды (схема) являются винилселективными агентами отверждения винилсодержащих полисилоксанов в интервале температур (100–180) °С. Установлено, что перекись с фрагментом Me-Si-Me является наиболее активным инициатором вулканизации, чем пероксиды с более объемными заместителями у атома Si. Добавление полиметилгидросилоксана в отверждаемые смеси заметно ускоряет отверждение жидких полисилоксанов (в 2–4 раза) и позволяет получать вулканизаты с высокими для перекисных систем показателями растяжения (относительное удлинение более 200%) и улучшенными компрессионными характеристиками (остаточное сжатие менее 1.0%). Вулканизаты продемонстрировали антибактериальную активность против *Escherichia coli* ($R > 1$, то есть $2.45 > R > 1.00$).

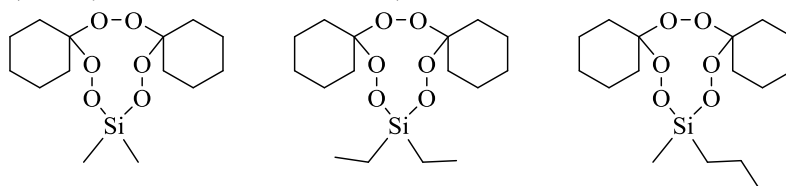


Схема. Циклические кремнийорганические трипероксиды

Литература

[1] Deriabin, K. V.; Yaremenko, I. A.; Chislov, M. V.; Fleury, F.; Terent'ev, A. O.; Islamova, R. M. *New J. Chem.* **2018**, 42 (18), 15006–15013.

[2] Terent'ev A.O., Platonov M.M., Tursina A.I., Chernyshev V.V., Nikishin G. I., *J. Org. Chem.* **2008**, 73, 3169–3174.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 18-33-00769). Исследования полимерных материалов проводились в ресурсных центрах СПбГУ: Магнитно-резонансные методы исследования, Методы анализа состава вещества, Термогравиметрические и калориметрические методы исследования и Культивирование микроорганизмов.

O-8

Influence of particle rearrangement on the effect of magnetostriction in magneto-sensitive elastomers

Dirk Romeis^a, Vladimir Toshevnikov^a, Marina Grenzer^a

^a Leibniz Institute for Polymer Research, *Dresden, Germany*

E-mail: romeis@ipfdd.de

Magneto-sensitive elastomers are field-controllable composite materials with magnetically switchable properties. They consist of a soft-elastic polymer network with immersed magnetizable micro-particles. Under external magnetic field these composites can significantly change their mechanical properties. The magnitude of magneto-induced deformation and even its sign are very sensitive to the local spatial distribution of magnetic particles. Thus, local rearrangement of particles under magnetic field can provide a strong effect to the magneto-induced deformation. Using the dipole approximation for magnetic interactions we will investigate the role of two different effects: (1) under deformation of a sample the particles change their positions only due to elastic coupling with the deformed matrix; (2) under fixed shape of the sample the particles can rearrange locally to reduce the magnetic energy in the sample.

This work was supported by DFG.

Металлополимерные гибридные нанокompозиты

Джардималиева Г.И.^a, Иржак В.И.^a, Богданова Л.М.^a, Голубева Н.Д.^a, Кыдралиева К.А.^b,
Уфлянд И.Е.^c

^a *Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Российская Федерация*

^b *Московский авиационный институт (научно-исследовательский университет), Москва, Российская Федерация*

^c *Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Российская Федерация*

E-mail: dzhardim@icp.ac.ru

В последние годы гибридные органо-неорганические материалы являются объектом интенсивных исследований с точки зрения фундаментальных аспектов структуры и функциональных свойств. Интерес к таким материалам вызван уникальной комбинацией свойств неорганических (наночастицы металлов, оксидов, карбидов и халькогенидов) и органических компонентов. Такие свойства позволяют использовать их в качестве магнитных материалов для записи и хранения информации, гетерогенного катализа, сенсорных устройств, а также в области медицины и биологии [1-3].

Нами разработаны различные подходы к получению металлополимерных нанокompозитов: методом, основанном на том, что наночастицы металлов и стабилизирующая их полимерная матрица формируются в одну стадию - в сопряженном процессе термической (со)полимеризации металлосодержащих мономеров и последующего контролируемого термолиза образующихся продуктов; восстановлением ионов металлов *in situ* компонентами отверждения эпоксидной матрицы или термическим разложением металлосодержащего прекурсора в расплаве термопластичного полимера; а также золь-гель синтезом. Целенаправленно изменяя условия синтеза (температура, соотношение исходных реагентов, природа стабилизирующей матрицы), можно получать наночастицы необходимой формы и строения (например, структура ядро-оболочка), с различными размерами и гомогенным распределением в матрице и, таким образом, регулировать их функциональные свойства (магнитные, каталитические, сенсорные, сорбционные). Полученные металлополимерные нанокompозиты обнаруживают улучшенные механические свойства и трещиностойкость, термическую стабильность, селективные каталитические свойства в реакциях гидрирования ацетиленовых соединений. Нанокompозиты на основе магнитоактивных наночастиц проявляют ферро- и суперпарамагнитные свойства. Анализируются возможности их использования в качестве эффективных магнитоуправляемых сорбентов по отношению к ионам тяжелых металлов и радионуклидам.

Литература

- [1] Помогайло А.Д., Джардималиева Г.И. Металлополимерные гибридные нанокompозиты. М.: Наука, **2015**. 494 с.
[2] Gulzhian I. Dzhardimalieva, Igor E. Uflyand. Chemistry of Polymeric Metal Chelates. Springer, **2018**. 1020 p.
[3] Gulzhian I. Dzhardimalieva and Igor E. Uflyand. *Dalton Trans.*, **2017**, 46, 10139.

Работа выполнена по темам государственного задания, N гос. регистрации 01201055317 и 01201055328.

О-10

Фотохимическое восстановление наноллистов оксида графена монохроматическим вакуумным ультрафиолетовым излучением 123,6 нм

Василец В.Н.^а, Шульга Ю.М.^б

^а Филиал института энергетических проблем химической физики РАН
им. В.Л. Тальрозе, г. Черноголовка, Россия

^б Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва, Россия

E mail: vnvasilets@yandex.ru

Наиболее оптимальным способом формирования плёнок графена для прикладных целей является нанесение и последующее восстановление их из плёнок оксида графена (ОГ), обладающих достаточно высокой адгезией и хорошими плёнкообразующими свойствами. В связи с этим, для восстановления плёнок оксида графена были разработаны химические способы с использованием гидразина, водорода и других химических восстановителей, электрохимические и термические методы (нагрев в вакууме или в атмосфере инертных газов). В большинстве случаев при таких способах восстановления происходят нежелательные изменения химического состава графена или частичная деструкция его структуры

В данной статье исследован процесс недеструктивного фотовосстановления и изменения свойств ОГ под действием монохроматического ВУФ излучения с энергией кванта 10.0 эВ (длина волны 123.6 нм, спектральная ширина линии 0.052 нм). Установлено, что облучение уменьшает содержание воды и гидроксильных групп (ОН) и увеличивает концентрацию двойных связей в пленке, что приводит к восстановлению структуры графена. Проведено сопоставление полученных результатов с ранее опубликованными данными по фотовосстановлению с использованием широкополосного излучения с меньшей энергией кванта 7.2 эВ и синхротронного излучения с большей энергией кванта 17 -900 эВ. Установлена корреляция ассиметрии пика РФС с максимумом при 284.7 эВ, отвечающего С-С связям, с проводимостью образца. Измерены изменения проводимости и поверхностной энергии (дисперсионной и полярной составляющих) оксида графита при фотовосстановлении.

Литература

[1] Шульга Ю.М.; Василец В.Н.; Баскаков С.А.; Мурадян В.Е.; Скрылева Е.А. *Химия высоких энергий*. 2012, 46 (2), 160

Сборка металлических наноструктур в облученных дисперсиях и пленках интерполимерных комплексов: процессы зародышеобразования и роста наночастиц

Зезин А.А.^{a,b}, Фельдман В.И.^{a,b}, Абрамчук С.С.^{a,b}, Верховский В.А.^a, Жариков А.А.^a,
Закурдаева О.А.^b, Зезина Е.А.^a, Пергушев Д.В.^a

^a*Московский государственный университет им. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

^b*Институт синтетических полимерных материалов Российской Академии наук, 117393 Москва, Профсоюзная ул. 70*

E-mail: aazezin@yandex.ru

Металлосодержащие полимерные соединения обладают уникальными электрофизическими свойствами, высокой антибактериальной и каталитической активностью. Фактически востребован весь диапазон размеров наночастиц (НЧ): от нанометров в каталитических системах до десятков нанометров для магнитных материалов, нелинейных оптических устройств и биосенсоров. Сборка металлических наночастиц путем восстановления ионов металлов является универсальным средством для контролируемого синтеза металлических наноструктур.

Большое разнообразие структур реализовано в системах на основе интерполимерных комплексов (ИПК) благодаря возможности управления взаимодействием функциональных групп полианионов и поликатионов с ионами/поверхностью металлов. Уникальная способность ИПК стабилизировать наночастицы и использование радиационно-химических подходов позволило изучить формирование металлических наноструктур на разных стадиях.

Варьирование параметров излучения обеспечивает различные режимы для восстановления ионов меди, никеля, серебра и золота на поверхности и внутри полимерных пленок полиакриловая кислота (ПАК) – полиэтиленимин (ПЭИ). Это позволило получить композиты с наночастицами, статистически распределенными в полимерной матрице и материалы с регулярным пространственным распределением наночастиц по толщине пленки, включая материалы с селективной локализацией НЧ в приповерхностных слоях [1,2]. Исследования облученных дисперсий нестихиометрических комплексов ПАК-ПЭИ обнаружили влияние pH на размеры формирующихся наночастиц меди и серебра. Иницированное рентгеновским излучением восстановление ионов Cu^{2+} в водно-спиртовых суспензиях, содержащих полиаллиамин - ПАК и полиимидазол - ПАК приводит к формированию гибридов со специфической пространственной организацией наночастиц: мицелл (100 – 200 нм), наполненных ультрамалыми наночастицами меди (от 2 до 5 нм). Условия, контролирующие процессы зародышеобразования и роста наночастиц в облученных ИПК различной структуры, обсуждаются.

Литература

- [1] Pergushov D.V., Zezin A.A., Zezin A.B., Müller A.H.E. // Adv. Polym. Sci. **2014**, 255, 173.
- [2] Зезин А.А. Высокомолекулярное соединение, **2016**, 58 (1). 128
- [3] Bakar A., Güven O., Zezin A. A., Feldman V. I. Radiation Physics and Chemistry **2014**, 94, 62.

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ (проект № 18-03-00608)

Комплексы полиэлектролитов с ионами металлов как прекурсоры в процессах синтеза наноразмерных частиц

Озерин А.С.^a, Радченко Ф.С.^a, Новаков И.А.^a

^a Волгоградский государственный технический университет, г. Волгоград, Россия

E-mail: asozerin@mail.ru

Материалы на основе наноразмерных частиц неорганической природы находят применение в качестве высокоселективных катализаторов, мембран, сенсоров [1-5]. Свойства таких материалов сильно зависят от размеров частиц и ширины распределения частиц по размерам. Наноразмерные частицы твердой фазы получают преимущественно методом физической или химической конденсации. Большинство дисперсий твердых частиц представляют собой термодинамически неустойчивые лиофобные золи и, по этой причине, нуждающиеся в стабилизации. Один из способов получения устойчивых наноразмерных частиц основан на использовании разбавленных растворов полимеров, в которых макромолекула взаимодействует с образующейся частицей, что сопровождается экранированием и прекращением роста частицы [6]. Для получения частиц с узким распределением по размерам необходимо, чтобы скорость взаимодействия частиц с макромолекулами была как можно выше, что в разбавленных растворах полимеров может быть достигнуто в случае, когда образование частиц новой фазы происходит внутри макромолекулярных клубков. Известно, что полиэлектролиты образуют комплексы с ионами металлов. В этом случае частицы твердой фазы будут образовываться преимущественно внутри макромолекулярных клубков полимера, а не равномерно во всем объеме раствора. В работе был проведен сравнительный синтез частиц в условиях, когда полиэлектролиты образовывали комплекс с ионами металлов и когда ионы металлов равномерно распределены по объему раствора. Для этого были найдены оптимальные для образования комплексов концентрации полимеров, определены константы диссоциации этих комплексов и их предельные составы. Методом просвечивающей электронной микроскопии были изучены размерные характеристики синтезируемых частиц, посчитаны распределения частиц по размерам. Использование в качестве прекурсора комплекса полиэлектролитов с ионами металлов позволило получить частицы с размером порядка 1,5 нм. и узким распределением по размеру.

Литература

- [1] Litmanovich O. E., Papisov I. M., Eliseeva E. A. // Polymer Science, Ser A. 2007. V. 49. № 10. P. 1093
- [2] Zhu Y., Liu H., Yang L., Liu J.// Materials Research Bulletin. 2012. Vol.47. № 11. P. 3452.
- [3] Kumar D. A., Palanichamy V., Roopan S. M. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. 2014. V. 138. P. 302.
- [4] Pillai V., Kumar P., Hou M.J., Ayyub P., Shah D.O. // Advances in Colloid and Interface Science. 1995. V. 55. P. 241.
- [5] Wu L., Wang T., Xiang W. // Composites Science and Technology. 2013. V. 80. P. 8.
- [6] Papisov I.M. // Polymer Science. Ser. B. 1997. V.39. P. 122.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-03-00594А

Polymer-Surfactant Soft Network

V.S. Molchanov, A.L. Kvyatkovsky, A.L. Orekhov, A.L. Vasiliev, O.E. Philippova

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

E-mail: molchan@polly.pjus.msu.ru

Surfactant molecules possess an amphiphilic structure leading to aggregation in aqueous medium even in polymer-like nano-worms, so-called wormlike micelles. So it is known that the wormlike micelles are enormously long flexible cylindrical micelles of a surfactant, which may be self-assembly formed by long tail surfactant molecules due to balance of hydrophobic interactions of the tails and electrostatic interactions of the heads. Similarly to polymer chains in semidilute regime these long entangled self-assembled micellar chains forming transient network impart viscoelastic properties into a solution up to gel-like state. The wormlike micelles are widely used as thickening agents in food, paints, cosmetics, oilfield industry.

In contrast to polymer chains such micellar chains incessantly break and recombine as a result of weak hydrophobic interaction between molecules in the micelles. They reorganize easily and can transform into droplets of microemulsions if the hydrocarbons were added, then the network of the entangled chains is broken. This is one of the numerous specific highly responsive properties. Thus the other general issue is interactions and self-assembly in surfactant/polymer systems.

Polymer and surfactant self-assembly in aqueous solution attract interest due to influence of the components on a shape and a conformation of each other. In the case of addition of nonsoluble polymer the micellar chains can be transformed into more compact polymer/surfactant complex as we suggest on the basis of macroscopic rheological investigations, where gel-like state – liquid like state transition was observed. According to literature addition of nonsoluble polymers in a wormlike micelles solution may lead to phase separation or their transformation into short rodlike or spherical micelles.

Our results of effect of nonsoluble polymer at small concentrations on the morphology of micellar chains was obtained. The results show flexible cylindrical shape of the objects, that indicates on wormlike micelles covered by polymer chains instead of globule-like collapsed polymer chains stabilized by surfactant shell as might be proposed. Thus surfactant based nano-worms containing trapped nonsoluble polymer were observed. The semidilute solutions of the hybrid chains were obtained. The structure and rheological properties of the soft polymer-surfactant network were investigated. Unexpected branched chains and loops were detected and explained.

This work was financially supported by Russian Science Foundation (project №17-13-01535).

Получение и физико-химические свойства композитов на основе сшитого, несшитого сульфированного поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида) и поли(3,4-этилендиокситиофена)

Шепелева А.С.^a, Кубарьков А.В.^a, Пышкина О.А.^a, Сергеев В.Г.^a

^aМосковский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

E-mail: sasha.shepeleva95@gmail.com

Полимерные материалы со смешанной электрон-ионной проводимостью широко применяются в различных электрохимических устройствах, таких как электроды в аккумуляторах и сенсорах [1]. Разработка композитов на основе ионообменных полимерных мембран и электропроводящих полимеров является эффективным подходом к созданию таких материалов [2]. Для получения стабильных и механически прочных мембран сульфированный поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида) (СПФО) используют термическое сшивание, что является простым и эффективным методом [3]. СПФО может служить перспективной полимерной матрицей для создания композитов с ПЭДОТ, потому что СПФО возможно использовать в качестве ионного проводника и допанта для ПЭДОТ.

Термическое сшивание мембран СПФО подтверждали двумя методами: обратным кислотно-основным титрованием и ИК-спектроскопией. При сравнении спектра с-СПФО со спектром исходного СПФО видно, что пропадают полосы поглощения характерные для сульфогрупп. Мембраны СПФО имеют большую протонную проводимость, чем мембраны с-СПФО.

В настоящей работе смешанные проводящие композиционные мембраны были получены на основе поли(3,4-этилендиокситиофена) (ПЭДОТ), в качестве электропроводящего компонента, и СПФО, с различными степенями сульфирования. Кроме того, смешанные проводящие композиционные мембраны были получены на основе поли(3,4-этилендиокситиофена) (ПЭДОТ) и термически сшитого СПФО (с-СПФО). Мембраны СПФО и с-СПФО выдерживали в водном или спиртовом растворе ЭДОТ при концентрациях 10^{-2} и 10^{-3} М перед проведением реакции полимеризации. Композиты были получены путем матричной полимеризации 3,4-этилендиокситиофена (ЭДОТ) в присутствии СПФО (в качестве полиэлектролитной матрицы) при действии смешанного окислителя (персульфат аммония и хлорид железа (III)).

В результате было обнаружено, что набухание мембран СПФО увеличивается с увеличением содержания спирта в растворе. С увеличением степени сульфирования СПФО количество ЭДОТ, диффундирующего в мембрану, уменьшается вне зависимости от растворителя. При увеличении начальной концентрации ЭДОТ в воде, 10% и 15% растворе этилового спирта увеличивается количество ЭДОТ как в мембране СПФО, так и в мембране с-СПФО. Поверхностное сопротивление композиционных материалов уменьшается с увеличением количества ЭДОТ и увеличивается с увеличением степени сульфирования СПФО и с-СПФО.

Литература

1. Maier J. *Nat. Mater.*, **2005**, 4, 805-815
2. Liu J.; Davis N. R., Liu D.S., Hammond, P.T., *J. Mater. Chem.*, **2012**, 22, 15534
3. Kisang Ahn, Myeongjin Kim, Kiho Kim, Ilgeun Oh, Hyun Ju, Jooheon Kim, *Polymer*, **2015**, 56, 178-188

O-15

Сверхкритический диоксид углерода в синтезе металлополимерных супрамолекулярных наноразмерных структур

Саид-Галиев Э.Е.^a, Наумкин А.В.^a, Хохлов А.Р.^a, Штыкова Э.В.^b

^aФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН), Москва, Россия

^bФГБУН Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук (ИК РАН), Москва, Россия.

E-mail: ernest@ineos.ac.ru

Сверхкритический диоксид углерода (СК CO₂)—ценная среда для синтеза металлополимерных композитов, благодаря его свойствам, главными из которых являются экологическая чистота, отсутствие эффекта «остаточного растворителя» и практически нулевое поверхностное натяжение. Частицы металлов имеют обычно наноразмерный характер, поскольку их ассоциации и росту препятствует окружение полимерного материала. Такие структуры являются супрамолекулярными, так как частицы металла связаны с функциональными группами полимера координационными связями. Методика синтеза носит название импрегнация (диффузия раствора функциональной добавки (ФД) в СК CO₂ в полимерную матрицу с последующим восстановлением металла). Кинетика этого процесса диффузии является нормальной и подчиняется 1-му закону Фика (в случае низкой растворимости ФД) или же аномальной (при средней и высокой растворимости). Используя метод малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и специальные компьютерные программы, впервые удалось восстановить как форму кластеров частиц Ag в поливинилпирролидоне, так и форму кластеров прекурсора металла CODAg[hfacac]. Валентное состояние частиц металла (M), определяемое методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, в большинстве случаев соответствует форме M⁰. В докладе в качестве примеров представлены конкретные области применения металлополимерных нанокомпозитов, полученных нами в СК CO₂.

Это область антифрикционных материалов, где наночастицы Cu в поверхности истираемого полимера эффективно снижают линейный износ и позволяют говорить о создании «безызнасных» материалов. Антимикробные композиты наночастиц Ag и Cu с хитозаном, активно подавляющие рост микробов E.coli, S.stafilococcus и даже споровую форму V.cerius, синтез гетерогенного катализатора Pd/MOF-5, показавшего оптимальное сочетание производительности и селективности в синтезе стирола гидрированием фенилацетилена. Последним по времени был синтез Cu-, Zn и Ag-хитозановых нанокомпозитов для применения в качестве нового поколения фунгицидов–нанofунгицидов в сельском хозяйстве, которые оказались более эффективными в сравнении с известными препаратами в защите хлопка от патогенных бактерий.

Авторы благодарят Президиум РАН (грант № 0085-2018-0012) за финансовую поддержку

Медь-полимерные наноструктурированные покрытия с повышенной теплопроводностью

Силаева А.А.^а, Квасников М.Ю.^а, Макаров А.В.^а

^а *Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047, Москва, Миусская пл., 9*

E-mail: silushka92@mail.ru

Одним из широко востребованных композиционных материалов, обладающих различными по своим свойствам и выполняющих при этом защитную функцию для различных изделий и конструкционных материалов, являются лакокрасочные покрытия. В области разработки лакокрасочных материалов и покрытий большое внимание уделяется получению и исследованию покрытий с наноразмерными структурами [1]. В рамках разработки новых лакокрасочных покрытий, получаемых методом катодного электроосаждения, предложена технология получения наноструктурированных полимерных покрытий, содержащих медь.

Покрытия получены в ходе одновременного восстановления металла и осаждения полиэлектролита на катоде в среде водного раствора при pH 5,5-6,0, при постоянном напряжении и температуре 33-35°C. При исследовании структуры и свойств новых покрытий было выявлено наличие металл-полимерных структур наноразмерного масштаба, образующихся во время формирования покрытия на подложке-катоде [2]. На рисунке 1 приведена микрофотография медь-полимерного покрытия.

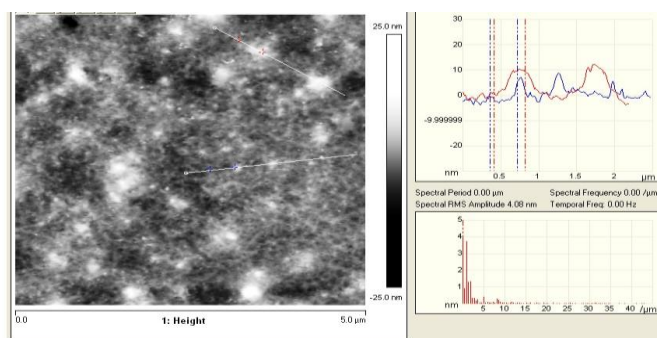


Рис. 1. Микроморфология медь-полимерного покрытия

Наличие подобной структуры обуславливает увеличение прочностных характеристик полученных покрытий а так же обеспечивает неизменность защитных свойств.

Литература

- [1] М.Ю. Квасников, О.А. Романова, А.В. Павлов, А.А. Силаева, Лвин Ко Ко Наноструктурированные лакокрасочные металлополимерные покрытия//Российские нанотехнологии 2018. ,Том 13, № 1–2, с. 65-70
- [2] Силаева А. А., Квасников М. Ю., Варанкин А. В., Антипов Е. М., Киселев М. Р., Крылова И. А. Лакокрасочные теплопроводящие медь-полимерные покрытия. //«Журнал Прикладной химии».2015- т. 88. № 12. С. 1699.

Работа выполнена при поддержке: минобрнауки. Согл №14.574.21.0133 «Композиционные самовосстанавливающиеся и самозалечивающиеся полимерные и металлополимерные покрытия».

О-17

Пористые композиционные материалы на основе биосовместимых полимеров для тканевой инженерии

Григорьев Т.Е.^a, Луканина К.И.^a, Шепелев А.Д.^a, Антипова К.Г.^a,
Крашенинников С.В.^a, Чвалун С.Н.^{a,b}

^aНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^bИнститут Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова
Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: timgrigo@yandex.ru

Тканевая инженерия и регенеративная медицина ставят сложные задачи по разработке биосовместимых материалов - матриц с уникальным комплексом свойств: структурных, физико-механических, физико-химических и биологических. Нетканые волокнистые материалы для биомедицины, полученные по технологии электроформования, активно разрабатываются в последнее десятилетие и во многом удовлетворяют требованиям, предъявляемым к матрицам. Однако несмотря на значительные успехи в этой области, структура и биосовместимость синтетических нетканых материалов не в полной мере отвечает необходимым требованиям для клеточного роста, также как физико-механические характеристики и стабильность структуры нетканых материалов на основе биополимеров, обладающих отличной биофункциональностью, не удовлетворительны. Для ряда губчатых и волокнистых материалов систематически исследована взаимосвязь структуры, состава и их *in vitro* и *in vivo* биологической активности, обеспечивающая формирование системы представлений управляемого синтеза матриц с заданными свойствами для тканевой инженерии и клеточных технологий.

Исследовано влияние наноразмерных анизотропных наполнителей на структуру и свойства коллагеновых и хитозановых губчатых материалов. Показана эффективность использования хитозана и хитина для модификации свойств коллагеновых губчатых материалов. Также систематически исследовано структурообразование принципиально новых высокопористых композиционных материалов – губчато-волокнистых на основе природных наполнителей (хитозан, коллаген) и нетканых волокон из полимеров природного и синтетического происхождения, полученных электроформованием. Показано, что введение незначительного (менее 5%) количества хитозана в волокнистую основу композита приводит к росту модуля упругости в 1,5-2 раза. При формировании непрерывной губчатой структуры в матрице волокнистого материала наблюдается 20 кратный рост модуля упругости. Модификация электроформованных нетканых материалов на основе синтетических полимеров коллагеном приводит к значительному росту биосовместимости получаемых композитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 17-13-01376.

Биоразлагаемые полимеры на основе лактида: от хирургических нитей к крепежным изделиям и «умным» имплантатам

Седуш Н.Г.^{a,b,c}, Демина В.А.^{b,c}, Крашенинников С.В.^c, Калинин К.Т.^{a,c}, Чвалун С.Н.^{b,c}

^a РТУ МИРЭА, Москва, РФ

^b ИСПМ РАН, Москва, РФ

^c НИЦ «Курчатовский институт», Москва, РФ

E-mail: nsedush@gmail.com

Почти 50 лет назад были разработаны рассасывающиеся хирургические нити на основе полигликолида [1]. С тех пор сфера применения биосовместимых и биоразлагаемых полимеров в различных областях медицины расширяется с каждым годом. Технологии контролируемой гомо- и сополимеризации лактида и других циклических сложных эфиров позволяют синтезировать биоразлагаемые материалы с широким спектром свойств и сроков деградации. В последнее десятилетие эти полимеры хорошо зарекомендовали себя для изготовления систем направленной доставки и пролонгированного высвобождения лекарств. Для повышения эффективности разрабатываемых материалов и изделий, придания им новых функциональных свойств могут использоваться различные подходы. Введение кальций-фосфатных наполнителей, таких как гидроксипатит, при изготовлении крепежных изделий для остеосинтеза приводит к их упрочнению при условии диспергирования наполнителя на субмикронном уровне. Гидроксипатит нейтрализует кислые продукты деградации, ускоряет восстановление костной ткани. На основе биоразлагаемых композиционных материалов разработаны интерферентные винты (рис. 1). Другим перспективным направлением является получение биоразлагаемых материалов и изделий, способных заданным образом реагировать на температуру тела человека. Например, стенты из таких «умных» материалов раскрываются после извлечения из катетера и закрепляются в сосуде. Показано, что сополимеры L-лактида с ϵ -капролактоном с температурой стеклования близкой к 37 °С обладают необходимыми характеристиками. Разработанные на их основе периферические стенты (рис. 1) успешно прошли испытания на животных.

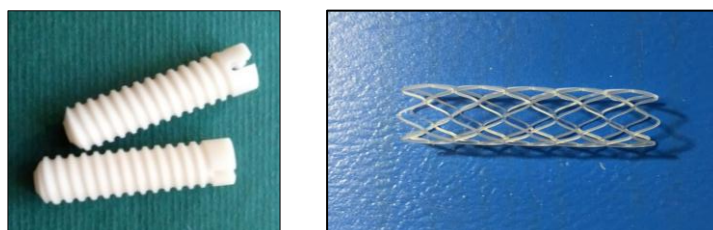


Рис. 1. Биоразлагаемые винты (слева) и периферический стент (справа)

Литература

[1] Hermann J.B.; Kelly R.J.; Higgins G.A. *Archives in Surgery*. **1970**, 100(4), 486.

Работа выполнена при частичной поддержке Гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых (проект МК-2878.2017.3).

Flow state diagrams of two-phase liquid in coaxial capillaries

Sergey Vagner^a, Stanislav Patlazhan^{a,b}

^a *Institute of Problem of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia*

^b *Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: vagnerserge@gmail.com

The formation of the monodisperse microdroplets is a key problem for various applications. The up-to-date techniques for droplet fabrication is based on the microfluidic devices of different geometries. The coaxial capillaries belong to one of the simplest and efficient geometries where two immiscible fluids meet in parallel streams. Depending on the volume flow rates, two main dynamic flow modes – dripping or jetting – could be realized. In the dripping mode, the droplet detaches in a close vicinity of the internal capillary while in the jetting mode the stream of the dispersed liquid extends into the external capillary and breaks up downstream due to the Rayleigh-Plateau instability. The monodisperse microdroplets may be generated only in the dripping mode of flow whereas the jetting regime could be useful in fiber formation. Thus, the understanding of the relation between the possible flow modes and flow characteristics in coaxial capillaries is utterly important.

In the present work, the numerical modeling is used to study conditions for the dripping and jetting states of flow of two-phase liquid in the coaxial microchannels. The flow of Newtonian fluids with the volume flow rates and viscosities of the continuous and dispersed liquids, Q_c , η_c and Q_d , η_d , respectively, is considered. The obtained results are convenient to represent in a form of diagrams where each point corresponds to a certain flow mode of the two-phase liquid. We suggested drawing the state diagrams in the $Ca_c - \eta_d/\eta_c$ coordinates at different velocities U_d of the dispersed component. The capillary number of the continuous fluid, Ca_c , for such a system is defined as $\eta_c U_c / \gamma$ (γ is the interfacial tension coefficient). These coordinates were obtained due to the detailed analysis of the influence of the mean velocities and viscosities of the liquids on the shape of the dispersed component. This approach allowed localizing for the first time all types of the dripping and jetting modes along with several types of the transient flow states. In particular, it was shown that the increase in the flow rate of the dispersed liquid results in narrowing the classical dripping mode location on the diagrams as well as expansion of the squeezing dripping mode location (the droplet size is equal or larger than the diameter of the outer capillary). The jetting mode with the narrowing shape of jet has been observed with increase in Ca_c whereas the widening jet was found with the increase in the relative viscosity η_d/η_c of the dispersed phase. It follows from the diagrams that at sufficiently high flow rates of the dispersed liquid the squeezing jetting mode can be observed. In this case the jet thickness is practically equal to the outer capillary diameter. Hence, the obtained state diagrams made it possible to establish one-to-one correspondence between different flow modes with fluid viscosities and flow regimes in coaxial capillaries.

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research (Project № 18-53-15013). The numerical modeling was carried out using the computing resources of Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Science.

Molecular switches based on the grafted layers of amphiphilic homopolymers: computer modeling

Valentina Vasilevskaya^a, Alexei Lazutin^a

^a *Nesmeyanov Institute of Organoelement compounds RAS, Moscow, Russia*

E-mail: vvas@ineos.ac.ru

The self-assembly of grafted macromolecules is a complex process sensitive to many factors, among which are grafting density and solvent quality, architecture and chemical composition of macromolecules, availability of groups with different affinity to solvent and their relative content, interaction with substrate etc. By means of computer modeling we have addressed the grafted layers of amphiphilic homopolymers self-assembling to lamellae with different domain spacing and performing complex behavior in transition region. Within transition region the lamellae with different spacing domains coexist: the lamellae with big domain spacing are on the top of grafting layer and the lamellae with small domain spacing are close to grafting surface. The lamellae are connected with each other and form bicontinuous parking garage structure joining all side groups into the single cluster. The sharp switch between lamellae and bicontinuous structure opens the perspective for the practical applications.

References

- [1] Lazutin, A. A.; Vasilevskaya, V. V.; Khokhlov, A. R. *Soft Matter* 2017, 13 (45), 8525.
- [2] Lazutin, A. A.; Vasilevskaya, V. V. *Polymer Sci. C* 2018 (in press)

This work was supported by Russian Science Foundation (project number 14-13-00745)

Microphase separation in polyelectrolyte melts: mesoscale simulation

Alexey A. Gavrilov^a, Alexander V. Chertovich^a

^a *Physics Department, Lomonosov Moscow State University, Leninskiye Gory 1-2, Moscow, Russia, 119991*

E-mail: gavrilov@polly.phys.msu.ru

The problem of microphase separation in polyelectrolyte copolymer melts has received massive attention during the last years due to the ability of such copolymers to form nonconventional structures. However, due to the overall complexity of the system there is no complete picture of the phase behavior even for the case of linear polyelectrolyte diblock-copolymers; moreover, the presence of two types of very distinct interactions (volume and electrostatic) makes it hard to develop a theory capturing all the relevant effects. We present a mesoscopic simulation of the phase behavior of linear polyelectrolyte copolymers. We use a well known dissipative dynamics method (DPD) which has been proven to be an excellent choice for simulation of melts of uncharged copolymers; the implementation of Coulombic interactions necessary to simulate polyelectrolytes is discussed. The phase behavior is studied for a number of chain compositions and interaction strengths and for chains with different architecture; at low dielectric constants, the charge correlation effects cause the charged block with counterions to form a condensed phase; various morphologies have been obtained.

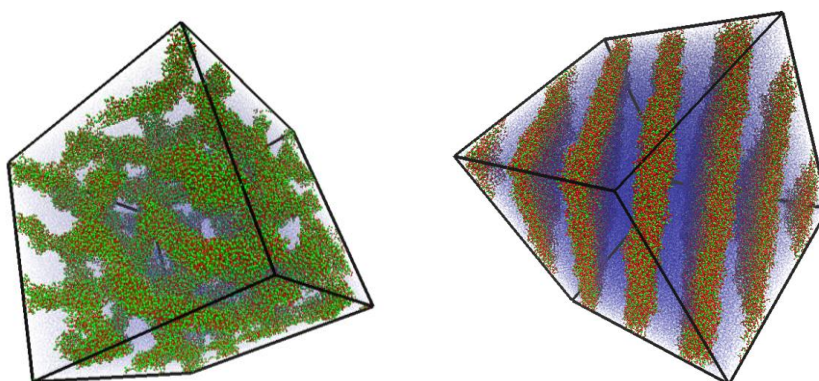


Fig. 1. Examples of the structures obtained in a melt of polyelectrolyte copolymer with one charged block. Left: a bicontinuous structure; Right: a lamellar structure. Both of these phases are obtained at zero Flory-Huggins interaction parameter χ .

References

[1] Gavrilov, A. A.; Chertovich, A. V.; Kramarenko, E. Y. *J. Chem. Phys.* **2016**, *145* (17), 174101.

This work was supported by Russian Science Foundation, project 18-73-00128

Сравнительный Анализ Внутримолекулярной Подвижности Силоксановых и Карбосилановых Дендримеров. Компьютерное Моделирование

Курбатов А.О.^{a,b}, Балабаев Н.К.^c, Мазо М.А.^d, Крамаренко Е.Ю.^{a,b}

^a Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

^b Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

^c ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино, Россия

^d Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

E-mail: kurbatov@polly.phys.msu.ru

Сравнительный анализ внутримолекулярной динамики четырех типов изолированных дендримеров с четвертой по седьмую генерации, принадлежащих семействам силоксанов и карбосиланов, отличающихся длиной спейсера, типом химических связей и функциональностью ядра (Рис. 1.), был выполнен с помощью полноатомного компьютерного моделирования методом молекулярной динамики [1].

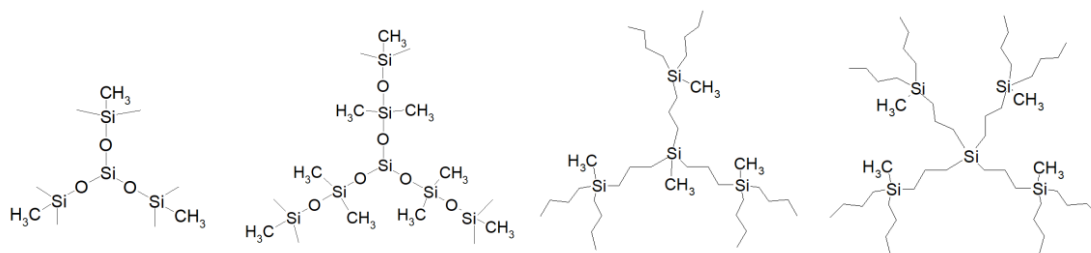


Рис. 1. Схематическое изображение первых генераций сравниваемых дендримеров

Вычислены средние радиальные и угловые значения всех точек ветвления (Si-атомов) различных топологических слоев внутри дендримера, их дисперсии, и были найдены распределения времен релаксации радиального и углового движений. Было показано, что дендроны всех дендримеров вытягиваются от центра и уменьшаются в телесном угле с увеличением числа генерации. Характерные времена релаксации как углового, так и радиального движения Si-атомов составляют порядка нескольких наносекунд, и они возрастают с увеличением числа генерации и уменьшаются с температурой, причем времена угловой релаксации больше времен радиальной. Время релаксации в карбосиланах больше, чем в силоксанах. Динамика вращательного угла карбосилановых дендримеров показывает, что изгиб цепи в основном реализуется через транс-гош переходы в ветвящихся связях с Si-атомами.

Литература

[1] Kurbatov A.O.; Balabaev N.K.; Mazo M.A.; Kramarenko E.Y. *Polymers*. **2018**, 10, 838.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031, с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Влияние Размера Полярных Групп на Конформационное Поведение Жесткой Дипольной Цепи

Гордиевская Ю.Д.^{а,б}, Крамаренко Е.Ю.^{а,б}

^аМосковский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Москва, Россия

^бИнститут элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, РФ

E-mail: gordievskaya@polly.phys.msu.ru

Исследуемая методом молекулярной динамики дипольная цепь является моделью линейного полимера, у которого полярные группы можно представить в виде последовательности свободно ориентированных диполей (Рис.1). Экспериментально данные системы активно изучаются: к ним, например, относятся диэлектрические полимеры, широко используемые в робототехнике в качестве искусственных мышц, и цвиттер-полиионы, нашедшие применение в медицине как самозалечивающиеся материалы.

Конформационное поведение полимерной цепи с полярными группами определяется электростатическими и объёмными взаимодействиями, а также конформационной энтропией [1-3]. Были получены диаграммы состояний системы путём варьирования величины электростатических взаимодействий, жёсткости цепи и размера полярных групп. Особенный интерес представляет неполярный растворитель, так как в данном случае электростатические силы являются существенными.

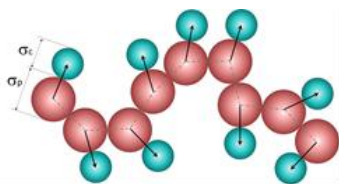


Рис. 1. Схематическое представление дипольной цепи. Полярная группа – это пара розовый и голубой шарик, её размер варьируется за счёт изменения голубого шарика.

В неполярном растворе для коротких цепей ($N=32$) были найдены следующие конформации: трилистник, петля, шпилька. Для более длинных полимеров ($N=64, 128, 256$) и промежуточных значениях размера полярных групп реализуются глобула, тор, вытянутая конформация в порядке увеличения жёсткости цепи при фиксированном большом значении величины электростатических взаимодействий. С увеличением/уменьшением объёма полярной группы в диаграмме состояний пропадает сначала тороидная конформация, затем глобулярная, в итоге, при очень маленьком/большом размере полярных групп наблюдается вытянутая цепь.

Литература

- [1] Gordievskaya Yu. D.; Gavrilov A. A.; Kramarenko E. Yu. *Soft Matter*. **2018**, 14, 1474.
- [2] Гордиевская Ю.Д.; Крамаренко Е.Ю. *Высокомолек. соед. С*. **2018**, 60(2), 1.
- [3] Gordievskaya Yu. D., Budkov Yu. A., Kramarenko E. Yu.; *Soft Matter*. **2018**, 14, 3232.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (договор № 14.W03.31.0018, грант Правительства Российской Федерации в соответствии с Постановлением № 220 от 9 апреля 2010 г.) и выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Гордиевская Ю.Д. благодарит Фонд развития теоретической физики «БАЗИС».

Dynamics of Conformational Transitions in nano-DNA

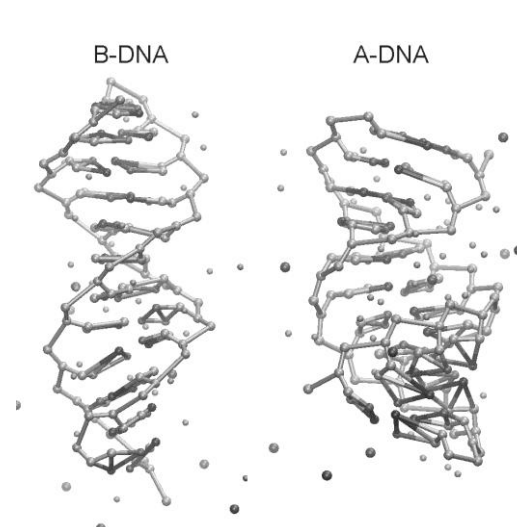
E.A. Zubova^a, N.A. Kovaleva^a

^a *N.N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: zubova@chph.ras.ru

The two main observable conformations of the DNA molecule are the B and the A forms (see Figure). DNA takes the B form in saline, and A form - with the addition of alcohol or salt. In a living cell, DNA changes to the A form locally when binding to proteins, in transcription and replication, which is the reason for the interest in this conformational transition.

In the present work we carry out its molecular dynamics study in the framework of the coarse-grained model proposed by us [1]. This model allows to reproduce the conformational mobility of ribose rings, the exact geometry of the helix and the interaction of DNA charges with ions in solution. The effect of the solution is modeled through the use of temperature-dependent effective solvation potentials for the interactions of DNA with ions and of the ions with each other [2]. The model allows to vary the friction between DNA and water.



We study the behaviour of a nano-DNA (12 base pairs) at different salt concentrations in an aqueous solution both without and with friction. The A-DNA, stable at high salt concentrations, proves to be a dynamic conglomerate of the molecule and the ions coming from the solution into the deep major groove and then leaving it [3]. The helix consisting of more than thousand atoms behaves as a small atomic cluster in a transition that is of the first order in the thermodynamic limit [4]. Namely, even at low salt concentrations, the molecule jumps between B and A forms. There is no critical state. At concentrations near the transition point the jumps happen more often, far from it – less often. The control parameter determines the probability to find the molecule in the

A or B forms. Introduction of friction into the model does not change the dynamics and order of the transition, it influences only the frequency of the jumps and their rate.

References

- [1] Kovaleva, N.A., Koroleva, I.P., Mazo, M.A., Zubova, E.A. *J. Mol. Model.* **2017**, 23, 66.
- [2] Klinov, A. P., Zubova, E. A., Mazo, M. A. *Physical and Chemical Aspects of the Study of Clusters, Nanostructures and Nanomaterials* **2017**, 230.
- [3] Kovaleva, N.A., Zubova, E.A. *Doclady Physical Chemistry* **2017**, 475, 119.
- [4] Kovaleva, N.A., Zubova, E.A. In: Andrianov I., Manevich A., Mikhlin Y., Gendelman O. (eds) *Problems of Nonlinear Mechanics and Physics of Materials. Advanced Structured Materials* **2019**, 94, 225. Springer, Cham.

This work was supported by the Russian Science Foundation (award 16-13-10302). The simulations were carried out in the Joint Supercomputer Center of Russian Academy of Sciences.

Исследование термодинамических свойств полисилоксановых наногелей и дендримеров

Сармини Ю.А.^a, Сологубов С.С.^a, Смирнова Н.Н.^a, Музафаров А.М.^{b,c}

^a *Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

^b *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, РФ*

^c *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия*

E-mail: uliarybakova93@gmail.com

Сверхразветвленные полимеры – это особый класс дендритных макромолекул, которые характеризуются высокой плотностью ветвления и древоподобной архитектурой [1, 2]. В последние 25 лет сверхразветвленные полимеры привлекают к себе особый интерес исследователей благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам, наличию большого числа функциональных групп, а также многочисленным возможностям их практического применения в биомедицине, нанотехнологиях и супрамолекулярной химии. Одними из наиболее перспективных представителей сверхразветвленных полимеров являются наногели и дендримеры. Они имеют сферическую форму, обладают относительно низкой вязкостью растворов по сравнению с линейными полимерами, а также способны инкапсулировать лекарственные препараты за счёт наличия свободных полостей внутри молекул. Наличие большого количества концевых групп, формирующих внешнюю сферу наногелей и дендримеров, в значительной степени определяет их поведение и позволяет тонко регулировать различные свойства.

Исследование термодинамических свойств кремнийорганических полимеров с помощью прецизионной и дифференциальной сканирующей калориметрии позволяет выявить и проанализировать практически важные зависимости «термодинамическое свойство – состав». В настоящей работе были изучены температурные зависимости теплоемкостей силоксановых дендримеров второй и четвертой генераций и соответствующих наногелей с концевыми триметилсилильными группами в области 6–500 К; были выявлены расстеклование и низкотемпературная релаксационная аномалия веществ; были рассчитаны стандартные термодинамические функции изученных наногелей и дендримеров для области от $T \rightarrow 0$ до 500 К для различных физических состояний веществ. Были сопоставлены полученные термодинамические характеристики исследованных наногелей и дендримеров с изученными ранее дендримерами различной природы. В результате были установлены зависимости термодинамических свойств кремнийорганических полимеров от структуры молекул, природы концевых групп и молекулярно-массовых характеристик.

Литература

[1] Voit B.I., Lederer A., *Chem. Rev.* **2009**, 109(11), 5924.

[2] Muzafarov A.M., Tatarinova E.A., Vasilenko N.V., Ignat'eva G.M. Organosilicon dendrimers and irregular hyperbranched polymers, *Academic Press (Cambridge)*, **2017**, 323.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (№ 18-33-905).

Триазин-Триазольные Сверхразветвленные Полимеры Как Класс Новых Перспективных Энергоемких Связующих

Петров А.О.^{a,b}, Малков Г.В.^b, Карпов С.В.^b, Гавришова Т.Н.^{a,b}, Шастин А.В.^{a,b},
Бадамшина Э.Р.^b

^a *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия.*

^b *Институт проблем химической физики, Черноголовка, Россия.*

E-mail: artyom2212@yandex.ru

На сегодняшний день одной из основных задач химии является синтез новых функциональных материалов. В качестве таких материалов рассматриваются сверхразветвленные полимеры (СРП) с уникальными сорбционными и реологическими характеристиками, а также возможностью модифицирования внешней оболочки макромолекулы и получения core-shell структур для решения различных задач [1].

Для получения СРП благодаря высоким выходам, селективности, мягким условиям проведения реакции и доступности реагентов представляют интерес реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения азидов к алкинам с образованием 1,2,3-триазольных циклов. На этой реакции основано получение перспективного класса триазин-триазольных СРП [2] реакцией полиприсоединения азид-ацетиленовых мономеров АВ₂.

Данная работа посвящена синтезу и изучению свойств данного класса полимеров. На сегодняшний день была синтезирована серия азидо-ацетиленовых мономеров типа АВ₂ (А₂В) с различными функциональными группами, разработаны методологии получения полимеров в блоке и в растворе реакцией CuAAC, изучены кинетические особенности обоих методов, изучены свойства (энергоёмкость, термическая стабильность, степень разветвленности и т.д.) полимеров и модифицированных по концевым группам полимеров.

Литература

[1] Кузнецов А. А. и др. *Структура и динамика молекулярных систем.* **2017**, 13-19.

[2] Malkov G. V. et al. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics: An International Journal Dealing with Scientific and Technological Aspects of Energetic Materials.* **2008**, 33(6), 431-436.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 16-29-01076 офи_м.

Олиго- и полидиметилсилоксановые производные на основе возобновляемых природных ресурсов

Дроздов Ф.В.^а, Тарасенков А.Н.^а, Миленин С.А.^а, Ардабьевская С.Н.^а, Демченко Н.В.^а, Бузин М.И.^б, Музафаров А.М.^{а,б}

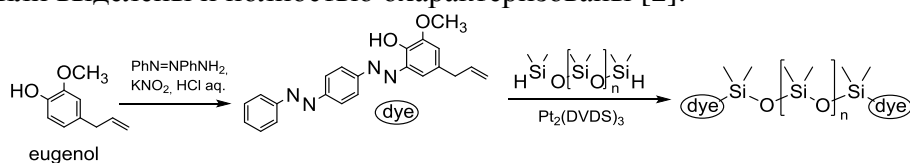
^аИСПМ РАН, 117393 Москва, ул. Профсоюзная, 70

^бИНЭОС РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, 28

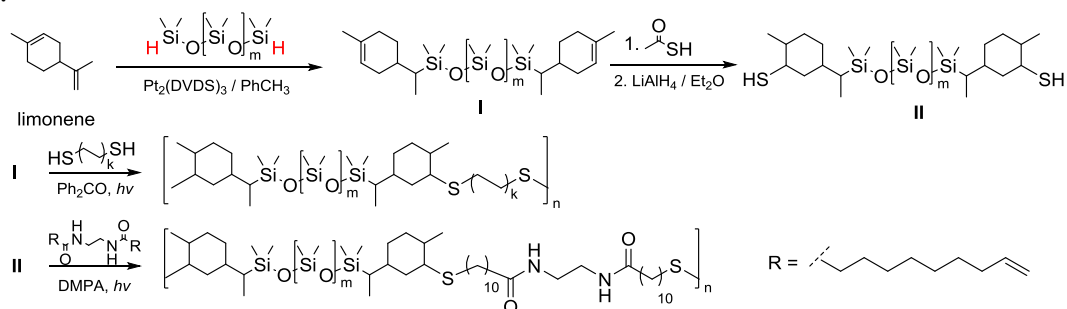
E-mail: drozdov@ispm.ru

На сегодняшний день разработано большое число полимеров, полученных на основе различных природных соединений: жирных ненасыщенных кислот и их триглицеридов, растительных масел, а также из различных ароматических производных [1]. Тем не менее, постоянно растет интерес к многотоннажным природным соединениям для создания мономерной базы на их основе.

В данной работе были выбраны два легкодоступных природных соединения – лимонен и эвгенол. Данные соединения представляют интерес с точки зрения наличия в их структурах двух функциональных групп, что подразумевает их дальнейшую трансформацию в различные производные. Наличие двойной связи в обоих природных соединениях открывает возможность проведения реакций гидросилилирования и гидротииолирования, что в свою очередь и было использовано для получения силоксановых производных. Далее, полученные силоксановые производные эвгенола подвергались реакции азосочетания с образованием силоксановых азокрасителей, которые были выделены и полностью охарактеризованы [2].



Наличие второй двойной связи в силоксановых производных лимонена позволило провести их дальнейшую трансформацию по реакции гидротииолирования. Данный подход позволил получить ряд сополимеров с различным чередованием силоксановых и метиленовых звеньев, содержащих тиольные и амидные фрагменты в полимерной цепи:



Полученные сополимеры охарактеризованы методами ЯМР, ИК спектроскопии, ГПХ. Измерены их термические характеристики методами ТГА и ДСК.

Литература

[1] Kristufek S.L., Wacker K.T., Tsao Y.-Y.T., Su L., Wooley K.L. *Nat. Prod. Rep.*, **2017**, 34, 433.

[2] Drozdov F.V., Cherkaev G.V., Buzin M.I., Muzafarov A.M. *J. Organomet. Chem.*, **2018**, 871, 135-139.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (Грант МК 18-29-04037)

О-28

Композитные материалы на основе углеродных нанотрубок

Насибулин А.Г.

Сколковский институт науки и технологий, Москва

Наноразмерные ламелярные образования в длинноцепочечных молекулярных кристаллах и полиэтилене: специфика фазовых переходов в кристаллах типа КВЦ и складчатых кристаллах

В.А. Марихин, В.М. Егоров, Л.П. Мясникова

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург, Россия

E-mail: v.marikhin@mail.ioffe.ru

Длинноцепочечные молекулярные кристаллы (ДМК) – n-алканы, алкано-спирты и диолы, моно- и дикарбоновые кислоты – при кристаллизации из растворов и расплавов образуют стопки из наложенных друг на друга наноламелей толщиной в единицы нм, в которых выпрямленные молекулы образуют кристаллы различных сингоний в зависимости от числа и четности С-С-связей

При нагревании методом ДСК в ДМК обнаруживаются два типа сравнительно узких по температуре фазовых переходов: промежуточный твердофазный структурный переход I рода (ФП-I) и окончательный переход типа порядок – беспорядок (ФП-II), соответствующий плавлению ДМК. В складчатых кристаллах полиэтилена эти переходы размываются и при обычных условиях сливаются, образуя размытый переход, принимаемый за плавление полимера.

Оказалось, что ФП-I в ДМК являются размытыми фазовыми переходами по сравнению с классическими фазовыми переходами первого рода, что обусловлено гетерогенным возникновением нанозародышей новой фазы в объеме исходной и постепенным распространением образовавшейся межфазной границы на весь объем кристалла в достаточно узком температурном интервале около 1 К.

Современные теории размытых ФП-I позволяют определить объемы и габитус нанозародышей, которые могут образовываться в нескольких (от двух до десяти) соседних ламелях в зависимости от типа концевых групп в ДМК. В складчатых кристаллах нанозародыши образуются только в пределах одиночных ламелей.

Анализ зависимостей температур плавления различных типов ДМК от длины метиленовых последовательностей в них показал, что при увеличении количества повторяющихся метиленовых групп индивидуальные свойства ДМК теряются и все они эволюционируют к свойствам полиметилена.

Работа выполнена при поддержке Программы Президиума РАН № 32 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий» и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 16-03-00493-а).

POSTER PRESENTATIONS

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

**Исследование методом рентгеновской фотоэлектронной
спектроскопии химической структуры поверхностного слоя
композиционных полимерных мембран**

Алтынов В.А.^а, Кравец Л.И.^а, Яблоков М.Ю.^б, Ярмоленко М.А.^в

^а *Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н. Флерова, Дубна, Россия*

^б *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия*

^в *Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, Гомель, Беларусь*

E-mail: altynov@cv.jinr.ru

В настоящее время для модифицирования свойств полимерных пленок, мембран, волокон и т.п. используют нанесение на поверхность тонких, в том числе наноразмерных, слоев полимеров иной химической природы. Такое модифицирование позволяет в широких пределах изменять поверхностные свойства исходных полимерных материалов. Для осаждения применяют современные технологические и экологически чистые методы, такие как полимеризация органических прекурсоров в низкотемпературной плазме, магнетронное распыление и электронно-лучевое диспергирование полимеров в вакууме. Для изучения элементного состава и химической структуры осажденных слоев полимеров наиболее информативным является метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). В отличие от других методов анализа, метод РФЭС дает информацию о химическом составе поверхностных нанослоев модифицированных материалов, не искаженную сигналом от нижележащих слоев. Высокое разрешение современных спектрометров, использующих монохроматоры рентгеновского излучения, позволяет уверенно разделять электронные линии в пределах 1 эВ. Это, в свою очередь, позволяет определять химическое состояние атомов и, тем самым, идентифицировать функциональные группы, в состав которых эти атомы входят.

В данной работе методом РФЭС исследована химическая структура наноразмерных пленок сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) и политетрафторэтилена (ПТФЭ), осажденных на поверхности трековых мембран из полиэтилентерефталата путем электронно-лучевого диспергирования полимеров в вакууме. Полученные экспериментальные данные свидетельствуют о значительном различии электронной структуры и химического состояния углерода в исходных полимерах и осажденных пленках. Так, например, в спектре C1s исходного ПТФЭ присутствуют два компонента: интенсивный с максимумом энергии связи 292.1 эВ, отвечающий химическому состоянию углерода в составе CF₂-групп, и компонент малой интенсивности с максимумом энергии связи 284.5 эВ, который соответствует углероду в составе связей C–C. Парциальные концентрации этих состояний соответственно равны 98.5 и 1.5%. Для осажденного полимера наблюдается уширение спектра, что указывает на суперпозицию нескольких линий, соответствующих различным химическим состояниям атома углерода. Аппроксимация спектра C1s выявила три дополнительных пика с энергиями связи 287.5, 293.9 и 289.8 эВ, которые соответственно можно отнести к группам C*–CF, CF₃ и связи C–F. Концентрация этих групп в пленках ПТФЭ различной толщины, как показывают экспериментальные данные, колеблется незначительно.

Новые борорганические производные стереорегулярного *цис*-тетрафенилциклотетрасилоксана для получения супрамолекулярных систем нового поколения

Анисимов А.А.^a, Дроздов Ф.В.^{a,b}, Долгушин Ф.М.^a, Щеголихина О.И.^a, Музафаров А.М.^{a,b}

^a *ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова*

^b *ФГБУН Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова*

E-mail: anisimov@ineos.ac.ru

Бурное развитие современных технологий стимулирует поиск новых материалов с комплексом заданных ценных свойств. В последнее время большое количество работ посвящено получению связанных водородными связями органических пространственных сеток (Hydrogen organic framework HOF). Данные объекты представляют большой интерес, т.к. могут быть использованы в решении различных научных и практических задач, а именно для хранения и разделения газов, разделения низкомолекулярных веществ, связывания важных биологических объектов, хранения информации и т.д. Существует ряд подходов к получению таких пространственно-упорядоченных систем.

Поиск новых прекурсоров и установление взаимосвязи структура-свойство в целевых сетчатых структурах откроет дорогу к получению супрамолекулярных систем нового поколения. Для решения данной проблемы представляется интересным использовать уникальные стереорегулярные органоциклосилесесквиоксаны, а именно их борорганические производные. Использование силоксановых макроциклов с четко упорядоченной структурой позволяет сформировать пространственный каркас, в то время как борорганические группы обеспечат специфические межмолекулярные взаимодействия между отдельными молекулами, что и приведет к образованию уникальной сетчатой структуры.

В данной работе нами были получены новые борорганические производные *цис*-тетрафенилциклотетрасилоксана с хорошими выходами.

Все полученные соединения были полностью охарактеризованы комплексом современных методов анализа: ЯМР-, ИК-спектроскопия, РСА, масс-спектрометрия высокого разрешения и элементный анализ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031 и РФФИ в рамках научного проекта № 18-302-00001.

Стабильность металлосодержащих эпоксидных нанокомпозитовБогданова Л.М.^a, Шершнёв В.А.^a, Спириин М.Г.^a, Иржак В.И.^a, Джардималиева Г.И.^a*Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка Московской области, РФ*

E-mail: bogda@icp.ac.ru

Практическое использование эпоксидных нанокомпозитов (ЭНК), содержащих наночастицы металлов (НЧ), возможно при условии их достаточной стабильности в условиях эксплуатации. Стабильность эпоксидной матрицы подтверждена широким использованием эпоксидных композиций в различных отраслях промышленности и строительстве. Однако вопрос о стабильности металлических НЧ в ЭНК в условиях их эксплуатации до настоящего времени не рассматривался.

В качестве модели для исследования стабильности ЭНК в условиях естественного освещения и в темноте использовали плёнки толщиной 80-100 мкм на основе эпоксидного олигомера ЭД-20, 4,4'-диаминодифенилметана (ДДМ) и НЧ серебра, синтезированных *in situ*. Компоненты отверждения ЭД-20 и ДДМ являются одновременно и восстановителями прекурсора НЧ - миристана серебра. Способ синтеза ЭНК с НЧ серебра, синтезированными *in situ*, был предложен нами ранее. [1].

НЧ серебра обладают уникальными оптическими свойствами, обусловленными поверхностным плазмонным резонансом (ППР), что даёт возможность методом электронной спектроскопии исследовать поведение НЧ серебра в ЭНК и их влияние на свойства ЭНК. Показано уменьшение оптической плотности плёнок при хранении в условиях естественного освещения и в темноте, свидетельствующее в соответствии с законом Бугера-Ламберта-Беера об уменьшении концентрации НЧ серебра. При концентрациях прекурсора 0.2 и 0.3 мас.% определены независимые от условий хранения первый порядок реакции в обоих случаях и зависимые только от концентрации прекурсора константы скорости (0.060 сут^{-1} и 0.081 сут^{-1} соответственно). Конверсия оптической плотности составляет соответственно при хранении на свету и в темноте 0.30 и 0.10 при концентрации 0.2 мас.% и 0.80 и 0.20 при концентрации прекурсора 0.3 мас.%. Обсуждаются возможные механизмы превращений НЧ – дигестивное созревание и образование анизотропных структур [2]. Таким образом, стеклообразное состояние полимерной матрицы не является достаточным условием для стабилизации НЧ в НК. Эволюция НЧ в полимерном НК может привести к изменению свойств НК в условиях их эксплуатации. Этот факт следует принимать во внимание при исследовании свойств НК на основе НЧ металлов.

Литература

[1] Богданова Л.М., Кузуб Л.И., Джавадян Э.А., Рабенюк Е.В., Новиков Г.Ф., Помогайло А.Д. *Macromol.Symp.* **2012**, 317-318, 117.

[2] Иржак В.И. *Журнал физической химии.* **2017**, 91(8), 1364.

Работа выполнена по теме гос. задания, № гос. рег. 01201055328 с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ИПХФ РАН.

Исследование полимеризации дихлорзамещенного *n*-ксилилена методом *in situ* ДСК

Бузин А.И.^{a,b}, Стрельцов Д.Р.^a, Дмитрияков П.В.^b, Чвалун С.Н.^{b,a}

^a ИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

^b НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: al37919@gmail.com

Разработана конструкция ячейки ДСК, встроенного в вакуумную установку для полимеризации на поверхности из газовой фазы, а также электроника и программное обеспечение для управления калориметром. Проведена температурная калибровка и калибровка теплового потока данного калориметра в широком температурном интервале. Определены постоянные времени калориметра и отработана методика деконволюции ДСК кривых. Методом *in-situ* ДСК исследована полимеризация дихлорзамещенного *n*-ксилилена (дихлор-ПК). Конденсат мономера на подложке формировали по методике, аналогичной применяемой для получения незамещенного поли-*n*-ксилилена [1], а также для монохлорзамещенного поли-*n*-ксилилена [2]. Полимеризация дихлор-замещенного *n*-ксилилена начинается при существенно более низкой температуре по сравнению с полимеризацией незамещенного *n*-ксилилена (температурный диапазон полимеризации составляет от -135 °С до -90 °С для дихлор-ПК и от -110 °С до -95 °С для незамещенного ПК при скорости нагрева 1.1 град/мин). Тепловой эффект полимеризации с ростом степени замещения *p*-фениленового кольца уменьшается и составляет 52±12 кДж/моль для дихлор-ПК, 71±9 кДж/моль для монохлор-ПК [2] и 86±3 кДж/моль для незамещенного ПК [1].

Литература

[1] Streltsov D.R., Buzin A.I., Dmitryakov P.V., Kamasa P., Ivanov D.A., Chvalun S.N. *Thermochimica Acta*, **2016**, 643, 65.

[2] Streltsov D.R., Buzin A.I., Dmitryakov P.V., Chvalun S.N. *Thermochimica Acta*, **2018**, 664, 32.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке проектов РФФИ №18-03-00916 и 18-03-00662.

Влияние молекулярной массы хитозана на кинетику восстановления серебра в его растворах

Волков Д.А.^a, Малахов С.Н.^b, Григорьев Т.Е.^b

^a*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

^b*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

E-mail: da.volkov@physics.msu.ru

Хитозановые материалы привлекают значительный интерес исследователей, вызванный широкими возможностями применения данных материалов в медицине. Не меньший интерес вызывают антибактериальные и оптические свойства наночастиц серебра. Также актуальным представляется исследование фундаментальных аспектов структурообразования в металлополимерных системах, содержащих природные полисахаридные макромолекулы и ионы или наночастицы металлов.

В работе проведено исследование влияния температур и молекулярной массы хитозана на кинетику восстановления ионов серебра в растворе с применением методики гидролиза, позволившей получить хитозаны с различной молекулярной массой, но с одинаковой степенью деацетилирования. Показано, что скорость восстановления наночастиц серебра обратно пропорциональна молекулярной массе хитозана при различных температурах. Это может указывать, что в восстановлении ионов серебра макромолекулами хитозана участвуют концевые группы, концентрация которых растет с уменьшением молекулярной массы.

Последовательное гидротииолирование и гидросилилирование как новый подход к созданию амфифильных кремнийорганических структур

Высочинская Ю.С.^{a,b}, Анисимов А.А.^a, Темников М.Н.^a, Щеголихина О.И.^a,
Музафаров А.М.^{a,b}

^a *Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*

^b *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия*

E-mail: vysochinskaja@yandex.ru

В связи со стремительным развитием технологий все больше встает вопрос о необходимости в создании новых структур, обладающих четко регулируемой архитектурой, в химии макромолекул. Особый интерес представляют амфифильные макромолекулы, так как они охватывают различные области применений, в качестве «контейнеров» для доставки лекарств, ПАВ, стабилизаторов для создания эмульсий и суспензий, межфазных катализаторов, нанореакторов, прекурсоров для получения ориентированных тонкопленочных покрытий. Не смотря на разнообразие структур, химического состава и строения, актуальность создания принципиально новых амфифильных систем стоит очень остро. Однако предыдущие методы синтеза являются трудоемкими и технологически сложными, поэтому поиск новых, легко доступных и универсальных методов остается открытым вопросом и по сегодняшний день.

Кремнийорганическая химия представляет нам большой выбор соединений, которые могут быть использованы в качестве прекурсоров/матриц для создания амфифильных макромолекул. Такой выбор позволяет нам варьировать как структуру (например, циклическая, линейная, разветвленная), так и функциональность, например, в одной структурной единице может находиться две разные или две одинаковые по функциональности группы.

В данной работе был разработан новый подход к созданию таких структур - это сочетание реакций гидротииолирования и последующего гидросилилирования. На первом этапе по реакции гидротииолирования вводили, как гидрофильную составляющую (в случае циклических объектов), так и гидрофобную (в случае линейной или разветвленной структуры) с сохранением гидридной функциональной группой при атоме кремния. На втором этапе по реакции гидросилилирования вводили группу, придающую амфифильность системе.

Данная методика была распространена как на мономерные, циклические, линейные, так и на разветвленные кремнийорганические структуры. Что позволило получить ряд амфифильных «Янус»-структур циклического строения, линейных полимеров с гидрофобной/гидрофильной составляющей в каждом звене цепи, а также полностью гидрофильных и гидрофобных циклических структур. Все полученные соединения были полностью охарактеризованы современными методами анализа: ЯМР-, ИК-, масс-спектрометрией, ДСК, ТГА, ГПХ и элементным анализом.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031

Перспективные направления в разработке перевязочных средств

Гадельшина И.Н. *КНИТУ, Казань, Россия*, Зенитова Л.А. *КНИТУ, Казань, Россия*

E-mail: ntc.gadelshina@mail.ru

Среди многообразия производных полиуретановых материалов особое место занимают ортопедические и иммобилизирующие повязки. Однако, в своем большинстве в России их закупают по импорту. Работа посвящена разработке отечественных ортопедических и иммобилизирующих повязок на основе силилированных уретановых (СПУ) олигомеров.

Выявлены преимущества полимерного бинта по сравнению с традиционным гипсовым бинтом, что даст возможность создать технологичную композицию для нанесения на тканевую основу. Полимерная композиция должна оставаться неотвержденной в течение длительного времени хранения без доступа влаги, и, в тоже время, при взаимодействии с влагой отверждаться в течение часа, оставляя возможность проведения необходимых операций по моделированию иммобилизирующего ортопедического биндажа.

СПУ-олигомер, полученный по одностадийному методу обладает узким молекулярно-массовым распределением. Наличие двух уретановых группировок в одной молекуле и отсутствие мочевиных групп сообщает низкую вязкость олигомера, невысокую прочность, но хорошую гибкость и эластичность композитов вследствие малой концентрации водородных связей. Материалам на основе СПУ-олигомеров, полученных на основе изоцианаталкокисилана, присуща более высокая скорость отверждения, чем для композиций на основе олигомера с аминоалкокисиланом.

Получаемый по двухстадийному способу СПУ-олигомер обладает высокой степенью полидисперсности. Молекула СПУ-олигомеров, полученного таким образом, имеет и уретановые и мочевиные группы, вследствие чего может образовывать сильные взаимодействия по водородным связям, что приводит к повышенным значениям вязкости олигомера и прочности продуктов на его основе. Также присутствие мочевиной связи сказывается на улучшении термической стойкости таких композиций из-за более сильного взаимодействия по водородным связям по сравнению с полиуретанами, снижении температуры стеклования.

Рынок перевязочных иммобилизирующих средств еще насыщен гипсовыми повязками, однако развитие современных технологий позволит войти в высокотехнологичный сектор рынка медицинских изделий. Успешное освоение производства бинта позволит освоить технологию получения «искусственной тканой кожи», трансдермальных медицинских пластырей, зубных оттисков.

Синтез и свойства полидиметилсилоксанов с фрагментами карбоновых кислот различного строения

Городов В.В.^a, Тихонов П.А.^a, Миленин С.А.^a, Андропова У.С.^{a,b}, Бузин М.И.^{b,c},
Васильев В.Г.^b, Шрагин Д.И.^{a,b}, Музафаров А.М.^{a,b}

^a ИСПМ РАН им. Н.С. Ениколопова, Москва, Россия

^b ИНЭОС РАН им. А.Н. Несмеянова, Москва, Россия

^c МПГУ им. В.И. Ленина, Москва, Россия

E-mail: gorodovvv@ispm.ru

Ранее мы сообщали об [1], [2] о синтезе, термических и реологических свойствах полидиметилсилоксанов (ПДМС), содержащих фрагменты ундеценовой и бензойной кислот (рис. 1). В этом докладе мы представим информацию о синтезе и свойствах телехеликого ПДМС с фрагментом 4-карбоксипирролидона (рис. 1) и сравним их свойства с ранее полученными ПДМС (рис. 2).

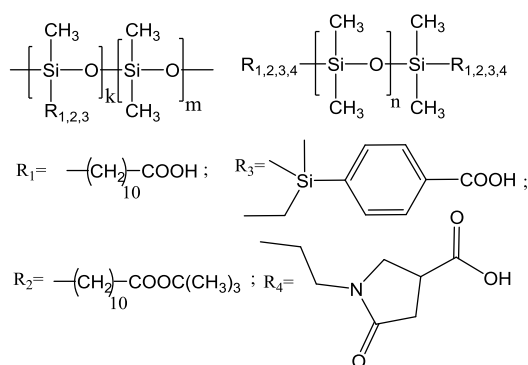


Схема 1. Структурные формулы с фрагментами карбоновых кислот различного строения

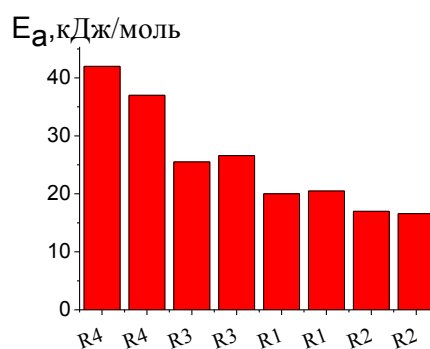


Рис. 1. Сравнение энергий активации вязкого течения телехеликовых ПДМС с фрагментами карбоновых кислот различного строения

Литература

- [1] Gorodov V. V., Demchenko N. V., Buzin M. I., Vasil'ev V. G., Shragin D. I., Papkov V. S., Muzafarov A. M., *Russian Chemical Bulletin*, **2017**, 66(7), 1290-1299.
[2] V. V. Gorodov, P. A. Tikhonov, M. I. Buzin, V. G. Vasil'ev, S. A. Milenin, D. I. Shragin, V. S. Papkov, A. M. Muzafarov, *Polymer Science, Series B*, **2018**, Vol. 60, No. 3, pp. 290–298.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект №18-33-00096 мол_a и проект №18-03-00637 А

Композиты биомедицинского назначения на основе полилактида и модифицированных фосфатов кальция

Демина В.А.^{a, b}, Бабичева А.А.^c, Седуш Н.Г.^{a, b}, Крашенинников С.В.^a, Чвалун С.Н.^{a, b}

^a НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

^b ИСПМ РАН, г. Москва, Россия

^c РТУ МИРЭА, г. Москва, Россия

E-mail: demina.varvara@yandex.ru

В различных областях медицины требуются материалы, обладающие определенным комплексом химических, биологических и механических свойств. Свойства и скорость резорбции биосовместимых и биоразлагаемых полимеров и сополимеров на основе лактида можно регулировать путем изменения их молекулярной и надмолекулярной структур. Крепежные изделия на их основе ограниченно применяются в травматологии и ортопедии, например, при переломах кистей и стоп. Для расширения областей использования биоразлагаемых материалов необходимо заметно улучшить их физико-механические характеристики. Одним из наиболее перспективных подходов является введение биоактивных фосфатов кальция, которые являются основным минеральным компонентом натуральной кости [1]. Проблема создания полимерных композитов на основе фосфатов кальция заключается в слабой адгезии частиц неорганического наполнителя к полимерной матрице. Увеличить сродство матрицы и наполнителя можно путем покрытия последнего неким связующим агентом.

В данной работе в качестве связующего вещества была выбрана молочная кислота. Наибольшая степень прививки равная 3 вес.% достигается при модификации гидроксиапатита 30% раствором молочной кислоты. Установлено, что при модификации 50% раствором молочной кислоты гидроксиапатит претерпевает структурные изменения с образованием лактата кальция и гидрофосфата кальция, что подтверждается методами ИК-спектроскопии и рентгеноструктурным анализом. Композиты, полученные на основе поли(L-лактида) и модифицированного молочной кислотой гидроксиапатита, характеризуются повышенными физико-механическими характеристиками. Так модули при изгибе и при растяжении равны $7,53 \pm 0,13$ ГПа и $2,03 \pm 0,06$ ГПа при 20% наполнения, соответственно. В то время как без модификации наполнителя эти значения составляют $6,3 \pm 0,6$ ГПа и $1,26 \pm 0,03$ ГПа. Данный эффект достигается за счет повышения степени диспергирования наполнителя и улучшения его адгезии к полимерной матрице за счет модификации молочной кислотой.

Литература

[1] Баринов С.М., Комлев В.С. Биокерамика на основе фосфатов кальция. Москва: Наука, 2005. С. 204.

Работа выполнена при поддержке РФФ (проект №14-13-01402).

Получение силиконовых вулканизатов на основе графт-сополимеров винилполисилоксана и стирола по реакции гидросилилирования

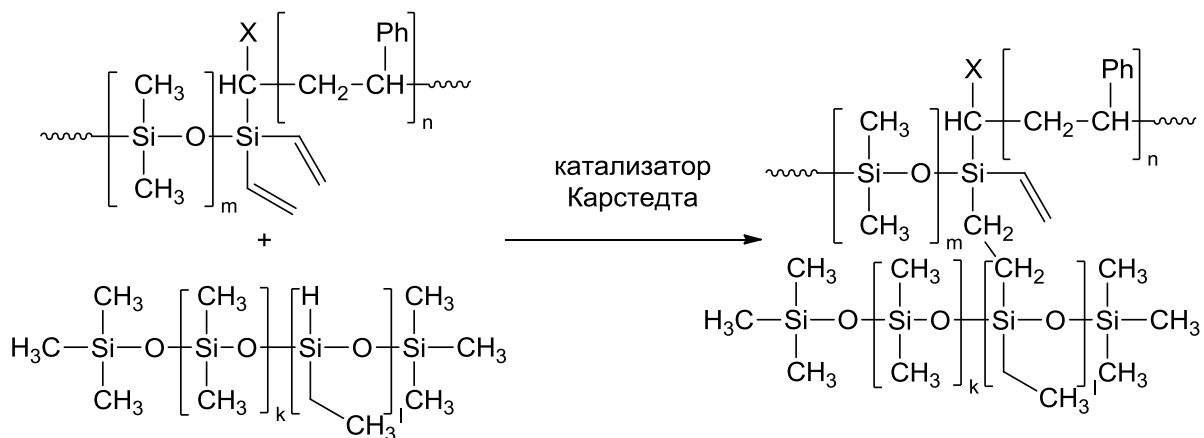
Добрынин М.В., Маслатородова Е.А., Исламова Р.М.

Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: elenoid@mail.ru

Силиконы активно применяются в таких сферах как электроника, космическая промышленность, машиностроение и медицина. Они обладают устойчивостью к высоким и низким температурам, биологической и химической инертностью, а также электроизоляционными свойствами [1]. Тем не менее, ненаполненным материалам на основе силиконов обычно присуща малая прочность. Одним из решений данной проблемы является использование сополимеров, в том числе графт-сополимеров винилполисилоксана и стирола.

В ходе работы были синтезированы графт-сополимеры винилполисилоксана и стирола ($M_w = 49000-82000$ г/моль, вязкость 10–30 П, содержание полистирола 30–55% wt). Затем готовилась двухкомпонентная система: первый компонент содержал сополимер и катализатор Карстедта (итоговая концентрация 1.0×10^{-5} моль/л), второй состоял из смеси сополимера и гидридсодержащего полидиметилсилоксана. Компоненты смешивались при комнатной температуре и с помощью реакции гидросилилирования были получены силиконовые вулканизаты (Схема), которые обладают улучшенной прочностью на разрыв ($\sigma = 2.9-4.8$ МПа) и относительным удлинением при разрыве ($L = 110-160$ %).



где X - остаток инициатора

Схема. Вулканизация сополимера винилполисилоксана и стирола с гидридсодержащим полисилоксаном.

Литература

[1] Cao J., Zuo Y., Wang D., Zhang J., Feng S., *New J. Chem.* **2017**, 41(16), 8546.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-33-00769 мол_а).

Исследования были проведены при поддержке ресурсных центров СПбГУ: «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования», «Магнитно-резонансные методы исследования».

Гидросилилирование полисилоксанов с помощью комплексов Rh(I), Pt(II) и Ir(III)

Добрынин М.В., Исламова Р.М.

Институт химии СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: mdobrynin42@yandex.ru

Реакция каталитического гидросилилирования широко используется при синтезе различных кремнийорганических соединений. Важнейшим применением данной реакции является получение сшитых силиконов (вулканизатов) [1]. Наиболее часто для данной цели используется катализатор Карстедта, представляющий комплекс дивинилтетраметилдисилоксана и платины(0), который хорошо растворяется в силиконах и обладает высокой каталитической активностью. Однако неустойчив и требует хранения при низкой температуре в анаэробных условиях. Кроме того, в процессе вулканизации по реакции гидросилилирования данный комплекс может разлагаться с выпадением платиновой черни. Одним из решений данной проблемы является поиск и исследование новых катализаторов на основе металлов платиновой группы.

В данной работе были изучены три группы катализаторов в реакции гидросилилирования полидиметилсилоксана с концевыми винильными группами и гидридсодержащего силоксанового олигомера: ацетилацетонатные комплексы родия(I), нитрильные комплексы платины(II) и циклометаллированные комплексы иридия(III) (Схема). Установлено, что комплексы родия(I) позволяют проводить вулканизацию при комнатной температуре, комплексы платины(II) могут применяться в температурном интервале (21–80)°С, и комплексы иридия(III) активны только при повышенных температурах (80–200)°С. Все исследованные комплексы металлов устойчивы при хранении (комнатная температура), не требуют анаэробных условий и не дают побочных продуктов в процессе получения силиконовых вулканизатов.

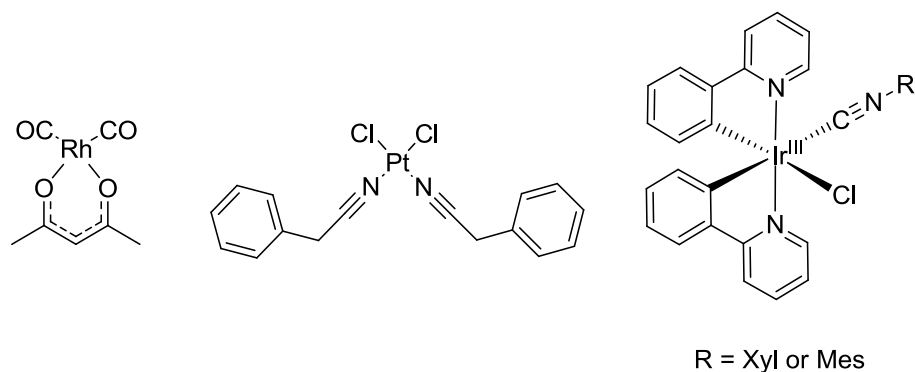


Схема.

Литература

[1] Wang D., Klein J., Mejia E. *Chem. – An Asian J.* **2017**, *12* (11), 1180.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-33-00769 мол_а).

Исследования были проведены при поддержке ресурсных центров СПбГУ: «Термогравиметрические и калориметрические методы исследования», «Оптические и лазерные методы исследования вещества», «Магнитно-резонансные методы исследования», «Методы анализа состава вещества».

Надмолекулярная структура реакционноспособных олигомеров при смешении и в условиях химических превращений

Жаворонок Е.С.^a, Сенчихин И.Н.^b, Чалых А.Е.^b

^a РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

^b ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

E-mail: zhavoronok_elena@mail.ru

Надмолекулярная структура высокомолекулярных соединений – важный фактор, определяющий их поведение и свойства. Одним из подходов, описывающих структурную неоднородность олигомеров и полимеров является концепция ассоциатов – упорядоченных нанообразований флуктуационной природы. В настоящей работе в рамках ассоциатной концепции исследована надмолекулярная структура эпоксидных олигомеров (ЭО), их смесей и олигоаминов, в том числе при смешении и при протекании в эпоксиаминных системах химических реакций.

Методом динамического светорассеяния нами установлено наличие в ЭО и олигоаминах рассеивающих нанообразований, которые мы трактовали как ассоциаты макромолекул. Средний размер и структура этих ассоциатов определяются природой молекулы олигомера, в частности составом звена и наличием протонодонорных групп, способных формировать водородные связи. Так, средний размер ассоциатов в олигомерах линейной структуры заметно выше, чем в разветвленных олигомерах. В первом приближении определено, что в одном ассоциате, в среднем, содержится 10-100 молекул (в зависимости от природы звена, молекулярной массы и разветвленности олигомера). По модели времени жизни точечного источника диффузионного компонента оценены и сравнены между собой времена жизни ассоциатов в олигомерах различной природы.

Показано, что при смешении олигомеров происходит разрушение моноассоциатов и формирование более крупных смешанных агрегатов. Исходя из информации о структуре и типе физической связи, ответственной за формирование ассоциата (диполь-дипольное взаимодействие или водородная связь) сделано предположение о пути формирования, строения и причине аномального термического поведения смешанного агрегата: его размеры в диапазоне температур 20-60 °С не уменьшаются, а неожиданно возрастают.

Установлена связь реакционной способности ЭО в реакциях нуклеофильного замещения с природой звена олигомера и ассоциатной структурой системы. На основании анализа результатов ИК-спектроскопии, химического анализа, реовискозиметрии и предварительно полученных сведений об ассоциатной структуре исходных систем сделан вывод о том, что в разветвленных ЭО с протонодонорными группами образуются внутримолекулярные ассоциаты, в которых доступность эпоксидной группы для атаки аминогрупп понижена. Однако предварительное образование смешанных ассоциатов с ЭО другой природы позволяет разрушить внутримолекулярные ассоциаты и сформировать смешанные межмолекулярные ассоциаты. Это повышает доступность эпоксидной группы разветвленного олигомера для атаки аминогруппы и заметно увеличивает наблюдаемую скорость реакции.

Синтез наночастиц серебра в облученных водных суспензиях поливинилтриазола: кинетика формирования и рН-контроль размеров

Жариков А.А.^a, Климов Д.И.^b, Зезин А.А.^b, Абрамчук С.С.^a, Фирсова Г.Ф.^c,
Поздняков А.С.^c, Емельянов А.И.^c

^aМГУ им. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

^bИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

^cИркутский институт химии им. А. Е. Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия

E-mail: garikov-aleksey@mail.ru

Сборка наночастиц металлов путем восстановления их катионов в полимерных матрицах радиационно-химическим методом является известным способом контролируемого синтеза металлических наноструктур. Такой подход позволяет регулировать соотношение процессов зародышеобразования и роста благодаря варьированию термодинамических и кинетических параметров восстановления, а также обеспечивает «настройку» взаимодействия функциональных групп полимера с ионами и поверхностью наночастиц.

Макромолекулы **поли-1-винил-1,2,4-триазола** обеспечивают эффективную стабилизацию наночастиц и контроль размеров. Полимерные нанокомпозиты на основе серебра в матрице ПВТ могут успешно применяться в фармакологии и медицине. Показана их антимикробная активность, вместе с тем, сам полимер является нетоксичным и биосовместимым.

В работе установлено, что облучение водных суспензий поливинилтриазол- Ag^+ (Ag^+ /ПВТ 1:25, $c\text{Ag}^+$ $8,44 \cdot 10^{-4}$ М и Ag^+ /ПВТ 1:2,5, $c\text{Ag}^+$ $8,44 \cdot 10^{-3}$ М) при рН 2.0; 2.4 и 6.0 приводит к эффективной генерации металлических наноструктур. Обнаружено, что кинетические кривые образования наночастиц серебра имеют сложный характер: на начальных стадиях скорость формирования в несколько раз ниже, чем при более высоких дозах облучения. Полученные результаты можно объяснить, сопоставляя вклады процессов зародышеобразования и роста на разных этапах сборки наночастиц: так понижение эффективной скорости генерации на начальном этапе свидетельствует об относительно высоком вкладе процессов зародышеобразования.

Обнаружено, что при рН 6.0 размеры наноструктур составляют от 2 до 6 нм с максимумом распределения при 3-4 нм, при рН 2.4 размеры становятся больше (4-5 нм), более широким оказывается и распределение (1-8 нм). В случае рН 2 формируются частицы с диаметром 8-10 нм и с наиболее широким распределением по размерам (4-18 нм). Таким образом, уменьшение рН системы и увеличение степени протонирования ПВТ приводит к уменьшению контроля процессов сборки и роста наночастиц, и, как следствие, меньшей селективности по размерам.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-33-01155

P-15

Влияние биоразлагаемого наполнителя на основе полилактида на реологическое поведение термотропных гидрогелей хитозана для челюстно-лицевой хирургии

Загоскин Ю.Д.^a, Григорьев Т.Е.^a, Кузнецов Н.М.^a, Бухарова Т.Б.^b, Васильев А.В.^{b,c}, Чвалун С.Н.^{a,d}

^aНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^bФГБНУ «Медико-генетический научный центр», Москва, Россия

^cФГБУ «Центральный научно-исследовательский институт стоматологии и челюстно-лицевой хирургии» Минздрава России, Москва, Россия

^dИнститут Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: zagos@inbox.ru

Остеопластические операции в стоматологии позволяют восполнить объем утраченной костной ткани. На данный момент лучшим материалом для остеопластики считается аутогенная костная крошка. Она обладает заметными остеоиндуктивными и остеокондуктивными свойствами. Однако для таких систем необходима дополнительная операция по взятию материала из донорской зоны, а так же использование мембран для предотвращения роста мягких тканей. Таким образом, существует потребность в создании материала лишенного этих недостатков.

Термоотверждаемый гидрогель на основе хитозана и β -глицерофосфата ранее был предложен для формирования пломбы костного дефекта.[1] Основными задачами данного матрикса являются противодействие внешним механическим нагрузкам, а так же доставка и высвобождение костного морфогенетического белка BMP-2.

В рамках данной работы была разработана методика синтеза пористых микрочастиц на основе поли-L-лактида (рис.1). Были получены гетерогенные системы на основе термоотверждаемого гидрогеля хитозана с массовой долей частиц от 0,5% до 15%. Данные системы были исследованы методами ротационной вискозиметрии и динамическим механическим анализом. Показана зависимость модулей накопления и потерь, а так же температуры гелеобразования от наполнения системы. При добавлении 15 мас.% частиц исчезает непрерывная фаза гидрогеля, что подтверждается уменьшением значений модуля накоплений.

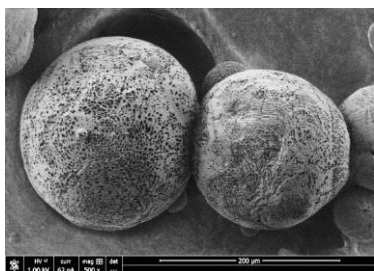


Рис. 1. РЭМ-изображение пористых микрочастиц поли-L-лактида.

Литература

[1] Grigoriev T. E.; Zagoskin Y. D.; Belousov S. I. et al. *Bionanoscience*. 2017, 7(3), 492–495.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФ № 16-15-00298

Гидрогели на основе тройных блок-сополимеров лактида и полиэтиленгликоля: структура и свойства

Загоскин Ю.Д.^a, Григорьев Т.Е.^a, Бакиров А.В.^{a,b}, Богданова О.И.^{a,b}, Чвалун С.Н.^{a,b}

^aНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^bИнститут Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: zagos@inbox.ru

Исследования в области регенеративной медицины и тканевой инженерии трактуют жесткие требования к 3D-матрицам и имплантатам. Они должны обладать следующими свойствами: а) Механические характеристики этих систем должны находиться в узком диапазоне и соответствовать нативным тканям; б) Биоинженерные конструкции не должны вызывать воспалительной реакции; в) Системы должны резорбировать за заданный промежуток времени. Наиболее перспективной основой для таких структур являются биоразлагаемые полимеры природного и синтетического происхождения.[1]

Объектом исследования в данной работе стали гидрогели на основе тройных блок-сополимеров лактида и полиэтиленгликоля. Данные блок-сополимеры за счет амфифильного строения способны структурироваться в водной среде с образованием трехмерной сетки.

В рамках работы был синтезирован ряд тройных блок сополимеров ПЛЛА-ПЭО-ПЛЛА с концевыми блоками поли(L)-лактида. Общая молекулярная масса варьировалась от 10 до 45 кДа. Из полученных сополимеров синтезированы гидрогели двумя различными методами: «быстрого» диализа и «медленного» диализа. Изучена структура полимерной матрицы методом малоуглового рентгеновского рассеяния с использованием синхротронного излучения. Выявлено, что увеличение молекулярной массы сополимера приводит к увеличению расстояний между рассеивающими центрами в гидрогеле (рис.1). Кристалличность системы зависит не только от типа лактидного звена, но и от способа получения гидрогеля и изменяется при отжиге системы. Было показано, что структура гидрогелей оказывает значительное влияние на их физико-механические свойства.

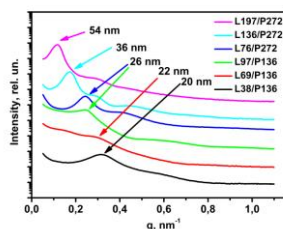


Рис. 1. Кривые малоуглового рентгеновского рассеяния гидрогелей различного состава.

Литература

[1] Slaughter B. V.; Khurshid S. S.; Fisher O. Z. et al. *Adv. Mater.* 2009, 21, 3307–3329.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ № 17-03-01361 А.

Tolyl-containing silsesquioxanes of different structures are precursors for obtaining of new supramolecular systems

P.A. Zader^a, A.A. Anisimov^b, A.A. Korlyukov^b, Shchegolikhina O.I.^b, A.M. Muzafarov^{b,c}

^a D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

^b A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement compounds of RAS, Moscow, Russia.

^c N. S. Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials of RAS, Moscow, Russia.

E-mail: paul.zadyor@gmail.com

Recently, metal-organic framework structures (MOF) and hydrogen-bound framework structures (HOF) have been widely used. These materials have high surface area, and therefore they are promising systems, which are widely used as adsorbents, as membranes for gas separation and for heterogeneous catalysis. However, a large number of these compounds have some limitations, like low thermal and thermal-oxidative stability, hydrolytic instability. Compounds with silicone ligands do not have these flaws.

It is carboxy derivatives that are mainly used to obtain MOFs. Oxidation of tolyl groups is frequently used to synthesize carboxy derivatives. Methods of obtaining such silicones proceed with usage of acid, excess quantities of oxidants. They do not have high yields, also, may be two-stage process [1] and conditions can be destructive for siloxane bond. Therefore, the goal of the research is to solve this issue. During this research cubic and stereoregular cyclic silsesquioxanes [2, 3] with *p*-tolyl substituent at the silicon atom have been synthesized. Cubic silsesquioxanes have been obtained by the hydrolytic condensation, and cyclic silsesquioxanes have been synthesized by the template method.

Template method is a method of obtaining complex frame structures, the synthesis of which from simpler blocks by standard methods is impossible or difficult. Silsesquioxanes obtained by standard methods do not have high yield, but silsesquioxanes synthesised by template methods generally have. Thus, the advantages of template method over standard have been shown.

During the research silsesquioxanes with *p*-tolyl substituent have been obtained. All compounds have been characterized by methods of physical and chemical analysis: NMR-, IR- spectroscopy, HRMS, element analysis and X-ray diffraction analysis.

References

- [1] Liu, H.; Kondo, S.; Takeda, N.; Unno, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*(31), 10074–10075.
- [2] A.A. Anisimov, P.V. Zhemchugov, S.A. Milenin, A.S. Goloveshkin, U.S. Tsareva, I.S. Bushmarinov, A.A. Korlyukov, R.U. Takazova, Yu.A. Molodtsova, A.M. Muzafarov, O.I. Shchegolikhina *Journal of Organometallic Chemistry* **2016**, *823*, 103-111.
- [3] Anton A. Anisimov, Yuriy N. Kononevich, Pavel V. Zhemchugov, Sergey A. Milenin, Alexander A. Korlyukov, Ul'yana S. Tsareva, Alexander S. Peregudov, Pavel V. Dorovatovskii, Yuliya A. Molodtsova, Rina U. Takazova, Olga I. Shchegolikhina, Aziz M. Muzafarova, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 22052-22060.

This work was supported by the Russian Science Foundation (grant no. 14-23-00231).

Влияние Способа Выделения Нановибрилл β -хитина на Механические Свойства Композитов на Основе Полиакриловой Кислоты

А.П. Истомина^{1,3}, О.И. Богданова^{1,2}, Н.А. Глушкова^{1,4}, С.И. Белоусов¹, С.В. Крашенинников¹, Д.Р. Стрельцов^{1,2}, С.Н. Чвалун^{1,2,3}

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

²Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

³Московский технологический университет, Москва, Россия

⁴Московский Физико-Технический Институт (ГУ), Москва, Россия

E-mail: lina.aspirant@yandex.ru

Хитин – второй по распространённости структурный полисахарид – является перспективным нанонаполнителем за счёт своих привлекательных свойств. Вопрос разработки новых методик выделения частиц полисахаридов, которые не повреждали бы структуру нативных волокон, является актуальным в материаловедении.

В нашем исследовании был опробован новый способ получения наночастиц β -хитина из гладиусов командорского кальмара (*Berryteuthis magister*) – эксфолиация с помощью водных растворов аскорбиновой или акриловой кислот. В качестве сравнения суспензия нановибрилл β -хитина была получена методом ТЕМРО-окисления [1]. Полученные суспензии использовались в роли наполнителя (концентрации 1, 2, 3 масс. %) при синтезе композита на основе полиакриловой кислоты (ПАК). Были рассмотрены механические характеристики полученных композитов и влияние на них способа выделения частиц полисахарида.

По результатам реологических испытаний были подобраны оптимальные условия эксфолиации. Основным критерием подбора служило наибольшее значение действительной части модуля сдвига. Морфология наночастиц β -хитина, полученных эксфолиацией и ТЕМРО-окислением, была исследована методом АСМ. С помощью метода ПЭМ был определен диаметр наночастиц. Изменения в химическом строении контролировались методом ИК-спектроскопии. Из отношения интенсивности полос поглощения деформационных колебаний амида II (1560 см^{-1}) и валентных колебаний С-О (1030 см^{-1}) была проведена оценка степени ацетилирования [2].

Механические свойства полученных нанокompозитов на основе ПАК и β -хитина исследовали на универсальной разрывной машине Instron 5965 при контролируемой влажности воздуха при комнатной температуре. Наибольший усиливающий эффект замечен при влажности 75 – 100%, при этих условиях введение 1-3% хитина позволяеткратно увеличить модуль Юнга. Так же с помощью метода ДМА проанализировали зависимость модуля упругости от температуры для композитов и чистой полиакриловой кислоты.

Литература

[1] Saito T., Hirota M., Tamura N., Kimura S., Fukuzimi H., Neux L., Isogai A. *Biomacromolecules*. **2009**, *10*, 1993.

[2] Shigemasa Y., Matsuura H., Sashiwa H., Saimoto H. *Biomacromolecules*. **1996**, *18*, 237.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ №17-73-10324.

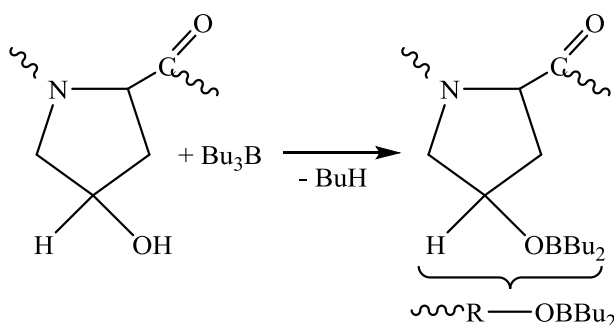
Термическая стабильность и биологическая устойчивость гибридного наноматериала на основе желатина и полиметилметакрилата

Морозова Е.А.^а, Кузнецова Ю.Л.^а, Вавилова А.С.^а, Семенычева Л.Л.^а

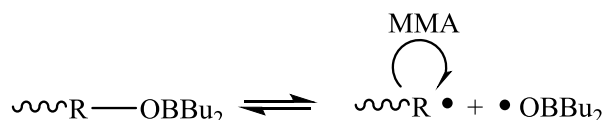
^а Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Российская Федерация.

E-mail: katrin_97_97@inbox.ru

Гибридный наноматериал, представляющий собой привитой сополимер желатина и полиметилметакрилата, синтезирован с использованием трибутилбора. ИК-спектр, молекулярно-массовое распределение и размеры частиц продукта свидетельствуют о наличии ковалентных связей между природным и синтетическим полимером. Прививка осуществляется под действием наночастиц – молекул алкилборана. За прививку ответственны два типа реакционных центров: радикальные и молекулярные. Первые представляют собой макрорадикалы, образующиеся за счет отрыва атома водорода от молекулы белка под действием радикалов – продуктов окисления алкилборана. Вторые формируются по реакции:



и являются агентами обратимого ингибирования [1]:



Дифференциальная ТГ-кривая сополимера желатина и полиметилметакрилата близка по своей структуре к ТГ-кривой желатина, но скачек потери массы происходит при более низкой температуре. Увеличение концентрации трибутилбора повышает термическую стабильность наноматериала по причине блокирования фрагментами алкилборана дефектных структур [2], традиционно образующихся при квадратичном обрыве цепи.

Высокая экологичность сополимеров в плане утилизации подтверждена биоразложением суспензией грибов ГОСТа 9.049-91.

Литература

- [1] Заремский М.Ю. *Кинетические особенности псевдоживой радикальной полимеризации в условиях обратимого ингибирования нитроксильными радикалами.* // Высокомолек. соед. С. **2015**, 57(1), с. 75–97.
- [2] Додонов В.А.; Гарусова Ж.В.; Старостина Т.И.; Чеснокова Н.Е. *Низкомолекулярный термостабильный полиметилметакрилат.* // Высокомолек. соед. Б. **2000**, 42(8), с. 1429-1432

Р-20

Структурные особенности образования сверхразветвленных полимеров из мономеров $AB_2 + B_3$ с различной и изменяющейся по ходу процесса реакционной способностью функциональных групп

Карпов С.В., Малков Г.В., Якуньков А.Г.

Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, РФ

E-mail: svkarpov@icp.ac.ru

Полимеры, характеризующиеся высокой разветвленностью структуры, привлекали большое внимание исследователей в последние несколько лет. Большинство таких полимеров получают посредством полиприсоединения мономеров типа AB_n . При использовании такого подхода не представляется возможным контролировать ни молекулярно-массовое распределение, ни структурные характеристики получаемых сверхразветвленных полимеров. Этот недостаток может быть нивелирован введением в полимеризационную систему полифункционального ядра типа B_f . Теоретический анализ процесса полиприсоединения смеси мономеров $AB_n + B_f$ позволит облегчить молекулярный дизайн и контроль над процессом формирования сверхразветвленных полимеров.

В рамках настоящей работы был рассмотрен сложный случай полиприсоединения мономеров $ABV' + V''_3$. В частности учитывалось, что группы V в мономере типа ABV' изначально обладают неравной реакционной способностью, которая может изменяться в процессе роста макромолекул (эффект замещения). Кроме того, учитывалось, что реакционная способность эквивалентных групп V в мономере типа V''_3 также может изменяться по ходу процесса за счет эффектов замещения «первого» и «второго рода». Таким образом, формирование сверхразветвленных полимеров может протекать в результате семи параллельно-последовательных реакций. На основании предложенного топологического механизма формирования полимеров было получено бесконечное кинетическое уравнение, для решения которого использован метод производящих функций.

В результате анализа полученных результатов было показано:

1. Индекс полидисперсности и степень разветвления полимеров симбатно увеличиваются с ростом эффекта замещения при полиприсоединении мономеров типа ABV' .
2. При полиприсоединении смеси $ABV' + V''_3$ конверсия мономера типа V_3 слабо зависит от его мольной доли в смеси (до 0,1) и определяется лишь различиями в реакционной способности групп V в мономерах типа ABV' и V''_3 .
3. Степень разветвления исследуемых полимеров зависит только от различий в реакционной способности групп V в мономере типа ABV' и мольной доли мономера типа V''_3 . При этом с ростом доли мономера типа V''_3 степень разветвления снижается.
4. Вне зависимости от различий в реакционной способности функциональных групп мономеров $ABV' + V''_3$ степень разветвления получаемых полимеров определяется мольной долей мономера V''_3 .
5. Найдены условия получения сверхразветвленных полимеров с повышенной степенью разветвления (от 0,5 до 1) и низким индексом полидисперсности.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-29-01076.

Сверхразветвленные триазолсодержащие полимеры на основе изофорондиизоцианата

Карпов С.В., Малков Г.В., Перепелицина Е.О.

Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, РФ

E-mail: svkarpov@icp.ac.ru

Нами была разработана методология синтеза новых сверхразветвленных поли(уретан-триазолов) на основе коммерчески доступных соединений. Схема получения таких макромолекулярных нанобъектов состоит из трех стадий. На первой стадии осуществляется синтез диазидоуретанизоцианатного прекурсора по реакции 1,3-диазидопропанола-2 (ДАПОЛ) с изофорондиизоцианатом (ИФДИ). Вторая стадия предполагает синтез мономера типа AB_2 , содержащего в своем составе одну ацетиленовую (А) и две азидных (В) группы, по реакции прекурсора с 2-пропинолом-1. Третья стадия – синтез сверхразветвленных поли(уретан-стриазолов) по реакции азидо-алкинового циклоприсоединения мономера типа AB_2 .

Известно [1], что различия в реакционной способности NCO-групп ИФДИ с ДАПОЛ в определенных условиях могут достигать 40. Учитывая этот факт нами получена теоретическая зависимость состава продуктов реакции ИФДИ с ДАПОЛ от соотношения реагирующих групп, которая была подтверждена экспериментально с использованием обращено-фазовой хроматографии. Установлено, что в зависимости от условий синтеза прекурсора на второй стадии синтеза кроме мономера типа AB_2 могут образовываться мономеры типа A_2 и B_4 , наличие которых существенным образом скажется как на топологическом механизме формирования макромолекулярных нанобъектов, так и на их молекулярно-массовых характеристиках.

Состав и структура смесей азидо-ацетиленовых мономеров, а также свехразветвленных поли(уретан-триазолов) подтверждены с использованием методов ИК- и 1H -ЯМР-спектроскопии.

Полученные макромолекулярные нанобъекты были охарактеризованы методами эксклюзионной жидкостной хроматографии, вискозиметрии, динамического светорассеяния, дифференциальной сканирующей калориметрии.

Проведены исследования кинетики реакции полиприсоединения смесей азидо-ацетиленовых мономеров в неизотермических условиях. С использованием изоконверсионных методов была определена энергия активации реакции азидо-алкинового циклоприсоединения, значение которой составляет 78.8 ± 0.1 кДж/моль. По результатам анализа теоретических и экспериментальных $z(\alpha)$ -мастер-кривых установлено, что исследуемая реакция протекает в соответствии с кинетическими закономерностями первого порядка, а не второго, характерного для реакции в растворе. С использованием $u(\alpha)$ -мастер-кривых был определен предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса значение которого составляет $149 \cdot 10^6 \pm 0.3 \cdot 10^6$. Таким образом, определены все параметры «кинетического триплета» полиприсоединения смесей азидо-ацетиленовых мономеров, протекающего в отсутствие растворителя.

Литература

[1] Карпов С.В., Лодыгина В.П., Комратова В.В., Джалмуханова А.С., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р. *Кинетика и катализ*. **2016**, 57(3), 319

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-29-01076.

Исследование процессов формирования макромолекулярных нанообъектов при полиприсоединении смесей мономеров $AB_2+A_2+B_4$

Карпов С.В., Малков Г.В., Якуньков А.Г.

Институт проблем химической физики Российской академии наук, Черноголовка, РФ

E-mail: svkarпов@icp.ac.ru

Полимеры, характеризующиеся высокой разветвленностью структуры, привлекают большое внимание исследователей в последние несколько десятилетий. Повышенный интерес к разветвленным полимерам обусловлен наличием у них ряда отличающих их от линейных и сшитых аналогов уникальных свойств: высокая растворимость и термодинамическая совместимость, низкая вязкость растворов и расплавов. Такие полимеры относят к классу макромолекулярных нанообъектов.

Одним из наиболее распространенных способов получения данных таких полимеров является трехмерная ступенчатая полимеризация мономеров типа AB_2 . Этот метод имеет ряд неоспоримых преимуществ, но в то же время он подразумевает сложный и многостадийный синтез мономера. Побочными продуктами, которые обуславливают сложные стадии очистки, зачастую являются мономеры типа A_2 и B_4 , совместной полимеризацией которых так же могут быть получены макромолекулярные нанообъекты. Таким образом, если рассматривать в качестве полимеризационной системы не индивидуальный мономер типа AB_2 , а смесь $A_2+AB_2+B_4$, то можно избежать сложного многостадийного синтеза и проводить процесс в одну стадию.

При ступенчатой полимеризации смеси мономеров $A_2+AB_2+B_4$ может протекать образование трехмерной пространственной сетки. В связи с этим, возникает необходимость, определения условий синтеза макромолекулярных нанообъектов, в которых могут быть получены разветвленные полимеры, а не сшитые. Существующие на сегодняшний день статистические методы расчета, разработанные Флори, не позволяют прогнозировать критические условия: переход системы из растворимой в нерастворимую.

Для решения этой проблемы разработана кинетическая модель трехмерной ступенчатой полимеризации смеси мономеров $A_2+AB_2+B_4$, которая помимо предсказания критических условий, позволяет прогнозировать структурные и молекулярно-массовые характеристики получаемых продуктов. Адекватность предложенной модели была продемонстрирована на классических примерах, рассматриваемых в рамках статистических представлений о процессах образования трехмерной пространственной сетки при полиприсоединении мономеров A_2+B_4 .

С использованием модели были выявлены основные закономерности «свойство полимера» - «тип мономера и его содержание в смеси». Предложены оптимальные режимы проведения синтеза макромолекулярных нанообъектов при полиприсоединении смесей мономеров $A_2+AB_2+B_4$. Показано, что результаты расчета находятся в полном соответствии с экспериментальными данными.

Полученные данные о процессах формирования полимеров при полиприсоединении смесей мономеров $A_2+AB_2+B_4$ расширяют существующие и создают новые пути целенаправленного контролируемого синтеза макромолекулярных нанообъектов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 16-29-01076.

Дизайн и синтез комплексных соединений на основе бис- β -дикетонатов переходных металлов

Ким Э.Е.^{a,b}, Кононевич Ю.Н.^b, Корлюков А.А.^b, Володин А.Д.^b, Музафаров А.М.^b

^a *Российский Химико-Технологический Университет им. Д. И. Менделеева, Москва, РФ*

^b *Институт Элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова Российской Академии Наук, Москва, Россия*

E-mail: ela-kim@mail.ru

Разработка и синтез новых молекулярных ансамблей, включающих в себя ионы переходных металлов, вызывают значительный интерес у исследователей в настоящее время. Супрамолекулярные металлорганические соединения с заданной структурой и физико-химическими свойствами имеют потенциальное применение в электронике, процессах разделения, биологических системах, медицине, катализе, в качестве оптических устройств и в других сферах науки и техники [1].

Одними из перспективных соединений в рамках данного направления являются бис- β -дикетоны – эффективные лиганды для создания полиядерных металло-супрамолекулярных структур. Данные лиганды легко вступают в реакцию с ионами переходных металлов с образованием комплексных соединений, а также обладают такими важными свойствами, как контролируемый размер, высокая стабильность, гибкость [2]. Введение атома кремния в структуру лиганда позволяет осуществить его функционализацию в широких пределах. Перечисленные свойства делают бис- β -дикетоны идеальными строительными блоками в разработке металло-супрамолекулярных структур различной формы, например, металломакроциклов или геликатов. Интерес к последним обусловлен тем, что они обладают рядом ценных свойств, таких как фото-, каталитическая, магнитная или оптическая активность.

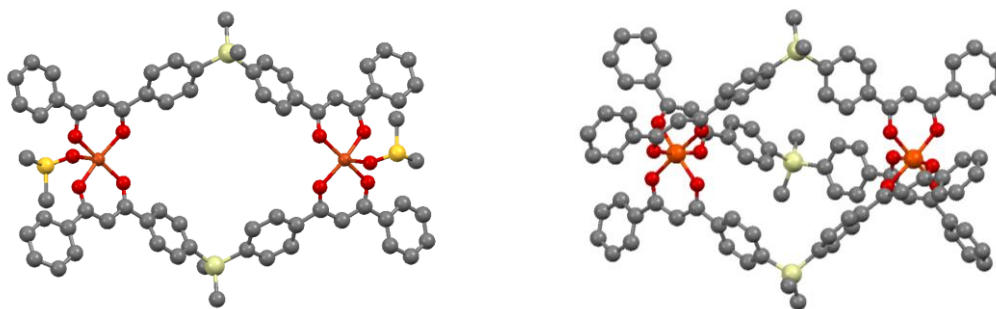


Рис. 1. Рентгеноструктурный анализ полученных комплексных соединений меди (справа) и железа (слева)

В данной работе был осуществлен синтез нового кремнийорганического бис- β -дикетонного лиганда и комплексных соединений переходных металлов на его основе. Строение полученных соединений подтверждено методами ^1H , ^{13}C , ^{29}Si ЯМР-спектроскопии, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии (ESI), элементным анализом и рентгеноструктурным анализом.

Литература

[1] Kelly N., Gloe K., Doert T., Hennersdorf F., Heine A. et al. *Journal of Organometallic Chemistry*. **2016**, 821, 182-191.

[2] Bray D., Clegg J., Lindoy L., Schilter D. *Advances in Inorganic Chemistry*. **2007**, 59, 1-37.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031

Наноразмерные структуры в аморфных стеклообразных полимерах, их связь с особенностями в терагерцовых спектрах

Китай М.С.^a, Назаров М.М.^b

^a ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

^b НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: mkitai@mail.ru

В твердых телах, в том числе в аморфных органических полимерах, типичные расстояния между ковалентно связанными атомами – составляют доли нанометров. (Так характерная длина С-С связи около 0.14 нм.) Однако, в аморфных полимерах - это не единственные размеры, характеризующие полимерные звенья. В 20-ом веке, методами рентгеноструктурного анализа (РСА), было показано, что для таких материалов на рентгенограммах отображаются структуры с типичными размерами **d**, существенно большими межатомных расстояний. Они одновременно много меньше длины статистического сегмента Куна для полимеров, но, как показывают эксперименты (см., например, [1]) структуры, с размерами порядка **d**, несколько меньше размеров одного полимерного звена.

Частоты в диапазоне $\nu \in 0.1 \div 10$ ТГц, находящиеся между **миллиметровым** и **дальним ИК** диапазонами, соответствуют длинам волн $\lambda \in 3 \div 0.03$ мм. Эти частоты принято относить к терагерцовому (ТГц) диапазону [2]. Большое число результатов экспериментов по измерениям ТГц спектров различных полимеров приведено в [3]. О связи частоты максимумов в полимерных спектрах поглощения ТГц диапазона (ν_{\max}) и характерных размеров структур **d**, говорится в работе [4], опирающуюся на соотношение между **d** и ν_{\max} (см. [5]).

$$\mathbf{d} \approx C_T / \nu_{\max} \quad (1),$$

здесь C_T – скорость поперечных звуковых волн в полимере, для которых поляризация и направление распространения волны перпендикулярны друг другу. По своей природе ν_{\max} это индивидуальные **либрационные** колебания части звена макромолекулы. Отметим, что максимумы проявляются только для температур **T**, где $T \leq T_G$, (**T** - температура выше температуры стеклования **T_G** примерно на 20% по шкале Кельвина [6]).

Т.о. в ТГц диапазоне проявляются **либрационные** колебания характерные для каждого аморфного полимера.

Работа была выполнена при поддержке министерства науки РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ «кристаллография и фотоника» РАН (соглашение № 007-ГЗ/Ч3353/26) в части получения образцов полимеров и гранта РФФИ 16-29-05407-офи-м.

Литература

- [1] Лебедев В.П. *Успехи химии*, **1978**, 47(1), 69; [2] Otter W.J., Lucyszun S. *Proceedings IEEE*, **2017**, 105(4), 756; [3] Parrot E.P.J. *Applied Spectroscopy*, **2015**, 69(1), 1; [4] Китай М.С., Назаров М.М. и др. *Известия ВУЗов «Радиофизика»*, **2014**, LVII(12), 984; [5] Рыжов В.А. *Физика твердого тела*, **2002**, 44(12), 2229; [6] Рыжов В.А., Берштейн В.А. *Физика твердого тела*, **2008**, 50(10), 1901.

Радиационно-химический метод синтеза биметаллических наночастиц в полимерных матрицах и покрытиях

Климов Д.И.^a, Зезин А.А.^a, Чвалун С.Н.^a, Абрамчук С.С.^b, Зезина Е.А.^b

^aИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

^bМГУ им. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

E-mail: Klimowww@hotmail.com

$\text{Cu}_{\text{shell}}/\text{Ag}_{\text{core}}$ и $\text{Cu}_{\text{shell}}/\text{Au}_{\text{core}}$ биметаллические наночастицы были получены *in situ* в пленках интерполиэлектролитных (ИПЕК) комплексов содержащих одновременно ионы Ag (или Au) и Cu облучением на рентгеновской установке и ускорителе электронов. HRTEM данные демонстрируют структуру частиц типа ядро-оболочка. РСА-анализ показывает, что на начальных этапах облучение приводит к формированию ядер (Ag или Au), дальнейшее увеличение дозы обеспечивает образование и рост медной оболочки. Использование XANES и EXAFS позволило установить, что начальная стадия формирования медных оболочек проходит через формирование промежуточных структур Cu_2O и CuO . На размеры биметаллических наночастиц и соотношение ядро-оболочка влияют доза облучения и начальная концентрация металлических ионов в ИПЕК. Таким образом, было продемонстрировано, что радиационно-химическое восстановление металлических ионов в матрицах ИПЕК может быть использовано для одностадийного получения нанокompозитных пленок, содержащих биметаллические наночастицы с контролируемым соотношением ядро-оболочка [1].

Описанный подход был использован для модификации текстильных материалов, послойным нанесением (LbL) ИПЕК покрытий и последующим восстановлением ионов Ag и Cu внутри LbL матриц. Полученные материалы обладают стабильными антибактериальными свойствами, сохраняющимися после 5-кратной стирки.

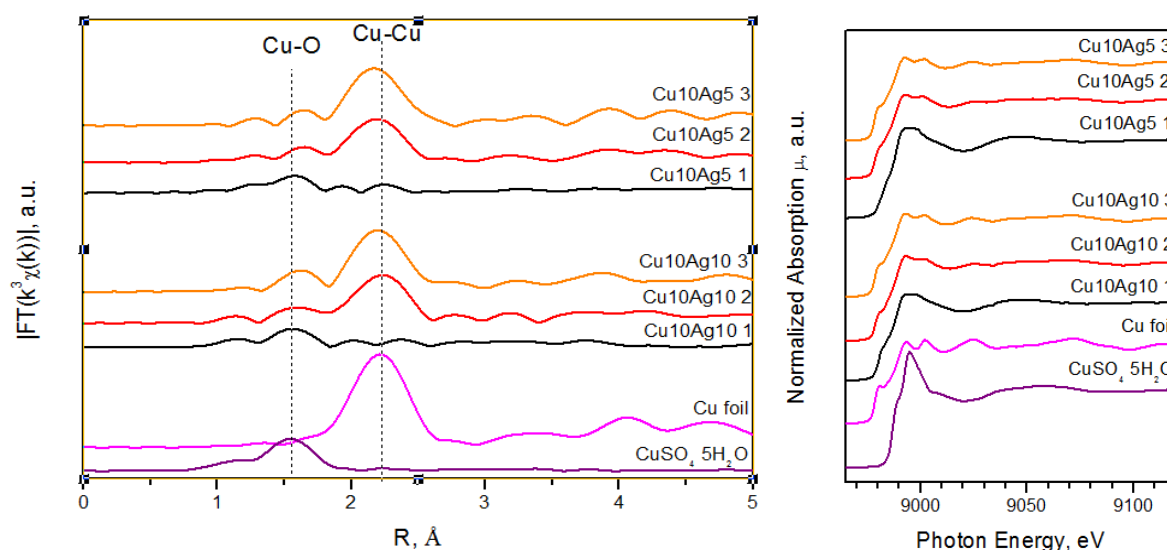


Рис. 1. XANES и EXAFS спектры облученных образцов содержащих 5%Ag10%Cu и 10%Ag10%Cu вес.

Литература

[1] D.I. Klimov et al. Radiation Physics and Chemistry 142 (2018) 65–69 dx.doi.org/10.1016/j.radphyschem.2017.02.034

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-33-01155

Computer modeling of microfiber formation in flowing binary blend of incompatible fluids

I.V. Kravchenko^a, S.A. Patlazhan^{a, b}

^a*Institute of Problems of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

^b*Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: krav@ficp.ac.ru

Computer modeling was applied to study regularities of droplets deformation behavior in two-phase blend of incompatible viscous fluids flowing in 3D rectangular microchannel with the variable cross section (Fig. 1). The velocity gradient profiles in the transition regions from the wide chamber to the narrow gap were calculated at different Reynolds numbers and aspect ratios of the microchannel (see also [1]). The elongation peculiarities of a single viscous droplet within different zones of the microchannel were analyzed. It was found that the most effective stretching of a droplet becomes apparent at the entrance to a narrow channel zone. The calculations were carried out for different values of confinement parameter n – the ratio of droplet diameter to the gap thickness. The increase in the confinement parameter was shown to result in substantial increase in droplet elongation degree. In this case, the capillary stability of the expanded droplets enhances.

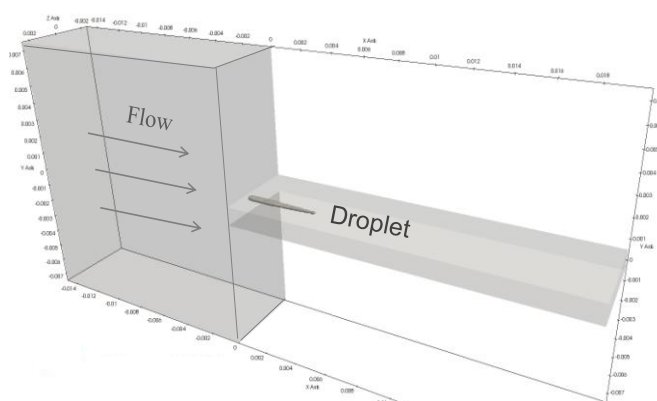


Fig. 1. Snapshot of the elongated droplet ($n = 0.8$, $m = 4.88$, $Re \ll 1$).

The influence of hydrodynamic screening due to the neighboring droplets on the droplet deformation behavior was considered. Toward this end, computer modeling of the droplet hydrodynamic behavior was carried out at different concentrations of the dispersed phase. The effect of droplets coalescence on formation of microfibers in the narrow part of the channel was investigated at various confinement parameters n , droplet viscosity ratios m , and Reynolds numbers Re .

References

[1] Kravchenko, I.V.; Patlazhan, S.A.; Muller, R.; Sultanov, V.G. *J. Phys.: Conf. Ser.* **2016**, *774*, 012026.

This work was partly supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant18-53-15013). The numerical modeling was carried out using the computing resources of Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Science.

Рентгенографическое исследование образцов поли(1-триметилсилил-1-пропина) в области широких углов дифракции

Левин И.С.^a, Матсон С.М.^a, Хотимский В.С.^a

^a *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

E-mail: levin@ips.ac.ru

Методом широкоугольной рентгеновской дифракции исследовались образцы поли(1-триметилсилил-1-пропина) (ПТМСП), полученные с помощью каталитических систем на основе NbBr_5 . Образцы в зависимости от геометрической структуры (содержания цис- и транс-звеньев) обладали разной растворимостью в органических растворителях.

Дифрактограммы образцов полимерных образцов были получены на рентгеновском дифрактометре Rigaku Rotaflex RU-200 с вращающимся медным анодом. Съёмка велась по схеме Брэгга-Брентано в режиме «на отражение» в диапазоне углов дифракции 2.5-50 градусов по 2θ . Затем полученные дифрактограммы обрабатывались с помощью программы Fityk: после вычитания фоновой линии они представлялись в виде суммы нескольких гауссовских пиков. По площадям пиков вычислялись удельные интенсивности максимумов.

На дифрактограммах всех образцов полимеров ПТМСП, полученных на каталитической системе NbBr_5 , наблюдался одинаковый набор из шести дифракционных максимумов, из которых наиболее отчетливыми были три: основной с угловым положением ~ 10 градусов, а также меньшие по интенсивности пики с положением ~ 20 и ~ 27 градусов, причем соотношение их площадей относительно друг друга менялось (см. рис. 1).

По мере увеличения содержания цис-звеньев в образцах ПТМСП отмечается рост упорядоченности (межцепное расстояние, соответствующее основному максимуму, уменьшается с 0.90 до 0.88 нм). Увеличение интегральной интенсивности (площади) основного рентгеновского максимума также указывает на рост упорядоченности.

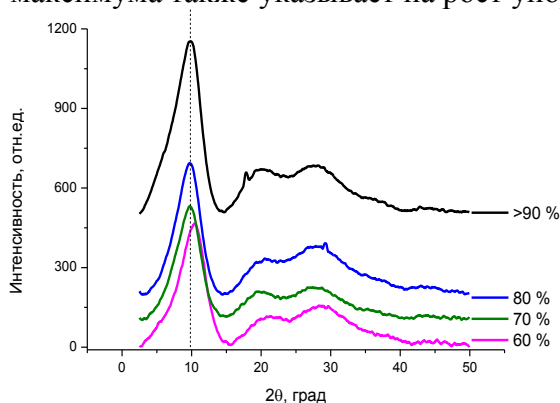


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы для образцов ПТМСП с различным содержанием цис-звеньев.

Показано, что предложенная методика широкоугольного рентгендифракционного исследования позволяет исследовать надмолекулярные различия в структуре полимерных материалов, которые определяют их растворимость в различных углеводородах.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №18-13-00334).

Комбинированные режимы диффузии в гетерогенных средах

Лихоманова П.А.^{a,b}, Калашников И.Ю.^a, Кудрявцев Е.М.^a

^a *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

E-mail: likhomanovapa@gmail.com

Ранее в работах [1,2] было показано, что ускоренный транспорт газов может наблюдаться в системах типа полимер-углеродные нанотрубки (УНТ). Для последовательного построения модели, описывающей этот эффект, необходимо учесть следующие факторы: гетерогенность среды, механизмы перемещения в каждой из фаз этой среды и времена, на которых происходит наблюдение. Ранее было показано, что такой подход можно реализовать методом Монте-Карло с помощью модели STRW (модель случайных блужданий в непрерывном времени). Транспорт точечной частицы в разупорядоченной двумерной среде (полимер) с ускоряющими ловушками (УНТ) был изучен для случая диффузионно-баллистического режима. Полученные таким образом распределения прыжков частицы принадлежат классу устойчивых распределений, что соответствует режиму аномальной диффузии. Кроме того, было показано, что характеристический показатель полученного устойчивого распределения зависит от плотности УНТ-ловушек, а также от скорости частицы в ловушке.

Поскольку постановка аналогичной задачи в одномерном случае допускает точное аналитическое решение, мы используем его для качественного сравнения и верификации результатов моделирования. Было получено соответствующее уравнение Фоккера-Планка, найдено распределение плотности вероятности обнаружения частицы и вычислено распределение по смещениям частицы при условии, что скорость движения частицы в УНТ-ловушке много больше характерной скорости диффузии.

Таким образом был выявлен один из возможных механизмов перемещения частицы в УНТ-ловушках, приводящий к аномальному режиму переноса. Такой вывод качественно согласуется с результатами аналитических расчетов в одномерном случае.

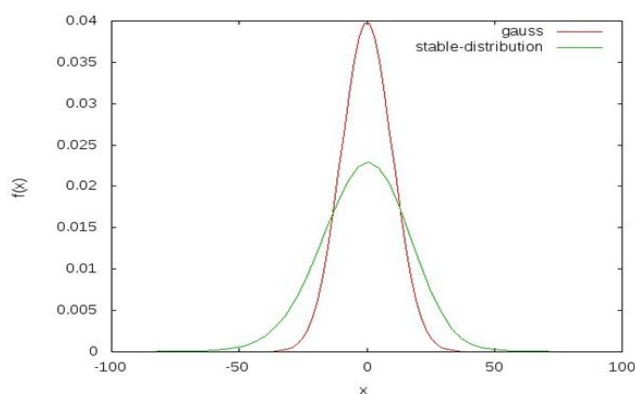


Рис. 1. Распределения по смещениям частицы для случая обычной и аномальной диффузии

Литература

- [1] Kim S. High Permeability / High Diffusivity Mixed Matrix Membranes For Gas Separations **2007**.
 [2] Kim S., Chen L., Johnson J. K., Marand E. *Journal of Membrane Science*. 2007, 294, 147-158.

Исследование ориентационных эффектов в упорядоченных волоконных полимерных материалах, полученных методом электроспиннинга

Луканина К.И.^а, Ребров И.Е.^б, Григорьев Т.Е.^а, Крашенинников С.В.^а, Бузин А.И.^а,
Бакиров А.В.^а, Чвалун С.Н.^а

^а НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

^б Институт электрофизики и электроэнергетики РАН, Москва, Россия

E-mail: Lukanina_KI@nrcki.ru

Для решения задачи высокоупорядоченной разноразмерной укладки волокон методом нестабилизированного электроспиннинга предложено использовать методику на основе управления электрогидродинамической струей посредством изменения конфигурации напряженности электрического поля. Метод заключается в независимой подаче на приемные электроды напряжения прямоугольной формы заданной амплитуды (десятки киловольт) и длительности посредством серии полностью управляемых высоковольтных твердотельных коммутаторов с наносекундными временами переключения, соединенных с единой системой управления. В процессе изменения напряжения электрогидродинамическая струя полимерного раствора под действием электростатических сил следует за изменяющимся полем, управляемо сменяя осаждающий электрод. В промежутке между коллекторами формируется упорядоченный нетканый материал с заданной послойной ориентацией волокон. Предлагаемый подход позволяет достичь высокой вариативности технологических решений. В данной работе получена серия образцов полимерных материалов на основе сополимера полиамида 6/66 с упорядоченной ориентированной волоконной структурой. С помощью электронной сканирующей и оптической микроскопии Helios NanoLab 450S и Carl Zeiss Axio получены микрофотографии упорядоченных материалов с послойной ориентацией 0, 45 и 90°. Методом ДСК исследовали релаксационные и фазовые переходы, происходящие в сополимере при нагревании. Установлено, что в разработанном процессе электроспиннинга высокоориентированных материалов происходит довытяжка волокон в промежутке между активным/неактивным электродом. Это приводит к повышению упорядоченности полимерных клубков и формированию более прочной структуры волокон. Механические испытания на одноосное растяжение анизотропных образцов проведены на универсальной разрывной машине Instron 5965. Материалы, испытанные вдоль ориентации волокон полиамида 6/66, существенно превосходят по прочности и модулю упругости как испытанные в направлении перпендикулярном предполагаемой ориентации волокон, так и не ориентированные образцы. Для исследования структурных свойств образцов ПА6/66 был применен метод рентгеноструктурного анализа в больших и малых углах. Наблюдается отчетливый максимум на азимутальных сканах по выделенной дуге в больших углах, что свидетельствует о наличии упорядочения кристаллитов вдоль оси волокон. Рентгеноструктурный анализ в малых углах показал наличие малоуглового экваториального рефлекса, соответствующего большому периоду 14,3 нм. Таким образом, управление полимерной струей в процессе электроспиннинга расширяет возможности получения волоконных материалов с заданной архитектурой и уникальными физико-химическими характеристиками.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ №17-79-10470 и с использованием оборудования Ресурсных центров НИЦ «Курчатовский институт».

Исследование теплофизических свойств и фазового поведения гибридных дендримеров с различной жесткостью ядра и оболочки

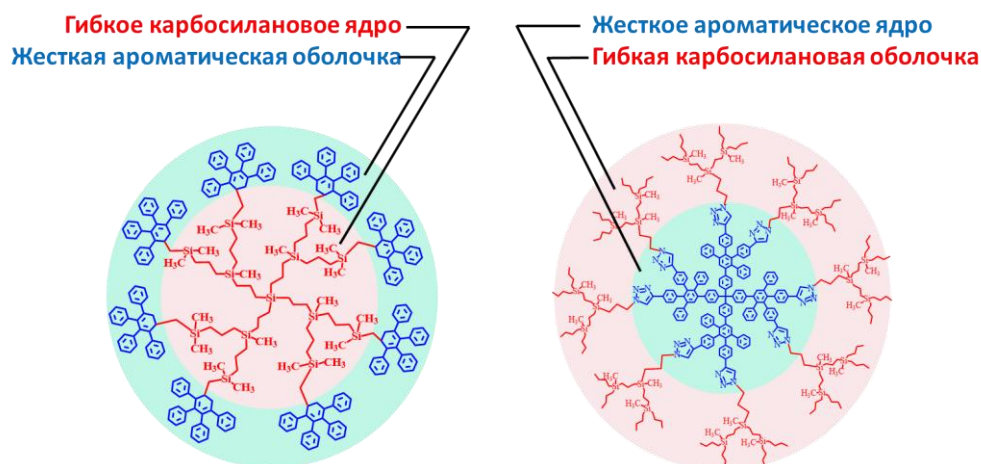
Миленин С.А.^a, Серкова Е.С.^b, Селезнева Е.В.^a, Краснова И.Ю.^b, Бузин М.И.^b,
Корлюков А.А.^b, Черкаев Г.В.^a, Шифрина З.Б.^b, Музафаров А.М.^b

^a *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия*

^b *Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия*

E-mail: SerHe@mail.ru

Гибридные дендримеры (ГД), состоящие из гибкого карбосиланового ядра и жесткой ароматической оболочки, впервые были получены по реакции Дильса-Альдера взаимодействием предварительно синтезированных карбосилановых дендримеров и ароматических циклопентадиенонов для выяснения взаимосвязи между структурой дендримера и его термическим и фазовым поведением [1]. Было обнаружено, что термическое поведение ГД значительно отличается как от полностью жестких фениленовых дендримеров, так и гибких карбосилановых дендримеров. Наличие жестких блоков в качестве периферийного слоя в карбосилановых дендримерах приводит к значительному повышению температуры стеклования, что свидетельствует о повышенной жесткости всего дендримера.



Чтобы получить более глубокое понимание взаимосвязи структуры и свойств ГД, были получены дендримеры с жестким ядром и гибкой оболочкой по конвергентной схеме, с использованием карбосилановых монодендронов различных генераций. Мы полагаем, что разработанные подходы позволят осуществлять контролируемые синтезы дендритных структур с желаемой морфологией и термофизическими свойствами.

Литература

[1] Elena S. Serkova, Irina Yu. Krasnova, Sergey A. Milenin, et al.,s Polymer, Volume 138, 28 February 2018, Pages 83-91.

Проект выполнен при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-29-04037 мк

**Кремнеземные наногели V-типа с нонильными
и триэтиленоксидными группами в оболочке: самоорганизация
на границе раздела вода–воздух и в растворах**

Малахова Ю.Н.^{a,b}, Бузин А.И.^c, Бакиров А.В.^{b,c}, Малахов С.Н.^b, Стрельцов Д.Р.^{b,c},
Горбачевич О.Б.^c, Казакова В.В.^c, Музафаров А.М.^{c,d}

^a РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

^b НИЦ «Курчатовский институт», КК НБИКС-пт, Москва, Россия

^c ИСПМ РАН, Москва, Россия

^d ИНЭОС РАН, Москва, Россия

E-mail: j.malakhova@mail.ru

Самоорганизация гибридных систем типа «ядро–оболочка», к которым относятся коллоидные и неорганические наночастицы, функционализированные органическими молекулами, приводит к образованию новых систем, коллоидосом [1–3]. Результат самоорганизации амфифильных нанобъектов зависит не столько от строения ядра, сколько от природы и строения внешнего слоя. Возможно как разделение гидрофильной и гидрофобной половин оболочек, как в «янус-частицах», так и однородное строение оболочки, при котором гидрофильные и гидрофобные группы равномерно распределены в оболочке. В этом случае группы двух типов имеют одну точку прививки на поверхности наночастицы и строгое молярное соотношение 1:1, это наночастицы с привитыми группами различной гидрофильности V- и Y-типа [4–5].

В данной работе были выделены и охарактеризованы две фракции кремнеземных наногелей V-типа, полученные в результате гидролитической поликонденсации тетраэтоксисилана в среде уксусной кислоты с последующей модификацией прививкой синтезированного впервые функционального силана с нонильной и триэтиленоксидной группами. Причем, концевые группы триэтиленоксида были или триметилсилильными, или гидроксильными. Было обнаружено, что увеличение молекулярной массы наногеля снижает стабильность ленгмюровских слоев перед их коллапсом, а также приводит к появлению воспроизводимости изотерм поверхностного давления в последовательных циклах сжатия-расширения, видимо, вследствие увеличения степени упорядочения ядра. Были определены критические концентрации агрегации в системах растворитель–осадитель, а также размеры частиц и агрегатов в растворах и в тонких пленках.

Литература

- [1] Bhattacharjee J., Aswal V.K., Hassan P.A., Pamu R., Narayanan J., Bellare J. *Soft Matter*. **2012**, 8, 10130.
- [2] Thompson K.L., Williams M., Armes S.P. J. *Colloid Interface Sci.* **2015**, 447, 217.
- [3] Fothergill J., Li M., Davis S.A., Cunningham J.A., Mann S. *Langmuir*. **2014**, 30(48), 14591.
- [4] Zubarev E.R., Xu J., Sayyad A., Gibson J.D. *J. Am. Chem. Soc.* **2006**, 128, 4958.
- [5] Jiang X.M., Zhong G.J., Horton J.M., Jin N.X., Zhu L., Zhao B. *Macromolecules*. **2010**, 43, 5387.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты № 15-03-07718 а, № 16-33-60194 мол_а_дк). Работа частично выполнена с использованием оборудования ресурсных центров (ОГМ) НИЦ «Курчатовский институт».

Влияние природы растворителя на стабильность комплекса тетраанилина с камфорсульфоновой кислотой и способность к формированию ленгмюровских монослоев

Малахова Ю.Н.^{a,b}, Щербань В.В.^a, Коровин А.Н.^a, Малахов С.Н.^a, Чвалун С.Н.^{a-c}

^a НИЦ «Курчатовский институт», КК НБИКС-пт, Москва, Россия

^b РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

^c ИСПМ РАН, Москва, Россия

E-mail: j.malakhova@mail.ru

В органической электронике перспективно использовать проводящие полимерные и олигомерные материалы. В отличие от других органических полупроводников, полианилин и его олигомеры в форме эмеральдинового основания можно протонировать с образованием проводящей эмеральдиновой соли [1]. Тетрамер анилина с фенильными концевыми группами (тетраанилин) имеет наименьшее количество изомеров и является самым коротким олигомером, содержащим в протонированной форме эмеральдиновой соли полярон [1, 2].

В данной работе была изучена стабильность эмеральдинового основания тетраанилина и его эмеральдиновой соли в комплексе с камфорсульфоновой кислотой (КСК) в различных системах растворителей, а также структурообразование в ленгмюровских монослоях на субфазах различной природы.

В качестве растворителей эмеральдиновых соли и основания тетраанилина были использованы N-метилпирролидон (НМП), хлороформ, этанол, диметилсульфоксид (ДМСО), смеси этанола с толуолом и ДМСО с толуолом. Согласно электронным спектрам поглощения, растворы эмеральдиновой соли тетраанилина в НМП и смесях этанола или ДМСО с толуолом стабильны во времени. Из растворов в смесях ДМСО:толуол (1:1) и этанол:толуол (9:1) впервые были сформированы и исследованы ленгмюровские монослои тетраанилина, протонированного КСК, на поверхности водного раствора КСК, стабильные при сжатии до 19 мН/м.

Тонкие пленки комплекса тетраанилина с КСК были получены методом Ленгмюра-Шефера, усредненная толщина одного слоя составила 0,15 нм, а удельная проводимость – $6,2 \cdot 10^{-2}$ См/см. Получение тонкопленочных материалов из эмеральдиновой соли тетраанилина перспективно для создания электронных устройств.

Литература

[1] Lin C.W., Li R.L., Robbenolt S., Yeung M.T., Akopov G., Kaner R.B. *Macromolecules*, **2017**, 50(15), 5892.

[2] Wei Z., Faul C.F.J. *Macromolecular Rapid Communications*, **2008**, 29, 280.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-2757.2017.3. Работа частично выполнена с использованием оборудования ресурсных центров (ОГМ, ОМС) НИЦ «Курчатовский институт».

Synthesis of Magnetic Vitrimer Nanocomposites

A. I. Barabanova^{a,b}, V. S. Molchanov^a, O. E. Philippova^a, A. R. Khokhlov^c

^a Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

^b A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

^c Ulm University, Ulm, Germany

E-mail: barabanova@polly.phys.msu.ru

Smart magnetic polymer nanocomposites with tunable elastomeric epoxy matrix (magnetic vitrimer nanocomposites) were created by curing of diglycidyl ether of bisphenol A (DGEBA) with a mixture of dicarboxylic and tricarboxylic fatty acids (Pripol 1040) in the presence of zinc acetate ($Zn(ac)_2$) as a transesterification catalyst and magnetic nanoparticles (MNPs) as a filler.

An introduction of MNPs into epoxy matrices imparts them the ability of responding to applied magnetic field. The rearrangement of MNPs under the magnetic field action can be used for self-healing and welding of the material without mechanical compression. At heating MNPs can be directed to the crack, dragging the polymer chains attached to them and thus filling the crack. Lowering the temperature below the topology freezing transition temperature fixes the "healed" crack. For such applications, the concentration of $Zn(ac)_2$ and MNPs as well as the particles characteristics, such as the size and the surface chemistry, must be optimized.

In this study, the MNPs with diameters from 5 to 300 nm, containing hydroxyl, phenyl and anhydride functional groups, providing non-covalent (hydrogen bonding, Van-der-vaals interaction) and covalent bonds with epoxy network were used. The grafting of functional groups on MNPs surface was carried out by the interaction of the surface -OH groups (in alkaline medium) with modifiers containing the reactive alkoxy groups at Si atoms: tetramethyl orthosilicate, phenyltriethoxysilane and 3-(triethoxysilyl)propylsuccinic anhydride.

By changing the content of $Zn(ac)_2$ (1 – 5 %), we tuned the transesterification reaction rate in order to control the welding and healing of the nanocomposites.

It was established that the nanocomposites with 5-nm anhydride-modified MNPs demonstrated the highest efficiency of self-healing and welding under magnetic field application.

This work was supported by Russian Foundation of Basic Research (project №18-53-76007).

Комплексы из Червеобразных Мицелл Анионного Поверхностно-Активного Вещества и Гидрофобного Полимера

Квятковский А.Л.^а, Молчанов В.С.^а, Филиппова О.Е.^а

^аМосковский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Физический факультет, Москва, Россия

E-mail: kvyatkovskij@physics.msu.ru

Червеобразные мицеллы поверхностно-активных веществ (ПАВ) – вытянутые агрегаты цилиндрической формы, образованные амфифильными молекулами ПАВ в водной среде. Молекулы ПАВ в мицеллах связаны слабыми нековалентными взаимодействиями, поэтому разрываются и рекомбинируют. Червеобразные мицеллы могут достигать нескольких микрометров в длину. Длинные червеобразные мицеллы переплетаются с образованием физической сетки зацеплений, которая придает полуразбавленным растворам мицелл вязкоупругие свойства.

В настоящее время в литературе широко изучаются комплексы, состоящие из червеобразных мицелл ПАВ с внедренными макромолекулами полимера. При добавлении в систему червеобразных мицелл анионного ПАВ макромолекул полиэлектролита с одноименным зарядом звеньев, единой сетки из полимера и мицелл не образовывалось [1]. Добавление амфифильного триблок сополимера в раствор катионного ПАВ приводило к образованию сетки из «волосатых» червеобразных мицелл, в которых гидрофобные блоки сополимера находились внутри мицелл, а гидрофильные находились в растворителе [2]. Влияние добавления макромолекул гидрофобного полимера на систему червеобразных мицелл ПАВ не изучалось.

В настоящей работе исследовались комплексы из червеобразных мицелл анионного ПАВ олеат калия и гидрофобного полимера поли(4-винилпиридин)а (П4ВП).

Методом УФ спектроскопии было показано образование совместного комплекса из молекул олеата калия и макромолекул П4ВП. Реологическим методом показано, что по мере насыщения комплексов полимером вязкоупругие свойства системы ухудшаются. Методом малоуглового рассеяния нейтронов с применением техники вариации контраста была изучена форма и структура червеобразных мицелл ПАВ, а также конформация и свойства полимера в составе комплекса. Структура агрегатов из полимера и ПАВ, насыщенных П4ВП, изучалась с помощью методов ЯМР-спектроскопии и статического рассеяния света. Визуализация комплексов проводилась методом крио-просвечивающей электронной микроскопии.

В работе впервые получены комплексы из червеобразных мицелл ПАВ и гидрофобного полимера. Исследованы ее реологические свойства, определена форма, размер и масса агрегатов в случае насыщения полимером. Изучена структура и свойства мицелл ПАВ и полимера в составе агрегатов.

[1] C. Flood; C. A. Dreiss; V. Croce; T. Cosgrove; G. Karlsson, *Langmuir*, **2005**, 21, 7646

[2] G. Massiera; L. Ramos; C. Ligoure, *Europhys. Lett.*, **2002**, 57, 127

Благодарность: исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00885

Влияние условий формирования на морфологию островковых пленок на начальных стадиях роста поли-пара-ксилиленовых покрытий

Несмелов А.А.^{1*}, Митько А.С.¹, Стрельцов Д.Р.^{1,2}, Дмитрияков П.В.¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва

² Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва

*E-mail: aanesmelov@gmail.com

Покрытия на основе поли-пара-ксилилена (ППК) и его производных обладают уникальным сочетанием высоких эксплуатационных свойств, что обуславливает их применение в различных областях науки и производства. Они используются как в качестве конструкционных материалов, так и защитных покрытий для изделий, работающих в условиях повышенной влажности, температуры, биологических, химических и других факторов. Наибольшее применение такие покрытия получили в электронике, электротехнике, биомедицине, а также в качестве консервационных и реставрационных материалов.

Основным методом синтеза ППК покрытий является метод осаждения из газовой фазы, который позволяет получать равномерные по толщине тонкие пленки, обладающие высокой чистотой. Начальная стадия формирования пленок ППК, в процессе которой образуется островковое покрытие, является определяющей для понимания механизмов роста пленок. Исследование формирования островкового покрытия позволяет установить взаимосвязь между условиями осаждения и конечной структурой и свойствами тонких пленок.

Для синтеза островковых покрытий ППК методом осаждения из газовой фазы сконструирована экспериментальная вакуумная установка, позволяющая регулировать параметры процесса осаждения, такие как температуры сублимации, пиролиза, осаждения. Отличительной особенностью данной установки является наличие специального затвора, который в процессе подготовки перекрывает поток мономера, что обеспечивает необходимую чистоту подложек и позволяет точно регулировать время осаждения ППК.

В качестве подложек были выбраны пластинки монокристаллического кремния и свежесколотой слюды. Методом осаждения из газовой фазы на данных подложках были получены серии образцов с температурой сублимации 90 и 110°C. Определено, что механизм роста на кремниевых подложках является островковым, а на подложках из слюды – послойным. Для исследования островкового механизма были получена серия образцов с температурой сублимации 70°C и температурой осаждения 23°C. Морфология данных образцов была исследована методом сканирующей зондовой микроскопии. Получены зависимости концентрации и среднего радиуса островков от степени заполнения поверхности, а также распределение островков по размеру для различных условий формирования покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-33-00600)

Комплексы поликатионов с кислотными остатками алифатических кислот

Повshedная М.Д., Зорин И.М., Фетин П.А., Билибин А.Ю.

СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: m.povshednaya@gmail.com

Комплексы, сформированные в результате ионного связывания противоположно заряженных синтетических полиэлектролитов, представляют интерес как для создания новых функциональных материалов, так и для изучения общих принципов самоорганизации материи, являясь моделью природных полиэлектролитных систем. Добиться самоорганизации линейных полиэлектролитов в растворе возможно путем реакции их с поверхностно-активными веществами (ПАВ), получая в результате полиэлектролит-коллоидные комплексы (ПЭКК), в которых молекулы ПАВ могут образовывать либо хаотично расположенные агрегаты, либо формировать ламеллярную, гексагональную или кубическую упаковку [1]. Целью данной работы является синтез и исследование структуры полиэлектролитных комплексов на основе поликатионов. В данной работе исследовались комплексы поли-11-акрилоилоксиундецилтриметил-аммоний бромида (ПАУТА-Br), полученные путем замещения бромид-аниона на анионы предельных линейных карбоновых и перфторированных кислот. В работе были использованы соли валериановой (C_5), капроновой (C_6), каприновой (C_{10}) и перфторвалериановой (CF_5) кислот в качестве противоположно заряженных ПАВ для ПАУТА-Br. Методом вискозиметрии было установлено, что изменение длины алкильного остатка незначительно влияет на вязкость, а присутствие перфторвалерианового аниона изменяло ход кривой вязкости, что может быть связано с изменением структуры внутри комплекса. Методами атомно-силовой микроскопии были обнаружены близкие по размеру (4-5 нм) червеобразные частицы и однородные пленки ПЭКК.

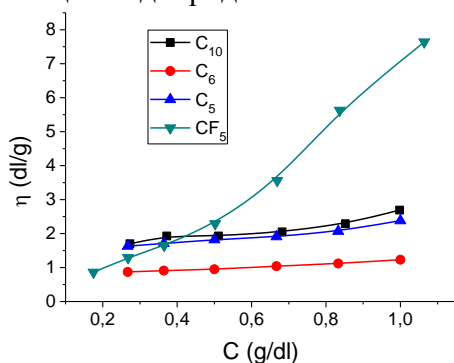


Схема 1. Вискозиметрические данные комплексов ПАУТА-Сп в 0,05 М растворе соли кислоты, соответствующей аниону ПЭКК.

Литература

[1] K. Kogej. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2010, v. 158, p. 68–83.

Авторы выражают благодарность ресурсным центрам СПбГУ: «Магнитно-резонансные методы исследования», «Рентгенодифракционные методы исследования». Работа выполнена при поддержке РФФИ грант № 18-33-00618 мол_а

Синтез Представителей Нового Класса Триазин-Триазольных Сверхразветвленных Полимеров: Полимеризация в Блоке

Петров А.О.^{a,b}, Малков Г.В.^a, Гавришова Т.Н.^{a,b}, Шастин А.В.^{a,b}

^a *Институт проблем химической физики, Черноголовка, Россия.*

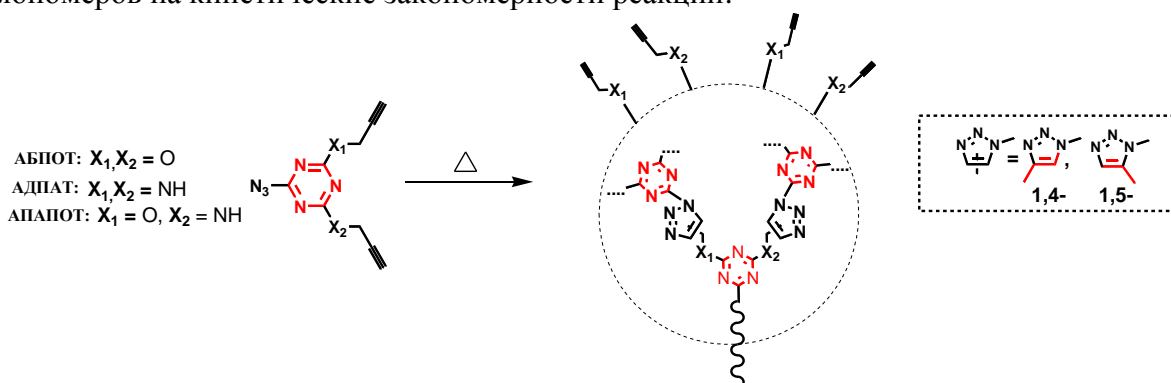
^b *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия.*

E-mail: artyom2212@yandex.ru

Сверхразветвленные полимеры (СРП, hyperbranched polymers) привлекают внимание ученых из разных областей химии, физики и материаловедения и активно изучаются. Благодаря своей структуре СРП обладают свойствами, сильно отличающимися их как от линейных, так и сшитых полимеров [1]. Наряду с этим известно, что полимеры, построенные на основе азотсодержащих гетероциклов, потенциально интересны для использования в качестве энергоемких или биологически активных соединений [2, 3]. Поэтому сверхразветвленные триазин-триазольные полимеры [4], объединяющие физико-химические свойства, обусловленные особенностями как химического строения (азольные/азиновые циклы), так и пространственной глобулярной структуры, представляют собой перспективный класс соединений с уникальными свойствами.

Существует несколько методологий синтеза данного класса полимеров: полиприсоединение в блоке и проведение медь катализируемой реакции в растворе (CuAAC). Первый способ аппаратно проще, не требует дальнейшего выделения продукта и очистки от катализатора, но для его безопасного использования следует тщательно подбирать температурный режим, не допуская перегрева реакционной смеси. Не вызывает сомнений, что для этого необходимо знание кинетических закономерностей процессов их синтеза в блоке, изучение которых и является целью данной работы.

Анализ кинетики полиприсоединения азидо-ацетиленовых мономеров типа АВ₂ (см. рис.) проводили с использованием изоконверсионных методов на основе данных неизотермической ДСК и ТМ ДСК. Показано влияние химической структуры мономеров на кинетические закономерности реакции.



Литература

[1] Zheng Y. et al. *Chemical Society Reviews*. **2015**, 44(12), 4091 – 4130.

[2] Ghule V. D.; Radhakrishnan S.; Jadhav P. M. *Struct. Chem.* **2011**, 22, 775.

[3] Ostrovskii V. A., Koldobskii G. I., Trifonov R. E. *Tetrazoles*. **2008**.

[4] Малков Г.В., Михайлов Ю.М. и др. *Структура и динамика молекулярных систем*. **2008**, 3(1), 146-149.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 16-29-01076 оф_и_м.

Синтез Представителей Нового Класса Триазин-Триазольных Сверхразветвленных Полимеров: Реакция CuAAC в Растворе

Петров А.О.^{a,b}, Малков Г.В.^b, Люденцан Н.А.^a, Цыганова А.В.^{a,b}, Карпов С.В.^b,
Гавришова Т.Н.^{a,b}, Шастин А.В.^{a,b}

^a Институт проблем химической физики, Черноголовка, Россия

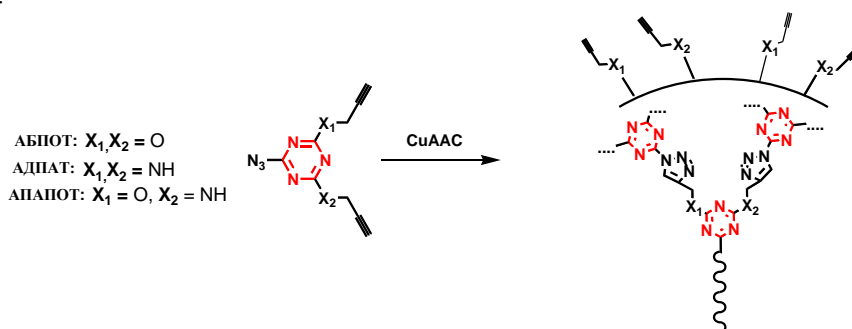
^b Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия.

E-mail: artyom2212@yandex.ru

Потенциально интересны свойства полимеров, содержащие азольные и азинные циклы [1]. Однако линейные триазолсодержащие полимеры практически нерастворимы, это делает невозможным процессы их получения и переработки. Решением этой проблемы является получение сверхразветвленных полимеров (СРП) – полимеров, со сложной глобулярной структурой, напоминающей строение дерева или коралла, имеющих более низкую вязкость растворов и расплавов, хорошую растворимость и другие свойства [2] отличающие их от линейных и слабоветвленных аналогов.

Для синтеза азотсодержащих СРП представляют особый интерес реакции каталитического циклоприсоединения азидов к алкинам в присутствии соединений меди (CuAAC) благодаря высоким выходам реакции, селективности, мягким условиям проведения [3, 4]. Именно на этой реакции основано получение нового перспективного класса триазин-триазольных СРП [5].

Поэтому целью данной работы является оптимизация методики каталитического синтеза триазин-триазольных СРП на основе ряда мономеров типа АВ₂. Для этого методом ИКС проводилось исследование кинетики полиприсоединения в условиях CuAAC при изменении условий: концентрация реагентов, катализатора, природа растворителя и реагента. Полученные продукты охарактеризованы методами ИКС, ЯМР и ДСК.



Литература

- [1] Кижняев В.Н., Голобокова Т.В. и др. *Химия гетероциклических соединений*. **2017**, 53(6/7), 682 – 692.
 [2] Zheng Y. et al. *Chemical Society Reviews*. **2015**, 44(12), 4091 – 4130.
 [3] Dijk, van M., Rijkers D.T., Liskamp R.M., Nostrum van C. F., Hennink W.E. *Bioconjugate Chem.* **2009**, 20, 2001 – 2016.
 [4] Rodionov V.O., Fokin V.V., Finn M.G. *Angew. Chem.* **2005**, 44, 2210 – 2215.
 [5] Малков Г.В., Михайлов Ю.М. и др. *Структура и динамика молекулярных систем*. **2008**, 3(1), 142-145.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта № 16-29-01076 оф_и_м.

P-39

Microfluidic-Assisted Elaboration of Polymeric Nanoparticles as Potential Carriers for Biomedical Applications

Shukai Ding¹, Wei Yu¹, Alireza Kavand^{1,2}, Mohamed F. Attia², Justine Wallyn², Christophe A. Serra^{1*}, Delphine Chan-Seng¹, Nicolas Anton², Thierry F. Vandamme²

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, CAMB UMR 7199, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

E-mail: mnpn@profcas.33mail.com

P-40

Enzymatically-Cleavable Branched Polymers Grafted on Upconverting Nanoparticles for Theranostics

Alireza Kavand^a, Christophe A. Serra^a, Nicolas Anton^b, Thierry Vandamme^b, Delphine Chan-Seng^a

^a *Université de Strasbourg, CNRS, Institut Charles Sadron, 67000 Strasbourg, France*

^b *Université de Strasbourg, CNRS, Laboratory of Design and Application of Bioactive Molecules, 67000 Strasbourg, France*

E-mail: delphine.chan-seng@ics-cnrs.unistra.fr

P-41

A Facile Method to Control the Growth of Upconversion Nanocrystals: A Focus on Heat Treatment

Alireza Kavand^{1,2}, Christophe A. Serra^{1*}, Delphine Chan-Seng^{1*}, Nicolas Anton², Thierry Vandamme², Frédéric Przybilla³

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, CAMB UMR 7199, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

³ *Université de Strasbourg, CNRS, LBP, UMR 7213, 74 Route du Rhin, F-67401 Illkirch, France*

E-mail: mnpn@profcas.33mail.com / delphine.chan-seng@ics-cnrs.unistra.fr

P-42

Layer By Layer Surface Treatment for the Formation of Double Emulsions in PDMS Microchips

Denis Funfschilling^{1*}, Benjamin Peter¹, Norbert Dumas¹, Christophe A. Serra²

¹ *Université de Strasbourg, CNRS, ICube UMR 7357, 2 rue Boussingault, F-67000 Strasbourg, France*

² *Université de Strasbourg, CNRS, ICS UPR 22, 23 rue du Loess, F-67034 Strasbourg, France*

E-mail: dfunfschilling@unistra.fr

Морфология мицелл на основе ПЛА/ПЭО блок-сополимеров различного состава и строения в разбавленных водных растворах

Разуваева Е.В.^{a,b}, Кулебякина А.И.^a, Стрельцов Д.Р.^{a,b}, Бакиров А.В.^{a,b}, Штыкова Э.В.^{c,d}, Чвалун С.Н.^{a,b}

^aНИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

^bИСПМ РАН, Москва, Россия

^cИХФ РАН, Москва, Россия

^dФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: razuvaeva.kate@gmail.com

В водном растворе амфифильные блок-сополимеры способны к самоорганизации в упорядоченные наноразмерные структуры различной морфологии: сферические, цилиндрические мицеллы, бислойные везикулы, ламели и др. Изменение строения, состава блок-сополимера, стереорегулярности гидрофобного блока позволяет получать структуры с заданной морфологией и свойствами.

В рамках работы были синтезированы четыре серии блок-сополимеров П(L)ЛА_x-б-ПЭО₁₁₃ (x=75-500), П(D,L)ЛА_y-б-ПЭО₁₁₃ (y=40-210), П(L)ЛА_m-б-ПЭО₉₁-б-П(L)ЛА_m (m=30-210) и П(D,L)ЛА_n-б-ПЭО₉₁-б-П(D,L)ЛА_n (n=15-60) путём полимеризации L- или D,L-лактида с раскрытием цикла в присутствии мПЭО или ПЭО, соответственно. Блок-сополимерные мицеллы были получены методом диализа. Установлено, что размер П(D,L)ЛА/ПЭО мицелл с аморфным П(D,L)ЛА ядром значительно увеличивается с ростом длины гидрофобного блока, тогда как размер мицелл на основе П(L)ЛА/ПЭО блок-сополимеров с кристаллическим П(L)ЛА ядром слабо зависит от его длины. Обнаружено, что во всех разбавленных мицеллярных растворах помимо индивидуальных мицелл присутствуют кластеры мицелл. Метод малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) продемонстрировал, что в мицеллярных растворах П(L)ЛА/ПЭО блок-сополимеров среднее расстояние между ядрами мицелл, включённых в кластер, уменьшается с ростом длины П(L)ЛА блока. Этот эффект объясняется изменением плотности ПЭО короны, а также конформации ПЭО цепей, и количественно оценивается с использованием концепции приведённой плотности привитых цепей. Методом силовой спектроскопии было подтверждено, что более вытянутая конформация ПЭО цепей наблюдается в случае блок-сополимеров с коротким П(L)ЛА блоком. Методами атомно-силовой микроскопии (АСМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) было обнаружено, что мицеллы на основе П(D,L)ЛА/ПЭО блок-сополимеров с аморфным П(D,L)ЛА блоком обладают сферической морфологией, тогда как П(L)ЛА/ПЭО мицеллы характеризуются небольшой анизотрией и при высаживании растворов на твёрдую подложку реорганизуются в протяжённые ленточные структуры, а затем в ромбовидные кристаллы с увеличением длины П(L)ЛА блока.

Установлено, что кристаллизация гидрофобного блока в значительной степени влияет на процесс самоорганизации блок-сополимеров, а также на структуру и свойства формируемых мицелл. Предложена схема строения индивидуальных ПЛА/ПЭО мицелл и кластеров мицелл в разбавленном водном растворе.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-03-00375) и РНФ (грант № 18-73-10079).

Амфифильные блок-сополимеры, синтезированные гетрофазной полимеризацией в присутствии полиакриловой кислоты с тритиокарбонатной группой

Серхачева Н.С.^a, Минеева К.О.^b, Смирнов А.В.^a, Черникова Е.В.^b, Прокопов Н.И.^a

^a МИРЭА - Российский технологический университет, Москва, РФ

^b Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, РФ

E-mail: natalia-serkhacheva@yandex.ru

Сегодня вопросу синтеза амфифильных блок-сополимеров, самоорганизующихся в процессе синтеза в наноразмерные частицы контролируемой морфологии, уделяется огромное внимание со стороны исследователей полимерной химии. Для этой цели используют гетерофазную радикальную полимеризацию с обратимой передачей цепи по механизму присоединения-фрагментации (ОПЦ-полимеризация). Применение в качестве ОПЦ-агента полимерных соединений позволит получать в одну стадию ди- и триблок-сополимеры, а также проводить такие процессы в отсутствие традиционных эмульгаторов, избавляя полученный продукт от стадии очистки от эмульгатора [1, 2]. Такие дисперсии самоорганизованных частиц могут найти широкое применение, например, в качестве наноконтейнеров для направленной доставки лекарств, для создания гибридных нанокомпозитов путем инкапсулирования неорганических наночастиц, для создания мембран с перколирующей системой гидрофильных каналов и др.

В качестве объектов исследования в работе были выбраны: мономеры – н-бутилакрилат (н-БА), стирол (Ст), N-изопропилакриламид (НИПАМ), полимерный ОПЦ-агент/стабилизатор – полиакриловая кислота с тритиокарбонатной группой внутри цепи (ПАК), что обеспечивало рост цепи в оба конца с образованием триблок-сополимера. Полимеризацию н-БА и Ст в присутствии ПАК проводили в водной и водно-метанольной средах (объемное соотношение метанол/вода – 4/1). Были получены устойчивые дисперсии триблок-сополимеров с унимодальным РЧР, средний диаметр частиц в которых варьировался от 50 до 100 нм. Наилучший контроль ММ наблюдался при проведении полимеризации в водно-метанольной смеси.

Для полимеризации НИПАМ была выбрана затравочная полимеризация, где в качестве затравочных частиц использовали дисперсии триблок-сополимеров ПБА-блок-ПАК-блок-ПБА со средним диаметром 70 нм. Строение полимерного ОПЦ-агента позволит на этой стадии получить пентаблок-сополимер ПНИПАМ-блок-ПБА-блок-ПАК-блок-ПБА-блок-ПНИПАМ. В результате были получены дисперсии, со средним порядком 100 нм, что на 30 нм больше по сравнению с затравочными частицами.

Литература

[1] Черникова Е.В.; Серхачева Н.С.; Смирнов О.И.; Прокопов Н.И.; Плуталова А.В.; Лысенко Е.А.; Кожунова Е.Ю. *Высокомолекулярные соединения. Серия Б.* **2016**, 58(6), 417.

[2] Zhang X.; Rieger J.; Charleux B. *Polym. Chem.* **2012**, 3, 1502.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект 18-33-0386).

Синтез новых четырехлучевых звездообразных олигоимидов

Солдатова А. Е.^а, Цегельская А. Ю.^а, Семенова Г. К.^а, Абрамов И. Г.^б, Кузнецов А. А.^а

^а Институт синтетических полимерных материалов им. Ениколопова, Москва, Россия

^б Ярославский Технический Университет, Ярославль, Россия

E-mail: soldatova.anastasia92@gmail.com

Новая серия тетрааминов общей формулы (схема 1, соединение 1) была синтезирована методом прямой конденсации N-Вос-производных 3,5-диаминобензойной кислоты и ароматических диаминов в присутствии трифенилфосфита/пиридина.

На основе новых тетрааминов были синтезированы четырехлучевые звездообразные олигоимиды (ЗОИ) по схеме В4+АВ методом высокотемпературной каталитической поликонденсации в расплаве бензойной кислоты [1]. Соединение АВ -3-аминофеноксифталевая кислота представляет собой мономер в латентной форме, который в условиях процесса переходит в активную форму. Изменение мольного соотношения между компонентами В4 и АВ позволяет регулировать длину лучей образующихся звезд. Полученные ЗОИ обладают уникальным для поликонденсационных полимеров узким ММР (1,3-1,7).

Полученные тетралучевые звездообразные олигоимиды были исследованы методами ¹Н ЯМР-, ИК- спектроскопией, ДСК и ГПХ.

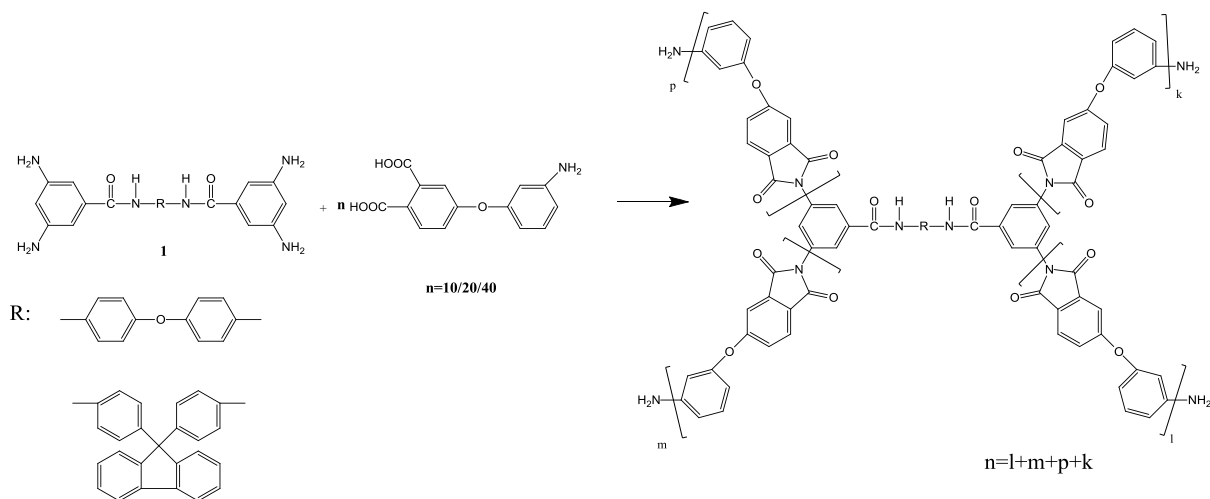


Схема. 1. Синтез четырехлучевых звездообразных олигоимидов.

Литература

[1] Kuznetsov A.A. *High Perform Polym.* **2000**, *12*, 445-460.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант №16-03-01119

Исследование закономерностей образования белковых конъюгатов золотых наночастиц методом флуоресцентной спектроскопии

Сотников Д.В., Иванов В.С., Жердев А.В., Дзантиев Б.Б.

Институт биохимии им. А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» Российской академии наук, Москва, Россия

e-mail: sotnikov-d-i@mail.ru

Наночастицы золота (НЧЗ), модифицированные биомолекулами, интенсивно используются в различных современных биоаналитических системах в качестве детектирующих агентов. Их практическая востребованность обусловлена как оптическими свойствами частицы-носителя, модулируемыми вследствие процессов локализованного поверхностного плазмонного резонанса, так и возможностью функционализации носителя антителами или другими рецепторными молекулами для эффективного выявления целевого аналита. В связи с этим крайне важны вопросы оценки состава и функциональной активности нанокомпозитов НЧЗ – биомолекула.

В настоящей работе изучен состав конъюгатов НЧЗ и двух белков, иммуноглобулина G и сывороточного альбумина, наиболее часто используемых в биоаналитических целях. НЧЗ были синтезированы методом Туркевича-Френса. Диаметры НЧЗ, полученных при разных режимах синтеза, по данным просвечивающей электронной микроскопии составили от 20 до 50 нм. Степень агрегации белковых препаратов контролировали методом проточного фракционирования в поперечном поле. Для оценки соотношения белок : НЧЗ в продуктах синтеза использовалась разработанная нами методика, основанная на флуоресцентной спектроскопии – регистрации собственной флуоресценции триптофана в составе белков [1].

Проведено сравнение состава полученных конъюгатов в зависимости от концентрации белка при синтезе и рН среды иммобилизации. Показаны отличия сорбционных свойств двух сопоставляемых белков. Иммуноглобулин G эффективно сорбируется на НЧЗ во всем исследованном диапазоне рН (от 4 до 10), тогда как иммобилизация сывороточного альбумина характеризуется выраженной рН-зависимостью и эффективное связывание низких концентраций белка наблюдается только при рН < 7. Установлены условия синтеза, приводящие к получению либо монослойных, либо полислойных продуктов. Полученные данные сопоставлены с представленными в литературе моделями иммобилизации белков на наночастицах [2-4]. На основании выявленных зависимостей определены условия синтеза нанокомпозитов, наиболее эффективных в иммунохроматографических тест-системах.

Литература

- [1] Sotnikov D.V.; Zherdev A.V.; Dzantiev B.B. *Intern. J. Mol. Sci.* **2014**, 16(1), 907.
- [2] Bell N.C.; Minelli C.; Shard A.G. *Anal. Methods.* **2013**, 5(18), 4591.
- [3] Zhang S.; Moustafa Y.; Huo Q. *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **2014**, 6(23), 21184.
- [4] Shang L.; Nienhaus G.U. *Acc. Chem. Res.* **2017**, 50(2), 387.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 14.613.21.0080 от 22.11.2017, уникальный идентификатор RFMEFI61317X0080).

Исследование кинетики полимеризации *n*-ксилилена и хлор-*n*-ксилилена методом *in situ* дифференциальной сканирующей калориметрии

Стрельцов Д.Р.^{a,b}, Бузин А.И.^{a,b}, Дмитрияков П.В.^b, Чвалун С.Н.^{b,a}

^a Институт синтетических полимерных материалов РАН, Москва, Россия

^b НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: streltsov.dmitry@gmail.com

Поли-*n*-ксилилены, также известные как парилены, традиционно синтезируют методом полимеризации на поверхности из газовой фазы. Данный способ вакуумного осаждения позволяет получать полимерные конформные покрытия строго контролируемой толщины на подложках со сложным рельефом поверхности без растворителей или катализаторов. Хотя на сегодняшний день синтезировано более 20 типов париленов, только несколько из них коммерчески доступны, а именно: парилены N, C, D (незамещенный поли-*n*-ксилилен, поли-хлор-*n*-ксилилен, поли-дихлор-*n*-ксилен, соответственно), а также недавно коммерциализированный парилен НТ (поли-тетрафтор-*n*-ксилилен).

Высокая реакционная способность *n*-ксилиленов и низкие температуры полимеризации делают исследование кинетики полимеризации этих мономеров нетривиальной задачей. Для ее решения в нашей группе был разработан дифференциальный сканирующий калориметр теплового потока, интегрированный в вакуумную камеру осаждения. В данной работе проведен сравнительный анализ кинетики полимеризации незамещенного *n*-ксилилена (ПК) и хлор-*n*-ксилилена (хлор-ПК) в конденсированном состоянии. Определены температурный диапазон (от -110 до -75 °С для ПК и от -140 до -80 °С для хлор-ПК) и тепловой эффект ($Q = 86 \pm 8$ кДж/моль для ПК и $Q = 71 \pm 9$ кДж/моль для хлор-ПК) реакции полимеризации. Для анализа кинетики реакции были использованы безмодельные изоконверсионные методы. Показано, что при высоких степенях конверсии наблюдается переход от реакционно-контролируемого режима полимеризации к диффузионно-контролируемому режиму. С помощью метода Сбираззуоли, основанного на использовании компенсационного эффекта, сделана оценка модели реакции. Полимеризация незамещенного *n*-ксилилена в диапазоне степеней конверсии 20 – 80 % описывается уравнением Авраами-Ерофеева, тогда как полимеризации хлор-*n*-ксилилена соответствует модель реакции 2-го порядка в диапазоне степеней конверсии 30 – 90 %. Наблюдаемое отличие в кинетике полимеризации ПК и хлор-ПК можно объяснить гетерогенным характером кинетики полимеризации *n*-ксилиленов в твердом состоянии и спецификой распространения локализованной в пространстве зоны реакции.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 18-03-00916, 18-03-00662).

Влияние формы мезогенной группы на структуру супрамолекулярных агрегатов, сформированных жесткими секторообразными и конусообразными дендронами

А.А. Ступников^{a,b}, Ю.Н. Малахова^{a,b}, А.В. Бакиров^{a,b}, М.А. Щербина^{b,c},
С.Н. Чвалун^{b,c}

^a *Московский технологический университет, институт тонких химических технологий, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

^c *Институт синтетических полимерных материалов имени Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: alexei.stupnikov@mail.ru

Секторообразные дендроны являются строительными блоками преобладающего числа синтетических самоорганизующихся систем [1]. Поэтому весьма актуальной задачей является исследование основных принципов образования жидкокристаллических фаз на основе секторообразных и конусообразных дендронов различной химической природы. Несмотря на богатое фазовое многообразие, которое демонстрируют такие системы, формирование той или иной мезофазы может быть предсказано с высокой степенью точности геометрической моделью, сопоставляющей форму жесткого дендрона с функцией распределения радиальной плотности в соответствующих многогранниках Вороного [2],[3].

В работе представлены особенности самоорганизации секторообразных дендронов на основе бензолсульфоновой и галловой кислот. Рассмотрено фазовое поведение симметричных цезиевых солей бензолсульфоновой кислоты при варьировании геометрической формы дендрона за счет изменения длины алифатических окончаний. Показано, что для таких систем характерно образование упорядоченных и неупорядоченных колончатых гексагональных мезофаз, а также кубических фаз типа пластического кристалла симметрии типа $Pm\bar{3}n$.

Изучение описанных систем поможет не только расширить понимание структурообразования в них, но и создавать функциональные супрамолекулярные материалы с заданными свойствами на их основе.

Литература

- [1] Yao X., Cseh L., Zeng X., Xue M., Liu Y, Ungar G., *Nanoscale Horiz.*, **2017**, 2(1), 43.
- [2] Ungar G., Liu Y.S., Zeng X.B., Percec V., Cho W.D., *Science.*, **2003**, 299(5610), 1208.
- [3] Shcherbina M.A., Bakirov A.V., Yan L., Beginn U., Zhu X., Möller M., Chvalun S.N., *Mendeleev Commun.*, **2015**, 25(2), 142.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 18-03-00967а и РНФ № 17-73-20268

Синтез и свойства звездообразных полимеров с карбосилановыми ядрами и полидиметилсилоксановыми (ПДМС) лучами

Тихонов П.А.^a, Черкаев Г.В.^a, Демченко Н.В.^a, Татарина Е.А.^a, Василенко Н.Г.^a,
Васильев В.Г.^b, Бузин М.И.^b, Музафаров А.М.^{a,b}

^a Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

^b Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

E-mail: tikhonpavel@yandex.ru

Данная работа является продолжением исследования звездообразных полимеров, полученных на основе полилитиевых дендримерных макроинициаторов анионной полимеризации [1]. В ней будет расширен ряд получаемых карбосилановых дендримеров с бидодецилметилсилильной оболочкой, служащих ядрами для звездообразных полимеров, затем более подробно изучен процесс образования их литиевых производных, которые далее будут использованы для полимеризации с раскрытием гексаметилциклотрисилоксана и получением звездообразных ПДМС с различными длинами луча. Все полученные продукты планируется проанализировать с помощью спектроскопии ¹H ЯМР, а также термическими, хроматографическими реологическими, и рентгеновскими методами. Последним двум будет уделено особое внимание для определения характера течения полученных полимерных звезд и природы мезофазы, которая ранее наблюдалась в 128-лучевых системах [2].

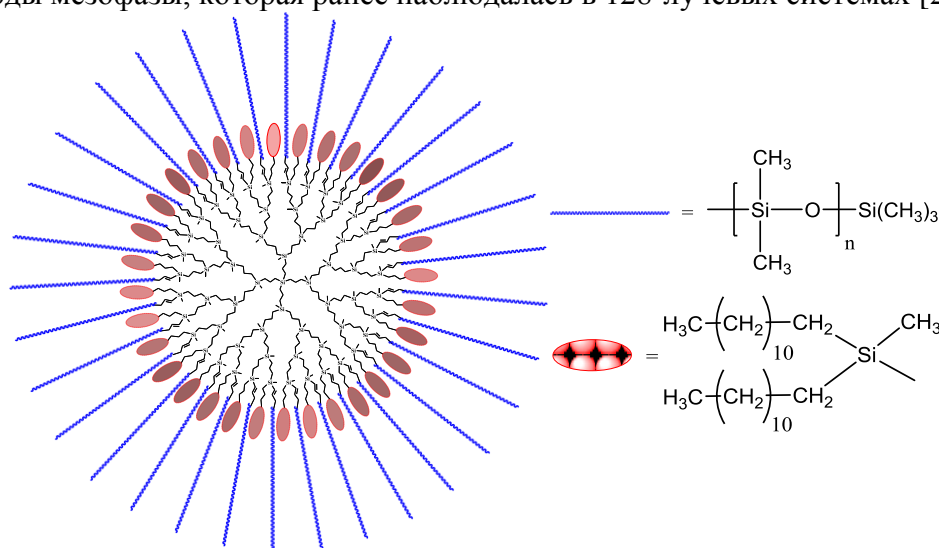


Рис. 1. Звездообразный ПДМС с карбосилановым дендримером 4-й генерации в качестве ядра.

Литература

- [1] N. G. Vasilenko, E. A. Rebrov, A. M. Muzafarov, B. Eßwein, B. Striegel, M. Moller, *Macromol. Chem. Phys.* **1998**, 199, 889–895.
[2] O. V. Novozhilov, N. G. Vasilenko, M. I. Buzin, M. A. Scherbina, S. N. Chvalun, A.M. Muzafarov, *Russian Chemical Bulletin, International Edition*, **2011**, 60(5), 1019–1021.

Работа выполнена при поддержке РФФИ проект №18-33-00096 мол_a и проект №18-03-00637 А

Определение количества малых анионных липосом, связанных с термочувствительным положительно заряженным микрогелем

Якимова Т.М.^a, Ивашков О.В.^a, Ярославов А.А.^a, Xu W.^b, Pich A.^b

^a *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

^b *DWI – Leibniz Institute for Interactive Materials, RWTH, Aachen, Germany*

E-mail: yakimova_t31@inbox.ru

Комплекс из липосом, адсорбированных на термочувствительном микрогеле, является перспективной системой для доставки и контролируемого высвобождения нескольких лекарственных веществ одновременно. Для получения такой системы несколько типов анионных липосом, предварительно загруженных различными биологически активными веществами, могут быть адсорбированы на частицах положительно заряженного микрогеля. Повышением температуры можно индуцировать коллапс микрогеля – существенное уменьшение диаметра вследствие ухудшения взаимодействия с растворителем, что приводит к высвобождению загруженного в адсорбированные липосомы вещества [1].

Одним из важнейших свойств микрогель-липосомального комплекса является максимальное количество биологически активного вещества, которое может быть включено в данную систему. Это количество главным образом определяется двумя параметрами: концентрацией загруженного вещества во внутреннем объеме липосом и максимальным количеством липосом, которые могут быть адсорбированы на поверхности микрогеля. Для приготовления комплексов использовались липосомы диаметром 100 нм, содержащие флуоресцентную метку, приготовленные из нейтрального яичного лецитина и отрицательно заряженного фосфатидилсерина. Комплексообразование проводили с микрогелями размером 200 нм на основе N-винилкапролактама, содержащими 35% или 50% положительно заряженного N-винилформамида [2]. Для обоих типов микрогеля была получена серия комплексов, в которой варьировалось массовое отношение липосом к микрогелю. Методом ультрацентрифугирования частицы комплекса отделяли от несвязанных липосом, после чего концентрацию последних в супернатанте определяли методом флуоресцентной спектроскопии. Из зависимости количества связанных липосом от их общего количества в системе было определено максимальное количество липосом, которое может быть связано с микрогелем. Полученные данные сравнили с теоретическими оценками, основанными на использовании геометрических моделей.

Литература

- [1] Yaroslavov, A.; Panova, I.; Sybachin, A.; Spiridonov, V.; Zezin, A.; Mergel, O.; Gelissen, A.; Tiwari, R.; Plamper, F.; Richtering, W.; Menger, F. *Nanomedicine Nanotechnology, Biol. Med.* **2017**, *13*, 1491–1494.
- [2] Peng, H.; Xu, W.; Pich, A. *Polym. Chem.* **2016**, *7*, 5011–5022.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-01190

Инкапсулирование полидиметилсилоксана

Борисов К.М.^a, Бокова Е.С.^a, Калинина А.А.^b, Япрынцева А.Д.^c, Стрельцов Д.Р.^b, Музафаров А.М.^d

^aРоссийский государственный университет им. А.Н. Косыгина

^bИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова

^cИнститут общей и неорганической химии им. Н.С. Курнаковы

^dИнститут элементоорганических соединений А.Н. Несмеянова

bora.91@mail.ru

В настоящее время инкапсулирование различных агентов является актуальной темой, которая обладает высоким потенциалом использования. Простота получения подобных структур, а также широкие возможности регулирования таких свойств, как размер микрокапсул, толщина оболочки и её жесткость, обуславливают большой спектр применения таких частиц. Уже известны примеры использования микрокапсул в качестве контейнеров для инсектицидов [1], лекарственных препаратов [2] и микроорганизмов [3].

В литературе большое внимание уделено микрокапсулам, оболочка которых представляет собой полисилоксановую структуру [4,5]. Одним из вариантов формирования микрокапсул является подход, в котором сверхразветвленный полиэтоксисилоксан в процессе конденсации на границе раздела фаз, образует оболочку микрокапсул.

Целью данной работы является инкапсулирование функционального и нефункционального ПДМС в микрокапсулы с кремнезёмной оболочкой.

В докладе будут представлены результаты электронной сканирующей и атомно-силовой микроскопии, полученных микрокапсул с ПДМС ядром.

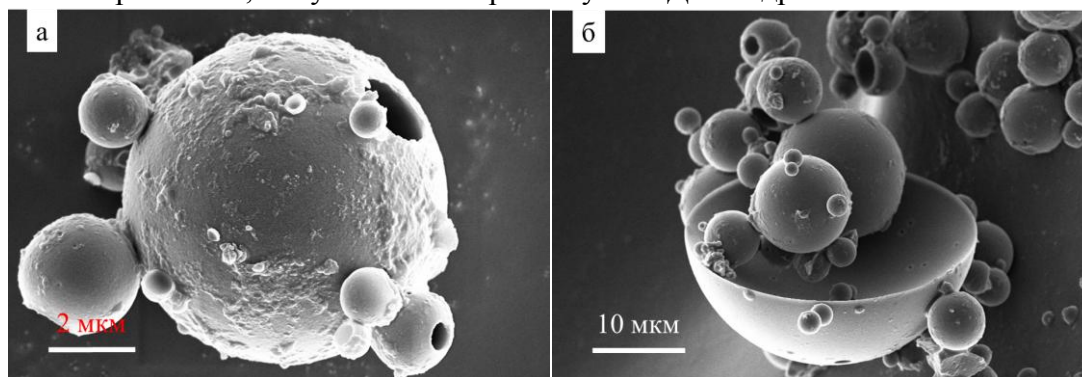


Рис.1. Фотография микрокапсул, наполненных ПМС 50 (а) и СКТН-А (б)

Литература

[1] Койн Боб Микрокапсулы // Патент РФ № 2359662, 27.06.2009.

[2] Михель Шнайдер, Филипп Буссат. Микрокапсулы, способ изготовления и их применение // Патент РФ №96117128/14, 1995.11.21.

[3] Shah N.P. Microencapsulation of probiotic bacteria and their survival in frozen fermented dairy desserts / N.P. Shah // Aust. J. Dairy Technol. – 2000. – Vol. 55. – P. 139-144.

[4] Zhao Y., Li Y., Demco D. E., Zhu X., and Möller M. // Langmuir 2014, 30, 4253–4261

[5] Zoldesi, C. I.; van Walree, C. A.; Imhof, A. Deformable Hollow Hybrid Silica/Siloxane Colloids by Emulsion Templating // Langmuir 2006, 22, 4343–4352.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента (проект № МК-898.2017.3), РФФИ (проект № 15-03-07718_a).

Композитные материалы на основе поли(3,4-этилендиокситиофена) и сульфированного поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида)

Бодаев В.О.^а, Шепелева А. С.^а, Пышкина О. А.^а, Сергеев В.Г.^а

^аМосковский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

E-mail: bodaev.v@yandex.ru

Цель данной работы заключалась в синтезе и изучении физико-химических свойств композитных материалов на основе поли(3,4-этилендиокситиофена) (ПЭДОТ) и сульфированного поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксида) (СПФО).

Полимерную матрицу СПФО получали следующим образом: поли(2,6-диметил-1,4-фениленоксид) сульфировали с использованием хлорсульфоновой кислоты и определяли степень сульфирования продукта методом обратного кислотно-основного титрования. ИК-спектр продукта содержал полосы поглощения, характерные для сульфогрупп, степень сульфирования составила 22%.

Синтез композиционных материалов проводили методом матричной полимеризации 3,4-этилендиокситиофена (ЭДОТ) в присутствии СПФО при действии смешанного окислителя (пероксодисульфат аммония ($c((NH_4)_2S_2O_8)=c(ЭДОТ)$) и каталитические количества хлорида железа (III) в водно-спиртовой среде при различных мольных соотношениях: [ЭДОТ]: [СПФО] = 1:2, 1:1, 1:0.5.

Структуру полученных продуктов изучали методом ИК-спектроскопии. ИК-спектры всех полученных продуктов содержали полосы поглощения, характерные для ПЭДОТ и СПФО. Следовательно, полученные продукты представляют собой композитные материалы на основе ПЭДОТ и СПФО.

Композитные материалы ПЭДОТ-СПФО использовали в качестве рабочего электрода для амперометрического определения аскорбиновой кислоты. Показано, что наилучшими рабочими параметрами обладает электрод на основе композита ПЭДОТ-СПФО, полученный при мольном соотношении [ЭДОТ]:[СПФО]=1:1 в исходной реакционной смеси.

Композиционные материалы на основе частично фосфорилированного поливинилового спирта и полианилина

Скоробогатов Е.В.^а, Шепелева А.С.^а, Пышкина О.А.^а

^аМосковский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

E-mail: skorobogatoveg@gmail.com

Композиты на основе полианилина (ПАНИ) можно использовать в качестве антикоррозионных агентов, и получение водных дисперсий значительно облегчает их применение. Цель настоящей работы заключалась в синтезе и исследовании свойств композиционных материалов на основе ПАНИ и частично фосфорилированного поливинилового спирта (фПВС).

Фосфорилирование поливинилового спирта (ПВС) проводили с использованием фосфорной кислоты в присутствии мочевины. Степень фосфорилирования ПВС, определенная с помощью элементного анализа, составила 17,5%. Для получения композитного ПАНИ-фПВС проводили полимеризацию анилина в присутствии фосфорилированного поливинилового спирта при разных соотношениях анилин/фПВС в реакционной смеси. Полученные композиты при обработке ультразвуком переходили в водные дисперсии, которые оставались стабильны в течение, по меньшей мере, 2 месяцев. Из-за образования устойчивых водных дисперсий композитов ПАНИ-фПВС было предположено, что часть фосфатных групп фПВС не участвует во взаимодействии с положительно заряженными иминогруппами ПАНИ.

Количество таких свободных фосфатных групп в композитах ПАНИ-фПВС определяли следующим образом. Эмиральдиновая соль ПАНИ (максимум поглощения при 650 нм) переходит в основание ПАНИ (максимум поглощения при 580 нм) при повышении pH. Таким образом, можно оценить количество свободных и связанных фосфатных групп путем одновременной регистрации электронных спектров и значений pH при титровании NaOH.

В таблице 1 приведены количества свободных и связанных фосфатных групп в композитах ПАНИ-фПВС.

Таблица 1 Количество связанных и несвязанных фосфатных групп в композитах ПАНИ-фПВС и их способность к формированию пленки

	Количество связанных фосфатных групп, %	Количество несвязанных фосфатных групп, %	Пленкообразование	Средний размер частиц по данным ПЭМ, нм
ПАНИ	-	-	-	~100-200
$PO_4^- : N^+ = 1 : 1$	6,41	93,59	+	~10-50
$PO_4^- : N^+ = 1 : 2$	27,27	72,73	+	~10-50
фПВС	-	-	±	-

Из таблицы 1 видно, что увеличение содержания АНИ в реакционной смеси в 2 раза приводит к возрастанию числа связанных фосфатных групп более чем в 4 раза. Также следует отметить, что, несмотря на отсутствие пленкообразующих свойств у ПАНИ и плохих пленкообразующих свойств у фПВС, композиты обладают отличными пленкообразующими свойствами. Средний размер частиц обоих композитов составляет несколько десятков нанометров, что в несколько раз меньше размеров частиц ПАНИ.

Структура наномодифицированных эпоксидных композитов

Абдрахманова Л.А., Хозин В.Г., Низамов Р.К.

Казанский государственный архитектурно-строительный университет, г. Казань, РФ

E-mail: laa@kgasu.ru

Главная цель модификации эпоксидных полимеров состоит в их усилении, что предполагает, в первую очередь, повышение механической прочности, твердости, модуля упругости, износостойкости материала, т.е. степени его сопротивления внешним силовым воздействиям. Модификация с целью усиления должна основываться на закономерностях связи свойств со структурой полимера, знании ее дефектов и их генетической природы. Исследования последних лет [1] позволяют выделить углеродные нанотрубки (УНТ) как наиболее перспективные объекты, позволяющие создавать материалы с принципиально новыми свойствами. Ранее авторами была рассмотрена эффективность наномодификации эпоксидных связующих многослойными УНТ фирмы «Arkema» и однослойными УНТ компании ООО OCSiAl [2,3]. В данной работе проанализированы проведенные исследования использования в композициях на основе эпоксидного олигомера ЭД-20 в интервале концентраций от 0,0001 до 0,1 % углеродных наноструктур в виде стабилизированных водных коллоидных дисперсий УНТ и графеновых нанопластинок, а также сухих углеродных нанотрубок марки Таунит-М, функционализированных алкильными группами. В целом, в результате проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- в составе эпоксидных смол наиболее эффективна модификация функционализированными УНТ, обусловленная более равномерным распределением нанодобавки в матрице полимера;

- введение углеродных наноструктур предварительно в аминный отвердитель обуславливает ускорение реакции отверждения и увеличение степени конверсии, приводя при этом к образованию редкосетчатой структуры полимера;

- графеновые нанопластины в составе эпоксидных полимеров ведут себя специфическим образом: обнаружено перераспределение наномодификатора в процессе отверждения по высоте образца в направлении от подложки к поверхности контакта с воздухом.

Литература

[1] Иржак В.И. Эпоксидные композиционные материалы с углеродными нанотрубками. *Успехи химии*. **2011**. 80(8),821.

[2] Хозин В.Г., Абдрахманова Л.А., Низамов Р.К. Общая концентрационная закономерность эффектов наномодифицирования строительных материалов/ *Строительные материалы*. **2015**. 2. 25.

[3] Хозин В.Г., Низамов Р.К., Абдрахманова Л.А. Модификация строительных полимеров (поливинилхлорида и эпоксидных) однослойными углеродными трубками. *Строительные материалы*. **2017**. 1-2.55.

Авторы благодарят: ООО «НаноТехЦентр» (Россия, г. Тамбов) за предоставленные образцы углеродных наноматериалов и междисциплинарный центр «Аналитическая микроскопия» (ПФУ, г.Казань) за помощь при проведении исследований микроструктуры образцов.

Получение и исследование свойств нанокompозитов на основе полиимида и металлоалкоксисилоксанов

Андропова У.С.^{a, b}, Тарасенков А.Н.^b, Тебенева Н.А.^b, Сапожников Д.А.^a, Серенко О.А.^a,
Музафаров А.М.^a

^aИИЭОС им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

^bИСПМ им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: hrh_uly@mail.ru

Благодаря своим свойствам полиимиды широко востребованы в высокотехнологичных областях применения и используются как в качестве связующих для композитов конструкционного назначения, так и в виде пленок или защитных покрытий. Одним из способов модификации физико-химических, механических и оптических свойств этих материалов является введение наноразмерных наполнителей. Ранее было показано [1], что металлоалкоксисилоксаны являются перспективными прекурсорами наночастиц для получения органо-неорганических систем методом *in situ* наполнения. Их применение в качестве прекурсоров дисперсной фазы позволяет исключить введение воды и катализатора в реакционную смесь, в отличие от композиций, получаемых с использованием тетраэтоксисилана, металлосилоксанов. Цель работы - получение и исследование структуры и свойств полимерных нанокompозитов на основе полиимида (ПИ) и металлоалкоксисилоксанов, различающихся типом центрального атома металла. Использовали ПИ на основе анилинфлуорена и 3,3',4,4'-дифенилоксид тетракарбоновой кислоты; прекурсорами служили трис-(метилдиэтоксисилокси)железо, тетракис-(метилдиэтоксисилокси)цирконий, тетракис-(метилдиэтоксисилокси)гафний, трис-(метилдиэтоксисилокси)алюминий, пентакис-(метилдиэтоксисилокси)ниобий и трис-(3-аминопропилдиэтоксисилокси)хром. Концентрация прекурсоров составляла 3 и 14 мас.%. Наноразмерность дисперсной фазы в полимере устанавливали методом просвечивающей электронной микроскопии. Обнаружено, что тип центрального атома прекурсора не оказывает влияния на форму образующихся наночастиц. Их размер, оставаясь в нанометровом диапазоне, увеличивается с ростом концентрации прекурсора. Проведены исследования теплофизических и диэлектрических свойств полученных материалов. Термостойкость нанокompозитов повышается по сравнению с исходным полиимидом. Температура начала термоокислительной деструкции выше на 20-30 град по отношению к ПИ. Присутствие в полимерной матрице наночастиц на основе трис-(метилдиэтоксисилокси)железа и тетракис-(метилдиэтоксисилокси)гафния привело в возрастанию диэлектрической проницаемости систем. Таким образом, применение металлоалкоксисилоксанов при *in situ* наполнении ПИ позволяет улучшить его свойства.

Литература

[1] Тебенева Н. А., Тарасенков А. Н., Бузин М. И., Шапошникова В. В., Серенко О. А., Музафаров А. М. *Изв. АН, сер. хим.*, **2016**, 4, 1097.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-03-00514

Система ориентированной укладки nano- и микроволокнистых полимерных материалов с помощью генераторов высоковольтных импульсов методом электроспиннинга

Антипова К.Г.^а, Ребров И.Е.^б, Григорьев Т.Е.^а, Чвалун С.Н.^а

^а НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

^б Институт электрофизики и электроэнергетики РАН, Москва, Россия

E-mail: kris444ti@yandex.ru

Работа посвящена решению задачи направленной стабилизации струи в процессе электроформования упорядоченных nano- и микроволокнистых полимерных материалов с помощью генераторов высоковольтных (ВВ) высокочастотных импульсов, что позволит создать новые nano- и микроволокнистые материалы с упорядоченной структурой для тканевой инженерии, регенеративной медицины, жгуты неограниченной длины с ориентированными волокнами для технических и биотехнологических применений, фильтрующие материалы [1]. Для реализации метода были созданы генераторы ВВ наносекундных импульсов, позволяющие контролировано изменять напряжение на коллекторах и отклоняющих электродах. С целью определения геометрических и технологических параметров установки предварительно было проведено численное 3D моделирование распределения напряженности электрического поля в системе электроды-капилляр-земля и исследовано перераспределение поля в процессе смены полярности, а также вычислены компоненты собственной емкости электродной системы, подобраны геометрические параметры. Установка упорядоченной укладки включает в себя [2]: источник высокого напряжения Spellman SL30, подключенный к капилляру и к ВВ коммутаторам через буферный конденсатор. С двухканального низковольтного задающего генератора импульсов сигналы подаются на управляющие драйверы, которые питаются от источников 12 В и 300 В. Драйверы формируют сигнал управления, и посредством гальванической развязки открывают и закрывают ВВ ключи. Выходы ВВ ключей подключены к коллекторной системе. К капилляру проведена система регулирования расхода полимерного раствора. Создана система цилиндрических коллекторов с возможностью изменения как расстояния между электродами, так и капилляром, для увеличения размеров рабочей зоны коллектора реализована система с отклоняющими электродами. Показана уникальная возможность получения образцов на зазорах до 10 см. На основе критериев универсальности применения и минимальной зависимости устойчивости процесса электроформования от внешних условий (температуры, влажности и др.) была выбрана полимерная композиция для получения ориентированных материалов на основе сополимера полиамида 6/66. Также было проведено исследование реологических и электропроводящих свойств прядильных растворов, выбраны рабочие параметры для широкого диапазона технологических условий электроформования. Получены образцы материалов с высокоориентированными волокнами от 4 см до 10 см.

Литература

[1] Ребров И.Е.; Хомич В.Ю. *Прикладная Физика*. **2018**, 3, 85.

[2] Мошкунев С.И. и др. *ПТЭ*. **2018**, 5, 1.

Работа выполнена при поддержке РНФ №17-79-10470 и с использованием оборудования Ресурсных центров НИЦ «Курчатовский институт».

Исследование механики модифицированных диафрагм крыс

Антипова К.Г.^{a,b}, Луканина К.И.^a, Крашенинников С.В.^a, Григорьев Т.Е.^a, Чвалун С.Н.^a

^a НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

^b МФТИ(ГУ), Москва, Россия

E-mail: kris444ti@yandex.ru

В настоящее время важной задачей тканевой инженерии является создание искусственного клеточного каркаса, обеспечивающего правильную пролиферацию и дифференциацию клеток, иннервацию и реваскуляризацию тканей. Формирование целого биоискусственного органа, заселенного клетками, или его части, как *in vitro*, так и *in vivo* – потенциальное применение разрабатываемых каркасов.

В литературе в качестве такого каркаса часто используется децеллюляризованная ткань – естественный экстрацеллюлярный матрикс. Его преимуществом является сохранение трехмерной анатомической морфологии, позволяющей обеспечить аутентичную дифференциацию и ориентацию клеточных культур. Основные недостатки использования децеллюляризованной ткани в качестве каркаса – быстрый и неконтролируемый распад в условиях *in vivo* и, как следствие, недостаточная механическая прочность материала.

В связи с этим, для решения проблемы быстрого биоразложения материала предложена модификация децеллюляризованной ткани коллагеном II типа (Белкозин, Россия) с термической и химической (глутаровым альдегидом) сшивками.

Образцы диафрагмы крыс [1] были предварительно лиофилизированы на установке Martin Christ Alpha 2-4LSC installation в течение 24 часов и затем пропитаны 0,5% (в/в) раствором коллагена в 2,0% уксусной кислоте (УК)/H₂O в течение 24 часов. Часть пропитанных образцов децеллюляризованных тканей были химически сшиты 2,5% глутаровым альдегидом в 2,0% УК/H₂O, который был добавлен в пропитывающий раствор (1,0% от веса полимера). После, образцы были заморожены в рефрижераторе и высушены методом сублимационной сушки. Другая часть образцов была сшита термически – выдерживание в вакуумном шкафу при 105°C в течении 24 часов – после импрегнации материала коллагеновым раствором, последующего замораживания образцов в условиях направленного и ненаправленного роста кристаллов растворителя для формирования упорядоченной и неупорядоченной структуры.

Полученные образцы были исследованы на установке Instron 5982 на разрыв с предварительным циклированием (5000 циклов, скорость 1,0 мм/мин). В результате проведенных исследований не установлено явной зависимости от типа сшивки децеллюляризованной диафрагмы. Предположительно, это связано с высокой степенью неоднородности нативной ткани крысы, вследствие упорядоченной и ориентированной укладки коллагеновых тяжей клеточного каркаса.

Литература

[1] E. A. Gubareva, S. Sjoqvist, I. V. Gilevich, A. S. Sotnichenko, E. V. Kuevda, M. L. Lim, N. Feliu, G. Lemon, K. A. Danilenko, R. Z. Nakokhov, I. S. Gumenyuk, T. E. Grigoriev, S. V. Krasheninnikov, A. G. Pokhotko, A. A. Basov, S. S. Dzhimak, Y. Gustafsson, G. Bautista, A. Beltrán Rodríguez, V. M. Pokrovsky, Ph. Jungebluth, S. N. Chvalun, M. J. Holterman, D. A. Taylor, P. Macchiarini *Biomaterials*. **2016**, 77 (2016), 320.

Работа выполнена при поддержке РФФИ №17-03-01361 А.

Синтез и фотофизические свойства флуоресцентных красителей на основе силоксановых матриц и производных DBMBF₂

Белова А.С.^a, Кононевич Ю.Н.^a, Сажников В.А.^b, Сурин Н.М.^c, Свидченко Е.А.^c, Музафаров А.М.^{a,c}

^a Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

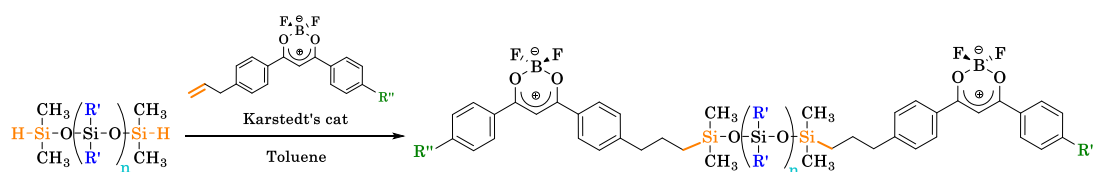
^b Центр фотохимии РАН, Москва, Россия

^c Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: belova.asya@gmail.com

Флуоресцентные красители на основе комплексов дифторида бора (DBMBF₂) представляют собой высоколюминесцентные борограничные комплексы, обладающие рядом ценных фотофизических свойств, таким как сильная флуоресценция в растворе и в твердом состоянии, высоким коэффициентом экстинкции и перестраиваемой эмиссией. Эти органические люминесцентные соединения могут быть использованы в различных областях науки и техники в качестве биологических меток или в качестве органических светоизлучающих диоды (OLED). [1]

Известно, что производные DBMBF₂ в растворах склонны к агрегации и образованию эксимеров в возбужденном состоянии. Одним из подходов к получению эксимеров является фиксация флуорофоров в одной молекуле на близком расстоянии с возможностью внутримолекулярного межфлуорофорного π-π взаимодействия. Линейные силоксаны с гибкой структурой являются удобными матрицами для фиксации двух или более флуорофоров. В данной работе описан синтез серии мультихромоморфных флуоресцентных красителей на основе линейных силоксановых матриц и производных DBMBF₂ (схема 1).



R' = Me, Ph; R'' = H, OMe; n = 0-3

Схема 1. Синтез флуоресцентных красителей на основе линейных силоксановых матриц и производных DBMBF₂

Строение полученных соединений подтверждено данными ¹H-, ¹³C-, ¹⁹F-, ²⁹Si-ЯМР-, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии (ESI), а также изучены их фотофизические свойства.

Литература

[1] P.-Z. Chen, L.-Y. Niu, Y.-Z. Chen, Q.-Z. Yang, *Coord. Chem. Rev.* **2017**, 350, 196-216

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031

Высокопроизводительные стабильные ультрафильтрационные мембраны на основе полисульфона и наноцеллюлозы

Анохина Т.С.^a, Борисов И.Л.^a, Василевский В.П.^a, Петрова Д.А.^b,
Винокуров В.А.^b, Волков А.В.^a

^a *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва*

^b *РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва*

E-mail: tsanokhina@ips.ac.ru

Ультрафильтрация (УФ) – один из важных методов разделения жидких смесей в пищевой и фармацевтической промышленности, биотехнологии, водоподготовки и очистки загрязненных сточных вод. Для эффективной реализации процесса УФ в основном используют полуволоконные мембранные модули, которые обладают большой рабочей поверхностью, что обеспечивает их высокую производительность. Одним из наиболее распространенных материалов полуволоконных УФ мембран является полисульфон (ПСФ), обладающий термической и химической стабильностью и высокой механической прочностью. В связи с недостаточной гидрофильностью (угол смачивания $\theta=80^\circ$) ПСФ взаимодействует с органическими веществами (белки, масла и др.), присутствующими в разделяемых водных средах, содержащими неполярные фрагменты. Это приводит к засорению рабочей поверхности мембраны. Такое засорение влечет за собой падение производительности ПСФ УФ мембран в процессе разделения [1]. Для того, чтобы уменьшить засорение и устранить снижение производительности, ПСФ УФ мембраны модифицируют с целью увеличения их гидрофильности. Одним из способов гидрофилизации может быть введение в объем или на поверхность ПСФ мембран наночастиц, например, кремнезема, оксидов металлов, цеолитов, глин. [2, 3]. Привлекательная альтернатива заключается в использовании материалов природного происхождения, прежде всего, наноцеллюлозы, обладающей высокой площадью поверхности, механической прочностью, термостабильностью и др.[4].

В связи с этим целью данной работы являлась модификация полуволоконных ПСФ УФ мембран целлюлозными нанопибриллами (ЦНФ), при введении их в осадительную ванну в процессе формования полуволоконных мембран. Показано, что такая модификация приводит к увеличению в 1,5 раза проницаемости ПСФ мембраны по воде и стабилизации ее транспортных свойств.

Литература

- [1] Cheryan M. Ultrafiltration and microfiltration handbook, Technomic Pub. Co., Pennsylvania. **1998**.
- [2] Zhao S., Wang Z., Wei X., Zhao B., Wang J., Yang S., Wang S. *J. Membr. Sci.* **2011**, 385–386, 251
- [3] Yin J., Zhu G., Deng B. *J. Membr. Sci.* **2013**, 437, 237.
- [4] Малахов А.О., Анохина Т.С., Петрова Д.А., Винокуров В.А., Волков А.В. *Мембраны и мембранные технологии.* **2018**, 8(5), 315.

Исследования проводились в рамках ФЦП “Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технического комплекса России на 2014–2020 годы” при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект 14.577.21.0265, уникальный идентификатор ПНИЭР RFMEFI57717X0265).

Новые эффективные люминофоры: только красивая химия или новые перспективы в органической фотонике и электронике

Борщев О.В.^a, Скоротецкий М.С.^a, Сурин М.Н.^a, Пономаренко С.А.^{a,b}

^a ФГБУН Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, г. Москва

^b Химический факультет, МГУ, г. Москва

E-mail: borshchev@ispm.ru

В данной работе представлен новый подход к созданию эффективных люминофоров. Были синтезированы новые кремнийорганические наноструктурированные люминофоры (КНЛ), в которых два типа различных хромофоров соединены через атом кремния, благодаря чему разрывается сопряжение между ними и происходит их фиксация в пространстве на расстоянии 1-2 нм, необходимом для эффективного переноса энергии по механизму Ферстера [1,2]. Изучение спектрально-люминесцентных свойств синтезированных КНЛ позволило выявить влияние их химического строения и параметров молекулярной структуры (общего количества люминофоров в макромолекуле, те или иные комбинации различных люминесцентных фрагментов в структуре макромолекулы) на оптические, и прежде всего люминесцентные характеристики таких систем [3]. Были изучены процессы внутримолекулярного переноса энергии электронного возбуждения и влияние молекулярного строения полученных соединений на спектральные и временные характеристики, а также квантовый выход люминесценции [4]. В качестве модельных соединений синтезирован ряд новых олигомеров различного строения [5,6]. Полученные КНЛ обладают рядом преимуществ по сравнению с классическими люминофорами: большим коэффициентом экстинкции, высоким квантовым выходом люминесценции, коротким временем высвечивания, большим Стоксовым сдвигом [7].

Синтезированные КНЛ могут использоваться в высокоэффективных пластмассовых сцинтилляторах [1], сцинтилляционных волокнах с коротким временем высвечивания [8], различных устройствах в качестве сместителей спектра [9,10,11], в качестве люминесцентных сшивающих агентов для функциональных органосилоксановых полимеров [12].

Ссылки

- [1] S.A. Ponomarenko, N.M. Surin, O.V. Borshchev, et al. *Scientific Reports* **2014**, 4, 6549. Yu.N.
- [2] Yu.N. Luponosov, S.A. Ponomarenko, N.M. Surin, O.V. Borshchev, et al., *Chem. Mater.* **2009**, 21, 447.
- [3] O.V. Borshchev, E.A. Kleymyuk, N.M. Surin, et al., *Organic Photonics and Photovoltaics*, **2017**, 5 (1), 1-8
- [4] T.Yu. Starikova, N.M. Surin, O.V. Borshchev, et al., *J. Mater. Chem. C*, **2016**, 4, 4699.
- [5] M.S. Skorotetsky, E.D. Krivtsova, O.V. Borshchev et al., *Dyes and Pigments* **2018**, 155, 284–291.
- [6] M.S. Skorotetsky, O.V. Borshchev, N.M. Surin, et al., *Dyes and Pigments*, **2017**, 141, 128–136.
- [7] S.A. Ponomarenko, N.M. Surin, O.V. Borshchev, et al., *Proc. SPIE*, 9545, **2015**, 954509-1.
- [8] O. Borshchev, A.B.R. Cavalcante, L. Gavardi, et al, *Journal of Instrumentation*, **2017**, 12, P05013.
- [9] N. Surin, O. Borshchev, S. Ponomarenko, M. Skorotetsky, et al, *NIM A*, **2014**, 766, 160-162.
- [10] Y. Jin, H. Aihara, O.V. Borshchev, N.M. Surin, S.A. Ponomarenko, *NIM A*, **2016**, 824, 691-692.
- [11] D. Akimov, V. Belov, O. Borshchev, et al, *Journal of Instrumentation*, **2017**, 12, P05014.
- [12] M.S. Skorotetsky, O.V. Borshchev, N.M. Surin, et al., *Silicon*, **2015**, 7, 191-200.

Работа выполнена в рамках научной школы (НШ-5698.2018.3) и при финансовой поддержке РФФИ (грант 18-03-00699 А) и программы Президента РФ для поддержки молодых ученых (МК- 364.2017.3).

Synthesis and characterization of silver-chitosan nanocomposites: from powders to films

Budnikov A.V.^a, Naumkin A.V.^a, Elmanovich I.V.^{a,b},
Rubina M.S.^a, Vasil'kov A.Yu.^a

^a A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS 119991 Moscow, Russia

^b Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University 119991 Moscow, Russia

E-mail: budnikow501@ineos.ac.ru

In this work, a novel route to obtain chitosan-based films with silver nanoparticles is presented. Chitosan is a polysaccharide with unique properties such as biocompatibility and biodegradability. It has hemostatic properties as well as antibacterial and antifungal activities, etc. The antimicrobial activity of chitosan-based materials can be increased by means of metal nanoparticles incorporation into polymer matrix. The proposed approach to obtain chitosan films containing silver nanoparticles consists of two main steps. On the first step, composite chitosan-based powder with metal nanoparticles was formed. For this purpose a colloidal solution of silver nanoparticles prepared *via* sustainable metal vapor synthesis technique was deposited onto chitosan. During the second step, metal-containing powder was dissolved in 1% solution of glacial acetic acid and then films were casted and dried slowly under 25 °C.

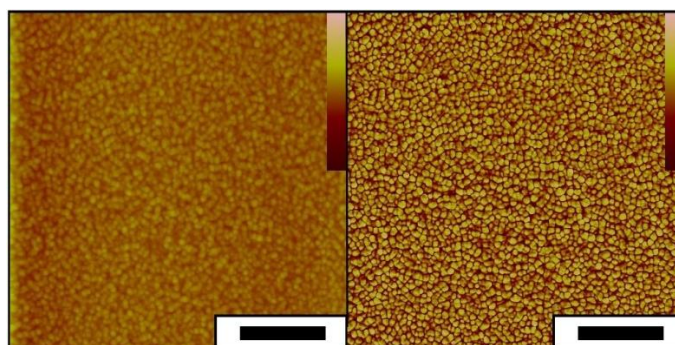


Fig. 1. Typical AFM images of the chitosan films. Left – height image, height scale 30 nm, right – phase image, phase scale 30 deg. Scale bar – 500 nm.

Morphology of the films surface was investigated by means of AFM and SEM. XPS analysis was used to evaluate a chemical composition, relative concentration of functional groups and charge state of metal atoms on the surface of nanocomposites. Interaction mechanisms of metal nanoparticles with polymer matrix were studied using FT-IR in the absorbance and ATR modes. XRD pattern of silver-chitosan nanocomposites revealed the presence of silver fcc phase, proving that silver nanoparticles are incorporated into the biopolymer matrix. The prepared films have potential to be used as dressing materials in regenerative medicine for treatment of wounds and burns.

This work was supported by the RFBR grant №18-33-01094.

The authors gratefully acknowledge Center for molecule composition studies (INEOS RAS), Dr. S.S. Abramchuk for TEM measurements, Dr. R.V. Svetogorov and A.V. Shulenina for XRD analysis.

Гетерогенные каталитические магнитоотделяемые пористые системы на основе дендритных макромолекул

Букина А.В.^a, Сорокина С.А.^b, Кучкина Н.В.^b, Шифрина З.Б.^b

^a РХТУ им. Д.И.Менделеева, Москва, Россия

^b ИХЭОС РАН, Москва, Россия

E-mail: nasta.arz@mail.ru

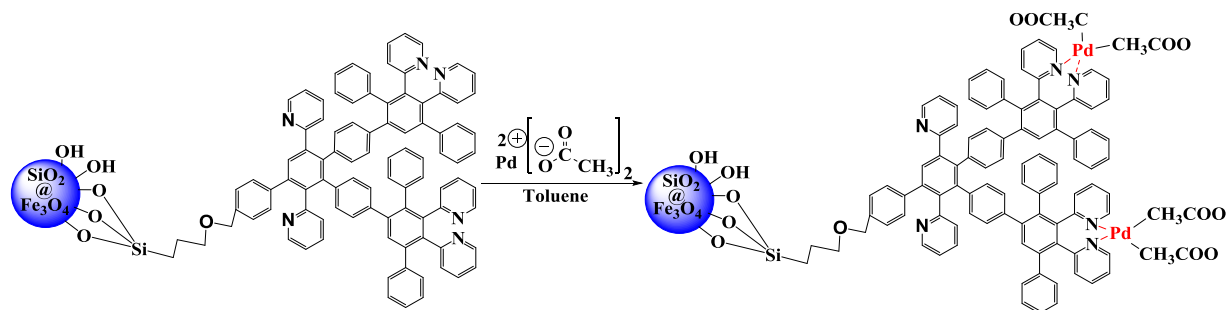
Целью работы является разработка каталитических систем на основе функциональных дендримерных лигандов с ацетатом палладия и мезопористой подложки, содержащей магнитные наночастицы оксида железа.

Дендритная составляющая будет отвечать за формирование каталитических центров, в то время как мезопористая подложка с магнитными наночастицами обеспечит легкое и эффективное магнитное отделение катализатора из реакционной смеси для его повторного использования. Формирование координационных связей между пиридилными группами дендрона и солью палладия обеспечивает возможность тестирования данных систем в качестве катализаторов в реакции Сузуки.

В рамках данной работы был осуществлен синтез пиридилфениленовых дендронов с использованием 4-этинилбензилового спирта в качестве исходной молекулы, обеспечивающей формирование гидроксильной фокальной группы будущего дендрона. Синтез дендронов проводился по разработанной ранее схеме, основанной на реакциях Дильса-Альдера и десилилирования. Стоит отметить, что во избежание окисления фокальной гидроксильной группы дендрона в условиях высокотемпературной реакции циклоприсоединения, на начальном этапе проводили реакцию тетрагидропиранилирования – защиты ОН группы – с последующим ее снятием на последнем этапе синтеза.

Наночастицы магнетита были сформированы и стабилизированы в порах силикагеля путем импрегнации соли железа ($\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$) с последующим термическим разложением в присутствии мягкого восстанавливающего агента. Анализ композита проводился методами просвечивающей электронной микроскопии, порошковой дифракции, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии. После чего проводили модификацию силикагеля 3-йодпропилтриметоксисиланом с последующей прививкой пиридилфениленовых дендронов через реакцию нуклеофильного замещения по Вильямсону.

Полученные каталитические системы были протестированы в реакции Сузуки.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №17-03-00578

Изменение структуры и морфологии поверхности композита на основе ПТФЭ с квазикристаллическим наполнителем Al-Cu-Fe при трении

Головкова Е.А.^а, Белоусов С. И.^а, Кондратьев О. А.^а, Кукуева Е.В.^а, Теплов А.А.^а,
Цетлин М.Б.^а

^а НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: eagolovkova@gmail.com

В работе [1] были получены композиты на основе ПТФЭ с различным содержанием квазикристаллического наполнителя Al-Cu-Fe со средним размером частиц 6 мкм и значительной долей частиц субмикронного размера. Добавление квазикристалла значительно увеличивало износостойкость (для композита с 16 об. % наполнителя износостойкость возросла в 3000 раз).

Электронно-микроскопические исследования в сочетании с энергодисперсионным анализом образцов, подвергавшихся трению, показали, что на поверхности образца образуется поверхностный слой (корка) толщиной 0.5-1 мкм из квазикристаллических частиц размером 0.2-0.3 мкм. За счет образования этой корки, по-видимому, и обеспечивается повышение износостойкости композитов по сравнению с чистым ПТФЭ [1].

Целью данной работы являлось исследование воздействия трения на степень кристалличности полимерной матрицы и процесс образования корки методами рентгенофазового анализа и электронной микроскопии. Рентгенофазовый анализ композитных образцов проводился как методом симметричной съемки, так и при скользящем падении пучка (угол падения 3°) на установке Rigaku Smartlab с вращающимся медным анодом. Скользящее падение использовалось для выделения вклада поверхностных слоев образца.

Интенсивность пиков квазикристалла увеличивается пропорционально его объемной доле в композите, различия между симметричной съемкой и съемкой под скользящим пучком практически не видно, то есть, образование корки на поверхности не отражается в рентгеновских спектрах. Как показали электронно-микроскопические исследования, процесс образования корки на этих образцах не завершен, возможно, из-за большей площади образцов и меньшего давления при трении по сравнению с работой [1].

Степень кристалличности полимера определялась по соотношению интенсивности аморфного гало и самого мощного пика ПТФЭ. Процесс трения сильно уменьшает степень кристалличности образцов чистого ПТФЭ, особенно в поверхностном слое. С увеличением концентрации наполнителя воздействие трения на степень кристалличности уменьшается, уменьшается также разница кристалличности поверхностного слоя и объема образца.

Литература

[1] Цетлин М.Б.; Теплов А.А.; Белоусов С.И.; Чвалун С.Н.; Головкова Е.А.; Крашенинников С.В.; Голубев Е.К.; Пичкур Е.Б.; Дмитрияков П.В.; Бузин А.И. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. 2018, 3, 83.

Effect of Counterion Excluded Volume on the Conformational Behavior of a Flexible Polyelectrolyte Chain in Low-polar Solvent

Gordievskaya Yu.D.^{a,b}, Kramarenko E.Yu.^{a,b}

^a *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

^b *A.N.Nesmeyanov Institute for Organoelement Compounds of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: gordievskaya@polly.phys.msu.ru

The molecular dynamics method was used to simulate a polyelectrolyte chain with a variable fraction of charged units in a good solvent with counterions of a wide range of sizes. It is demonstrated that the size of the counterions does not affect the chain conformation in polyelectrolyte regime, the latter is in an elongated state. With a decrease in the polarity of the solvent, counterions condense on the chain, so a nonmonotonic dependence of the radius of gyration of the chain on the diameter of the counterion is observed. In the case of essentially small sizes of counterions, a coil conformation is realized. This result is explained by the fact that it is energetically favorable to form a chain of dipoles consisting of charged monomer units and counterions. With a further increase in the diameter of the counterion, the polyelectrolyte collapses into an ionomeric globule. If there are bulky counterions in the system, the chain goes to an elongated conformation due to steric reasons [1-3].

The possibility of formation of a core-shell structure is revealed when mixing counterions of different sizes: small counterions are in the core, large ones are on the surface of the globule. For substantially small and large counterions, this structure is not observed, the chain is in the coil state [1,2].

The structure of ionic associates is studied in the case of small fractions of charged chain units. In the presence of bulky counterions in the system, single ion pairs are observed, multiplets from several ion pairs are formed with counterions of intermediate sizes, and small counterions contribute to the formation of rings [2].

The results of the study clearly demonstrate the influence of the competition between Coulomb and volume interactions on the structure of polyelectrolyte chains, which improves our understanding of the behavior of ion-containing polymers. These polymer systems are actively used in medicine, cosmetology, food and other industries. Also, many biological macromolecules such as DNA, RNA, proteins are polyelectrolytes, and their conformational behavior determines the participation in the vital activity of cells.

References

- [1] Gordievskaya Yu. D.; Gavrilo A. A.; Kramarenko E. Yu. *Soft Matter*. **2018**, 14, 1474.
- [2] Гордиевская Ю.Д.; Крамаренко Е.Ю. *Высокомолек. соед. С*. **2018**, 60(2), 1.
- [3] Gordievskaya Yu. D., Budkov Yu. A., Kramarenko E. Yu.; *Soft Matter*. **2018**, 14, 3232.

This work was supported by the Russian Ministry of Education and Science within the State Contract 14.W03.31.0018. Yu.D.G. was grateful a grant from Foundation for the advancement of theoretical physics "Basis". The research is carried out using the equipment of the shared research facilities of HPC computing resources at Lomonosov Moscow State University.

Формирование элементов интегрально-оптических устройств в электрооптических полимерах методом лазерного фотоосветления

Василенко Е.С.^a, Ашарчук И.М.^a, Горячук И.О.^a, Крылов И.В.^a, Погодина Ю.Е.^b,
Полунин Е.В.^b, Соколов В.И.^a

^a Институт Фотонных Технологий РАН, ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника»
РАН, Москва, Россия

^b Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

E-mail: io.gorjachuk@physics.msu.ru

Полимерные материалы, обладающие большим электрооптическим (ЭО) коэффициентом r_{33} и временами переключения на уровне 10^{-11} сек, перспективны при создании высокоскоростных модуляторов света для телекоммуникационного С-диапазона длин волн 1530 – 1565 нм [1, 2]. Такие материалы представляют собой макромолекулу полимера с ковалентно подсоединенными к ней молекулами ЭО хромофора в боковой цепи (система «side-chain»). В таких системах снижена возможность агломерации молекул хромофора по сравнению с системами «guest-host» [1]. Для увеличения ЭО эффекта и повышения прозрачности ЭО полимеров нами синтезированы новые фторсодержащие хромофоры. Предложен лазерный метод формирования элементов интегрально-оптических устройств в ЭО полимерах, основанный на эффекте фотоосветления. Необратимая фотодеструкция хромофора, приводящая к потере окраски, происходит под действием интенсивного (≈ 2 Вт/см²) лазерного излучения, длина волны которого лежит в пределах полосы поглощения хромофора см. Рис. 1. Она сопровождается уменьшением показателя преломления n материала (типично $\Delta n = 0.02 - 0.03$). Это позволяет «рисовать» интегрально-оптические схемы в тонких (≈ 5 мкм) полимерных плёнках. При этом неосветлённые

области пленки с более высоким n являются световедущими каналами, содержащими молекулы ЭО хромофора, не подвергшиеся деструкции [2]. Метод является простым, одноступенчатым и не предполагает удаление полимерного материала.

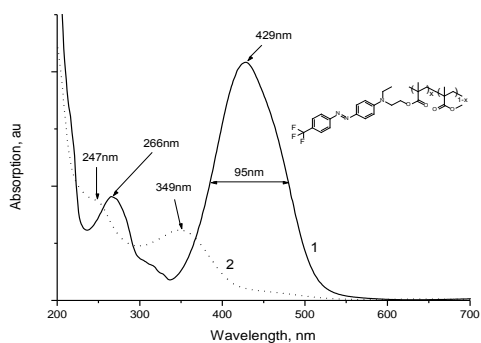


Рис. 1. Спектр поглощения плёнки из ПММА с ЭО хромофором в боковой цепи до (1) и после (2) экспонирования лазерным излучением с длиной волны 440 нм. На вставке приведена химическая формула фторсодержащего ЭО полимера.

Литература

- [1] Денисюк И.Ю.; Бурункова Ю.Э.; Позднякова С.А.; Баля В.К.; Жук Д.И.; Фокина М.И. *Опт. и спектр.* **2015**, 119(4), 691.
[2] Соколов В.И.; Ахманов А.С.; Ашарчук И.М.; Горячук И.О.; Хайдуков К.В.; Назаров М.М. *Опт. и спектр.* **2017**, 122(3), 483.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части синтеза и исследования свойств хромофоров, РФФИ (грант № 18-32-00948) в части разработки лазерных методов формирования элементов интегрально-оптических устройств в ЭО полимерах.

Физико-механические характеристики губчатых материалов на основе полилактонов

Григорьев Т.Е.^a, Загоскин Ю.Д.^a, Крашенинников С.В.^a, Токаев К.В.^b, Токаев Т.К.^c,
Севастьянов В.И.^d, Чвалун С.Н.^{a,e}

^aНациональный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^bФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр фтизиопульмонологии и инфекционных заболеваний» Минздрава России, Москва, Российская Федерация

^cГБУЗ «Московский городской научно-практический центр борьбы с туберкулезом Департамента здравоохранения города Москвы», Москва, Российская Федерация

^dФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр трансплантологии и искусственных органов имени академика В.И. Шумакова» Минздрава России, Москва, Российская Федерация

^eИнститут Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: timgrigo@yandex.ru

Полилактоны – биосовместимые с тканями человека полимерные материалы способные к биорезорбции. На основе этих соединений в настоящее время используются и создаются изделия биомедицинского назначения.[1] Пористые биоинженерные конструкции представляют большой интерес из-за возможности «настройки» механических свойств в широком диапазоне. Большая удельная поверхность при малом количестве полимерного материала позволяют замещать мягкие нативные ткани большого объема, не вызывая резкого повышения концентрации продуктов разложения в организме.

В рамках данной работы были получены губчатые материалы на основе поли-L-лактида и покапролактона методом сублимационной сушки. Подобраны условия для бездефектной кристаллизации растворов полилактонов в 1,4 – диоксане. Пористость изделий варьировалась в диапазоне 96 – 98%. Были проведены исследования механических свойств системы при одноосном сжатии образцов. Полученные значения модуля Юнга лежат в диапазоне 10 – 1800 кПа.

Биосовместимость губчатых материалов на основе поли-L-лактида была исследована методами *in vitro* и *in vivo*. Проведенные эксперименты *in vitro* показали, что данные материалы соответствуют требованиям, предъявляемым к биосовместимым медицинским изделиям. Вместе с тем при подкожной имплантации образцов процесс резорбции имплантата сопровождается асептической воспалительной реакцией тканей, прилегающих к имплантату. Это проявляется из-за контактного травмирования мягких тканей организма.[2]

Литература

- [1] L. S. Nair and C. T. Laurencin, “Biodegradable polymers as biomaterials,” *Prog. Polym. Sci.*, vol. 32, no. 8–9, pp. 762–798, 2007.
- [2] V. I. Sevastianov *et al.*, “Biocompatible and Matrix Properties of Polylactide Scaffolds,” *Russ. J. Transplantology Artif. Organs*, vol. 20, no. 2, pp. 82–90, 2018.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1845)

Металлсодержащие нанокompозиты на основе сополимеров 1-винил-1,2,4-триазола и винилацетата

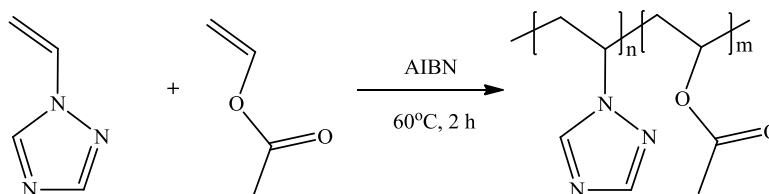
Ермакова Т.Г.^a, Кузнецова Н.П.^a, Коржова С.А.^a, Поздняков А.С.^a,
Зезин А.А.^b, Прозорова Г.Ф.^a

^a Иркутский институт химии им. А.Е.Фаворского СО РАН, Иркутск, Россия

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: aazezin@yandex.ru

Взаимодействием 1-винил-1,2,4-триазолола с винилацетатом в условиях свободнорадикального инициирования синтезированы новые функциональные сополимеры разного состава, обладающие растворимостью, пленкообразуемостью и высокой термостойкостью (300-330°C).



Изучены процессы формирования новых органо-неорганических нанокompозитов с наноразмерными частицами металлов (Ag, Cu, Fe), инкорпорированными в матрицу полученных сополимеров. Восстановление ионов металлов до нульвалентного состояния осуществляли химическим методом в полимерной среде с использованием боргидрида натрия, глюкозы и формальдегида в качестве восстановителя. Варьированием соотношения сополимера и металлического прекурсора, природы восстановителя, времени и температуры процесса разработаны оптимальные методы направленного синтеза высокостабильных полимерных нанокompозитов с разным содержанием и равномерным узкодисперсным распределением наночастиц металлов в полимерной матрице. Структуру и свойства полимерных нанокompозитов исследовали методами ИК, УФ, ЭПР спектроскопии, электронной микроскопии, рентгенофазового, атомно-абсорбционного и термогравиметрического анализа.

Синтезированные полимерные серебросодержащие нанокompозиты проявляют антимикробную активность в отношении различных грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов, характеризуются минимальными ингибирующими и бактерицидными концентрациями в диапазоне 0.5-12 и 0.5-18 мкг/мл, соответственно и являются перспективными для разработки новых биологически активных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-03-00168).

Получение кремнийорганических смол на основе сополимера регулярного строения

С. Н. Зимовец^a, М. Н. Темников^a, Музафаров А.М.^b

^a Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН

^b Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН

E-mail: sofi_zimovets@mail.ru

Кремнийорганические смолы нашли широкое применение в различных сферах человеческой деятельности благодаря своим уникальным свойствам: высокая термо- и термоокислительная стабильность, стойкость к УФ-излучению, широкий диапазон рабочих температур, биоинертность, перерабатываемость и др. Традиционные методы получения таких смол имеют ряд недостатков: композиционная неоднородность, трудность контроля свойств материала и плохая воспроизводимость. Решением этих проблем может стать сополимер с регулярным расположением функционального и нефункционального блоков. Функциональный блок отвечает за образование трехмерного полимера, содержащего остаточные функциональные группы, а нефункциональный блок обеспечивает целевой продукт необходимым набором физико-химических свойств.

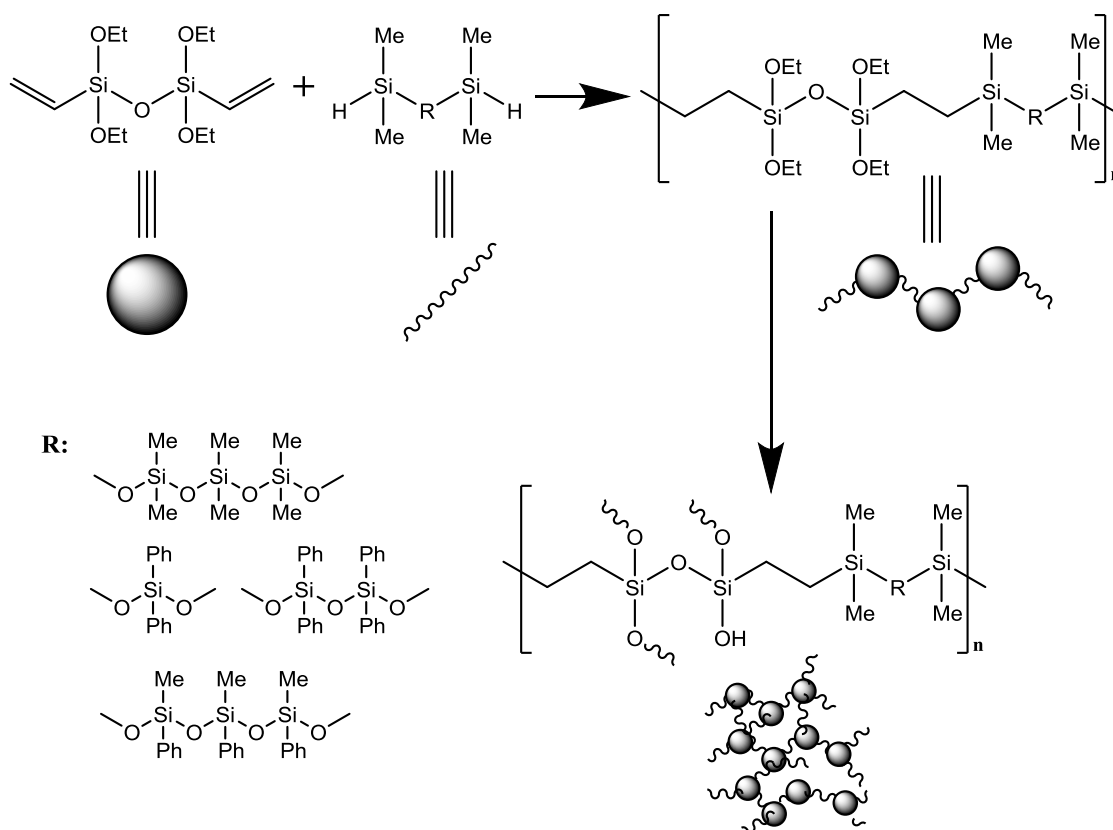


Рис 1. Схема синтеза

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№18-33-00909)

[1] M. N. Temnikov et al. // J. RSC Adv., 2016, 6, 105

Влияние содержания наполнителя в пленках полимерных нанокомпозитов поли-*n*-ксилилен – PbSe на спектральные свойства и структуру

Иванова .О.П.^a, Криничная Е.П.^a, Кривандин .А.В.^a, Завьялов С.А.^b, Журавлева Т.С.^a

^a *Институт биохимической физики им.Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия*

^b *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

E-mail: olga@deom.chph.ras.ru; zhur@deom.chph.ras.ru

Для пленок полимерных нанокомпозитов на основе поли-*n*-ксилилена и селенида свинца (ППК-PbSe), полученных методом твердофазного криохимического синтеза [1-2] на подложках из оптического кварца, проведены исследования при комнатной температуре оптических спектров поглощения, люминесценции и структуры в зависимости от содержания наполнителя PbSe ($C \sim 5-30$ об.%). Толщина пленок составила $d \sim 0.3$ мкм.

Измерения спектров поглощения проводили в интервале длин волн 200-900 нм. С увеличением концентрации наночастиц PbSe в спектрах наблюдался незначительный ($\sim 20-30$ нм) сдвиг в длинноволновую область, а в спектрах люминесценции при возбуждении длиной волны 240 - 260 нм получены немонотонные изменения интенсивности. Изменения в спектрах поглощения, возможно, обусловлены изменениями размеров наночастиц.

Исследования структуры нанокомпозитов методом рентгеновской дифракции в больших углах показали наличие рефлексов бета-формы ППК (дифракционный пик при $2\theta \approx 19.7^\circ$) и наночастиц PbSe (дифракционный пик при $2\theta \approx 28.6^\circ$). С ростом концентрации наполнителя изменялись интенсивности дифракционных пиков ППК и наночастиц PbSe: интенсивность пика бета-фазы ППК уменьшается, что указывает на изменение структуры матрицы ППК, а интенсивность пика от наночастиц PbSe увеличивается с ростом концентрации наполнителя и достигает максимального значения при $C \sim 30$ об.%. Дифракционный пик PbSe ($2\theta \approx 28.6^\circ$) имеет большую ширину, что указывает на присутствие в пленках ППК-PbSe низкоупорядоченных (аморфных) образований PbSe или очень мелкодисперсных кристаллических включений этого соединения (не исключено, что происходит образование PbSeO₄ или других сложных фаз PbSe). Наблюдаемые изменения спектральных свойств полимерных нанокомпозитов на основе поли-*n*-ксилилена и селенида свинца коррелируют со структурными.

Литература

- [1] Григорьев Е.И., Завьялов С.А., Чвалун С.Н. // *Российские нанотехнологии* **2006**, 1(1-2), 58
- [2] Криничная Е.П., Иванова О.П., Завьялов С.А., Григорьев Е.И., Журавлева Т.С. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **2012**, 1, 28

Синтез полиметилсилсесквиоксанов различной структуры

Калинина А. А.^а, Холодков Д. Н.^б, Мешков И. Б.^а, Пигалева М. А.^в, Эльманович И. В.^в,
Галлямов М. О.^в, Музафарова А. М.^{а,б}

^а *Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН, Москва, Российская Федерация*

^б *Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Российская Федерация*

^в *Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Российская Федерация*

kalinina@ispm.ru

Полиметилсилсесквиоксаны (ПМССО) получили широкое распространение и применение в качестве гидрофобизирующих, диэлектрических и антиабразивных покрытий, связующих и наполнителей [1]. Природа функциональных групп метилсиланов — высокоактивных хлори ацетоксисиланов и менее активных алкоксисиланов — определяет особенности технологических подходов к получению ПМССО с различными свойствами и для различных назначений — от нерастворимых, используемых обычно в качестве наполнителей полимерных материалов, до жидкостей, растворимых в органических растворителях и используемых для получения защитных слоев и связующих. В последнем случае особенно важна возможность управления ходом процесса поликонденсации для предотвращения гелеобразования и потери растворимости олигомерных ПМССО и полимеров. Ранее было показано, что наиболее эффективным и управляемым процессом получения растворимых олигомерных ПМССО является поликонденсация оргоалкоксисиланов в активной среде, представляющей собой безводную уксусную кислоту. Такой метод позволяет надежно получать высокомолекулярные растворимые ПМССО, не содержащие остаточных алкоксигрупп и пригодные для использования в качестве связующих. Однако для получения тонких покрытий такие соединения менее перспективны. Этот факт обуславливает продолжение поиска новых подходов для получения растворимых ПМССО с регулируемыми молекулярно-массовыми характеристиками.

Целью данной работы является исследование взаимодействия метилтриалкоксисиланов с водой и CO₂ под давлением и оценка влияния условий проведения процессов на состав продуктов реакции [3]. В докладе будут показаны перспективы данного метода для получения полиметилсилсесквиоксанов различной структуры.

Литература

- [1] Baney R. H.; Itoh M.; Sakakibara A.; Suzuki T. *Chemical Reviews*. **1995**, 95(5), 1409.
[2] Егорова Е. В.; Василенко Н. Г.; Демченко Н. В.; Татарина Е. А.; Музафаров А. М. *Докл. АН*. **2009**, 424, 200.
[3] Калинина А. А.; Холодков Д. Н.; Мешков И. Б.; Пигалева М. А.; Эльманович И. В.; Молодцова Ю. А.; Галлямов М. О.; Музафарова А. М. *Изв. АН. Сер. Хим.* **2016**, № 4, 1104.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-03-00867 и гранта Президента для государственной поддержки молодых российских ученых № МК-898.2017.3.

Новые реакционные олигоимиды с пропаргильными фрагментами

Колесников Т.И.^{a,b}, Цегельская А.Ю.^b, Дутов М.Д.^c, Кузнецов А.А.^{a,b}

^a МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва, Россия

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, г. Москва, Россия

^c Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, г. Москва, Россия

E-mail: tikitaket@gmail.com

Термопластичные реакционные олигомеры, способные перерабатываться через расплав и сшиваться с образованием трехмерной сетки, представляют интерес в качестве связующих для композиционных материалов. В настоящей работе методом высокотемпературной каталитической сополиконденсации в расплаве бензойной кислоты (БК) [1] синтезированы новые термопластичные олигоимиды с пропаргильными заместителями в боковой цепи (ОИП). Структура олигоимидов представлена на рисунке 1. Пропаргилсодержащий диамин синтезирован по реакции замещения нитрогруппы в тринитробензоле алкоголятом пропаргильного спирта с последующим восстановлением нитрогруппы до аминогруппы дихлоридом олова.

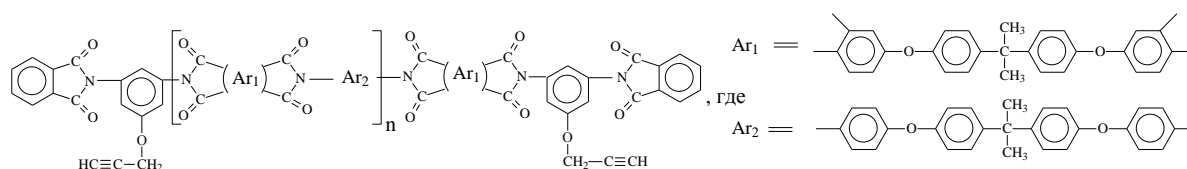


Рис. 1. Структура олигоимидов с пропаргильными фрагментами

Загрузку сомономеров проводили в 3 стадии. На первой стадии по реакции 2,2-бис-[(3,4-дикарбоксифеноксифенил)пропана (ДАН) с 2,2-бис-[(4-аминоксифеноксифенил)пропаном (ДАМ), в мольном соотношении 4:5 или 9:10 получали олигоимиды с концевыми ангидридными группами. На второй стадии без выделения полупродуктов в систему последовательно вводили пропаргилсодержащий диамин и фталевый ангидрид, до конечного соотношения мономерных единиц 9:10 (или 4:5):2:2. Синтезированные ОИП охарактеризованы методами ИК-спектроскопии, ДСК, ТМА, ТГА. Олигомеры растворимы в органических растворителях. Широкое технологическое окно (разница между температурой размягчения (190°C) и температурой сшивки (260-290°C)) предполагает возможность получения препрега с последующими операциями термопрессования и пост-термообработки для формирования трехмерно сшитой структуры.

Литература

[1] Kuznetsov A.A. *High Performance Polymers*. **2000**, 12, 445-460.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 16-03-01119

New pyridyl-phenylene macromolecular compounds as stabilizing agents for catalysis

Korolkova A.A.^a, Torozova A.S.^b, Serkova E.S.^b, Shifrina Z.B.^b

^a Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

^b A.N.Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: korolkova.angelina@yandex.ru

Nanoparticles (NP) have been proven to be beneficial in catalysis [1], [2]. As a carrier for catalysts ensuring the stabilization of catalytic NP and their accessibility to the substrate, aromatic dendritic pyridine-containing systems can be used, they were previously demonstrated to be effective stabilizing agents in the synthesis of NP of various types [3].

In this work new pyridyl-phenylene macromolecular compounds were synthesized. Resulting dendrimer and polymer structures are based on new «building block» (See Fig.1, monomer AB2). Different conditions were investigated. According to size exclusion chromatography the highest molecular weight for polymer was 56000.

The 2nd generation dendrimer of new structure was synthesized (See Fig.2).

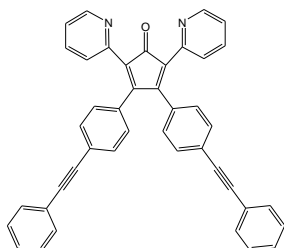


Fig.1. «Building block» monomer AB2

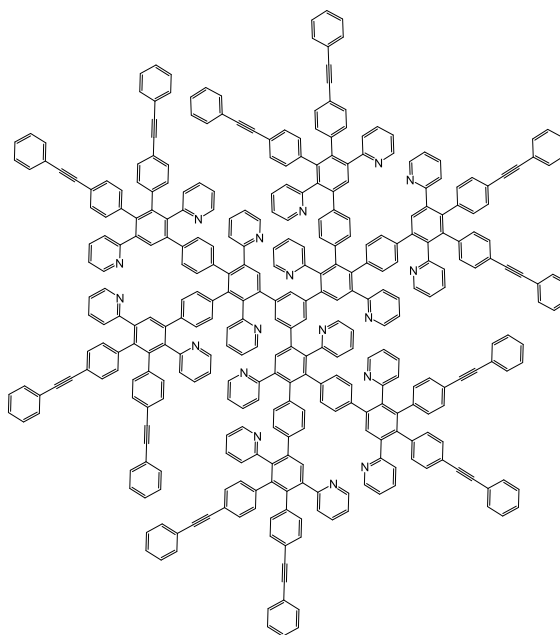


Fig.2. The 2nd generation dendrimer for the catalysts support

Synthesis of novel catalysts was performed. The formation of NP was provided by the interaction of metal compounds with coordinating (pyridine) groups of macromolecular compounds followed with the reduction of complexes.

References

- [1] Behraves, E.; Kumar, N.; Salmi, T. *Journal of Catalysis* **2017**, 353, 223-238.
- [2] López, M.; Simakova, O.; Murzin, Yu. *Applied Catalysis A: General* **2015**, 504, 248-255
- [3] Yuzik-Klimova, E. Yu., etc. *RSC Adv.* **2014**, 4, 23271-23280

This work was supported by RFBR according to the research project № 18-33-00609.

Молекулярно-динамический анализ топологии переплетения линейных полимеров в контакте с углеродными наночастицами

Логунов М.А.^{a, b}, Орехов Н.Д.^{a, b}, Стегайлов В.В.^{a, b}

^aМосковский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Россия

^bОбъединенный институт высоких температур, г. Москва, Россия

E-mail: mikhail.logunov@phystech.edu

Свойства полимерных цепей, находящихся в контакте с поверхностью наноразмерного наполнителя, неизбежно отличаются от свойств чистого полимера. Протяженные нановключения, воздействуя на подвижность молекул полимера, создают дополнительные топологические ограничения.

В рамках метода молекулярной динамики исследуется структура полимерного нанокompозита на примере модельной системы полиэтиленовой матрицы с углеродными нановключениями: нанотрубками и графеновыми листами. С помощью методики расчета примитивного пути [1] анализируется изменение топологии переплетения полимерных цепочек в ходе одноосного деформирования как для случая чистого полиэтилена, так и для нанокompозита (рисунок 1). Продемонстрировано, что наличие протяженных наночастиц замедляет процесс распутывания узлов между полимерными цепочками. На основе полученных данных делается попытка связать наблюдаемые изменения в упругих свойствах и динамике образования пор [2], возникающие при добавлении наночастиц, с процессом распутывания межцепочечных узлов.



Рис. 1. Расчетная ячейка с чистым полиэтиленом (слева), его примитивный путь (по центру), примитивный путь для композита с углеродными нанотрубками (справа).

Литература

1. Sukurmaran S.K., Grest G.S., Kremer K., Everaers R. Identifying the primitive path mesh in entangled polymer liquids // *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics* 2005 V. 43 N. 8 PP. 917 – 933
2. Logunov M. A., Orekhov N. D. Molecular dynamics study of cavitation in carbon nanotube reinforced polyethylene nanocomposite // *Journal of Physics: Conference Series.* – IOP Publishing, 2018. – Т. 946. – №. 1. – С. 012044

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-50-00124

Изменение механических свойств композиционных полимерных стоматологических материалов полученных методом 3D печати в условиях форсированного теплового старения

Крашенинников С.В.^a, Левченко И.М.^b, Луканина К.И.^a, Григорьев Т.Е.^a,
Чвалун С.Н.^a, Арутюнов С.Д.^b

^a *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Российская Федерация*

^b *«Московский государственный медико-стоматологический университет имени А.И. Евдокимова» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Москва, Российская Федерация*

E-mail: Krashennikov_SV@nrcki.ru

Аддитивные технологии и в частности 3D печать находят все большее применение в повседневной жизни. В частности, в стоматологии в последнее время, конструкции, изготовленные из полимерных композиционных материалов (ПКМ), на основе УФ-отверждаемых акрилатов по технологии 3D принтинга начинают вытеснять аналоги, получаемые по традиционным технологиям литья и фрезерования, прежде всего это относится к временным коронкам и мостовидным протезам различной конфигурации. Очевидно, что это объясняется рядом преимуществ, прежде всего скоростью изготовления и относительной дешевизной процесса. Важнейшим является вопрос, обеспечивают ли эти материалы удовлетворительный уровень механических свойств в течение всего срока эксплуатации (1 год).

В работе были исследованы два материала, наиболее распространенные на Российском рынке стоматологических услуг: NextDent C&B Micro Filled Hybrid (Великобритания) и Detax Freeprint temp UV (Германия). Образцы размером 64x10x3 мм были изготовлены на 3D принтерах в условиях рекомендованных производителями. Регламентированным методом для исследования механических свойств стоматологических материалов, согласно ГОСТ 31572-2012 является трехточечный изгиб, расстояние между опорами 50 мм, скорость 5 мм/мин. По результатам испытания определяли модуль упругости, прочность и деформацию разрушения при изгибе. Для исследования стабильности механических характеристик изучаемых материалов во времени они были ускоренно состарены по алгоритму, установленному ASTM F 1980 при 60 градусах Цельсия.

В результате проведенных исследований были получены зависимости изменения основных механических характеристик от времени эксплуатации. У исследованных материалов были обнаружены существенные различия в характере изменения прочности и деформации разрушения от времени. На основе полученных данных были сформулированы рекомендации по особенностям проектирования стоматологических конструкций (временных коронок и мостовидных протезов), изготавливаемых методом 3D печати.

**Высокопористые губчатые материалы на основе хитозана –
перспективный матричный материал для применения в тканевой
инженерии**

Крашенинников С.В.^a, Луканина К.И.^a, Григорьев Т.Е.^a

^a *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт», Москва,
Российская Федерация*

E-mail: Krashennikov_SV@nrcki.ru

Тканевая инженерия открывает новые возможности в лечении пациентов, поскольку помогает разрешить ряд проблем существующих в трансплантологии. Основной сложностью при изготовлении искусственного каркаса является необходимость применения материала с физико-механическими показателями, соответствующими таковым у замещаемой нативной ткани. Важнейшей характеристикой каркаса является его морфология, которая должна способствовать выживаемости и пролиферации клеток, она также индивидуальна для каждого из органов. Возможность варьировать в достаточно широких пределах морфологию и физико-механические свойства губчатых материалов на основе хитозана делает их достаточно универсальными матриксами для применения в тканевой инженерии. Исследованию влияния условий изготовления на физико-механические характеристики и морфологию конечных изделий посвящена эта работа.

Для изготовления использовали два вида хитозан, отличающихся молекулярной массой: хитозан с молекулярной массой 600 кДа и хитозан с молекулярной массой 80 кДа. В качестве сшивающего агента использовали глутаральдегид в концентрации 0,5% и 1,0%. Для расширения диапазона свойств матриксов их изготавливали из растворов хитозана разной концентрации: 0,5%, 0,7% и 1%. Трехмерные высокопористые губчатые материалы, изготавливали методом заморозки и последующей лиофильной сушки. Исследования морфологии полученных образцов проводились на оптическом микроскопе на просвет. Исследование физико-механических свойств было произведено на испытательной машине Instron 5965 в режиме одноосного сжатия.

Было показано, что варьируя молекулярную массу, количество сшивающего агента и начальную концентрацию раствора полимера можно получить губчатый материал максимально соответствующий по механическим свойствам как мягким тканям с низким модулем упругости (печень, селезенка, различные железы), так и тканям с достаточно высокой упругостью (соединительные ткани, диафрагма). Даже при минимальной концентрации полимера в исходных растворах, изготовленные образцы были самоподдерживающимися. При концентрации хитозана с молекулярной массой 600 кДа в растворе свыше 1% наблюдали, скачкообразный рост модуля Юнга у получаемых образцов, связанный с изменением морфологии материала. Исследование морфологии полученных материалов показало, что уменьшение молекулярной массы полимера приводит к уменьшению размера пор у образцов с изотропными порами.

Влияние формы наполнителя на электрореологические свойства полимерных жидкостей

Кузнецов Н.М.^a, Столярова Д.Ю.^{a,b}, Бакиров А.В.^{a,b}, Белоусов С.И.^a, Чвалун С.Н.^{a,b}

^a Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: kyz993@yandex.ru

В последние десятилетия большой интерес исследователей привлекают так называемые «умные» материалы, способные обратимо изменять свои свойства под действием внешних факторов, таких как температура, изменение рН среды, приложение магнитного или электрического поля и др. Одним из таких материалов являются электрореологические жидкости, обычно представляющие собой гетерогенные системы, состоящие из непроводящей жидкой среды и легко поляризуемых частиц наполнителя [1]. Электрореологическим эффектом называют изменение реологического поведения образца при приложении электрического поля, что выражается в существенном возрастании значений вязкости, появлению и возрастанию значений предела текучести на кривых течения (рис. 1). Величина эффекта существенно зависит от различных факторов: природы дисперсионной среды и наполнителя – разницы в значениях диэлектрической проницаемости и проводимости [2], седиментационной устойчивости наполнителя, размера и формы частиц, применения активирующих добавок и др. В работе использовали суспензии на основе полидиметилсилоксана наполненного частицами различной формы – слоистыми алюмосиликатами монтмориллонитом (пластины) и галлуазитом (трубки). Проведено комплексное исследование реологических характеристик вне и под действием электрического поля, а также выявлена взаимосвязь эффекта с концентрацией наполнителя и величиной напряженности электрического поля, диэлектрическими характеристиками суспензий, их седиментационной устойчивостью, формой и структурной организацией частиц наполнителя в дисперсионной среде, а также процессами структурирования суспензий под действием электрического поля.

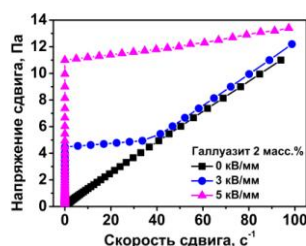


Рис. 1. Кривые течения 2 масс.% суспензии галлуазита при различной напряженности электрического поля.

Литература

- [1] Кузнецов Н.М., Белоусов С.И., Бессонова Н.П., Чвалун С.Н. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* **2018**, 61 (6), 41.
- [2] Kuznetsov N.M., Shevchenko V.G., Stolyarova D.Yu, Ozerin S.A., Belousov S.I., Chvalun S.N. *J. Appl. Polym. Sci.* **2018**, 135, 46614.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 18-03-00078 А и 18-33-01123 мол_а.

Исследование структурной организации дисперсной фазы электрореологических жидкостей под действием электрического поля

Кузнецов Н.М.^a, Столярова Д.Ю.^{a,b}, Бакиров А.В.^{a,b}, Белоусов С.И.^a, Чвалун С.Н.^{a,b}

^a Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: kyz993@yandex.ru

Электрореологический эффект заключается в резком и обратимом изменении вязкости материала под действием электрического поля. Электрореологические жидкости представляют собой дисперсные системы, обычно состоящие из непроводящей дисперсионной среды и легко поляризуемых частиц наполнителя. Механизм эффекта связывают с образованием протяженных колончатых структур между электродами из частиц наполнителя под действием электрического поля (рис. 1). На прочность образуемых структур существенное влияние оказывают размеры и форма частиц, однако, ориентация отдельных частиц в колонне до сих пор малоизучена. Одним из перспективных наполнителей для электрореологических жидкостей являются слоистые алюмосиликаты, которые обладают большим характеристическим отношением и могут образовать перколяционную сетку в растворе при концентрациях – менее 5 масс.%. Целью данного исследования являлось изучение ориентации частиц наполнителя под действием электрического поля. Суспензию частиц в парафине при температуре выше температуры плавления помещали в специальную форму, к которой прикладывали электрическое поле, после чего жидкость охлаждали жидким азотом. Ориентацию частиц в полученных пленках исследовали методом рассеяния рентгеновских лучей. В качестве наполнителей использовали различные модифицированные монтмориллониты и галлуазит. В работе обсуждаются влияние формы наполнителя и природы модификаторов на процессы ориентации частиц.

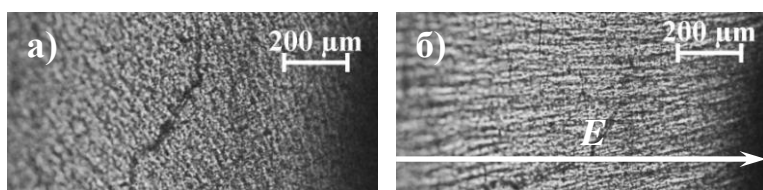


Рис. 1. Снимки оптической микроскопии частиц монтмориллонита в полидиметилсилоксане вне (а) и под (б) действием электрического поля.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 18-03-00078 А и 18-33-01123 мол_а.

Новые трифениламинсодержащие донорно-акцепторные олигомеры: синтез, свойства и применение

Лупоносов Ю.Н.^{a, b}, Солодухин А.Н.^a, Балакирев Д.О.,^a Дмитрияков П.В.^c, Перегудова С.М.,^a Чвалун С.Н.^{a, c}, Пономаренко С.А.^{a, b}

^a Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, РФ

^b Химический факультет МГУ им М.В. Ломоносова, Москва, Россия

^c НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: luponosov@ispm.ru

В настоящее время донорно-акцепторные органические полупроводники различной молекулярной архитектуры активно исследуются с целью их использования в качестве функциональных материалов в устройствах органической электроники, например, органических и гибридных солнечных батареях, светоизлучающих диодах и др. Основными недостатками подобных соединений являются недостаточно высокая стабильность и сложный синтез. В данной работе разработаны основные принципы дизайна и синтетические подходы к получению нового класса донорно-акцепторных олигомеров линейной, звездообразной, симметричной и несимметричной архитектуры с повышенной стабильностью, содержащих алкил- или фенилдициановинильные группы в качестве электроакцепторных [1-6]. Также в работе представлены новые люминесцентные молекулы на основе трифениламина. Для выявления взаимосвязи структура-свойства в подобном типе олигомеров термические, оптические, электрохимические и фотовольтаические свойства были исследованы в зависимости от разных параметров химической структуры. Сравнение свойств полученной библиотеки соединений с аналогами, имеющими обычные дициановинильные группы позволило вывить ряд важных преимуществ первых, включая повышенную стабильность, более высокую растворимость и эффективность в устройствах.

Литература

- [1] Luponosov Y. N., Min J., Ameri T., Brabec C., Ponomarenko S. , *Organic Electronics*, **2014**, 3800.
- [2] Luponosov Y. N., Min J., Khanin D. A., Baran D., Peregudova S. M., Dmitryakov P.V., Chvalun S. N., Ameri T., Brabec C.J., Ponomarenko S. A., *J. Photon. for Energy*, **2015**, 5, 057213
- [3] Luponosov Yu. N., Min J., Bakirov A.V., Dmitryakov P.V., Chvalun S. N., Peregudova S. M., Ameri T., Brabec C. J., Ponomarenko S. A., *Dyes and Pigments*, **2015**, 122, 213.
- [4] Luponosov Y.N. , Min J., Solodukhin A.N., Bakirov A.V., Shcherbina M.A., Peregudova S.M., Cherkaev G.V., Chvalun S.N., Brabec C.J., Ponomarenko S.A., *J. Mater. Chem. C*, **2016**, 4, 7061
- [5] Luponosov Y. N., Solodukhin A. N., Mannanov A. L., Trukhanov V.A., Bakirov A. V., Shcherbina M. A., Chvalun S. N., Paraschuk D. Yu., Ponomarenko S. A., *Organ. Electron.*, **2017**, 51, 180.
- [6] Kozlov O. V., Luponosov Y. N., Solodukhin A. N., *Organ. Electron.*, **2018**, 53, 180.
- [7] Solodukhin A. N., Luponosov Y. N., Buzin M. I., Peregudova S. M., Svidchenko E. A., Ponomarenko S. A., *Mendeleev Communications*, **2018**, 28, (4), 415.

Синтез и исследование звездообразных олигомеров выполнены при финансовой поддержке РФФ (проект 14-13-01380), дизайн синтез и характеристика несимметричных молекул выполнены при финансовой поддержке РФФ (17-73-10485). Синтез люминесцентных молекул поддержан грантом Президента РФ (МК-933.2017.3). Работа выполнена в рамках ведущей научной школы НШ-5698-2018.3.

Исследование механических свойств мононитей на основе полилактида и наночастиц хитина, модифицированных полиэтиленгликолем

К.В.Малафеев^{a*}, О.А. Москалюк^c, В.Е. Юдин^{a,b}, Е.Н.Попова^{a,b}, В.Ю. Елоховский^b,
Е.М. Иванькова^b, Р. Morganti^d

^a*Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия*

^b*Институт Высокмолекулярных Соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия*

^c*Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, Россия*

^d*Университет Неаполя, Неаполь, Италия*

*e-mail: kostya_malafeev@mail.ru

Биодеградируемые полимеры имеют огромный потенциал в расширении сфер их применения в промышленности: автомобилестроение, пищевая упаковка, посуда и различная тара. Но данные материалы не обладают необходимым комплексом эксплуатационных свойств: прочность, модуль упругости, деформация до разрыва. Для того, чтобы заменить синтетические полимеры, используемые в этих областях. Эту проблему можно решить путем создания композиционных материалов на основе биодеградируемых полимеров и дисперсных наполнителей различной формы и химической природы. Одним из наиболее перспективных биодеградируемых полимерных материалов является полилактид (ПЛА). ПЛА - это алифатический полиэфир, мономером которого является молочная кислота. Сырьем для его производства являются природные возобновляемые ресурсы, такие как сахарный тростник и кукуруза. На сегодняшний день ПЛА используется для производства изделий с коротким сроком службы (пищевая упаковка, одноразовая посуда, пакеты, различная тара), а также в медицине, для производства хирургических нитей и штифтов. В работе использовался ПЛА марки Nature Works 2003D. В качестве наполнителя использовались наночастицы хитина, модифицированные полиэтиленгликолем, полученные в университете города Неаполя, Италия.

В результате выполнения данной работы была разработана лабораторная технология получения по расплавному методу композиционных мононитей на основе полилактида и наночастиц хитина, модифицированных полиэтилен гликолем. Были получены лабораторные образцы мононитей со степенью ориентационной вытяжки 4 и 6 раз и различным содержанием наполнителя от 0 до 10 масс.%.

Проведенные механические испытания на разрыв показали, что при малых добавках хитина модифицированного ПЭГ наблюдается повышение таких механических характеристик как прочность и модуль упругости. Добавление частиц не оказывает влияния на деформацию до разрыва.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ 14-33-00003

Использование нетканых материалов, получаемых методом электроформования расплава полилактида, для удаления масляных загрязнений из воды

Малахов С.Н., Чвалун С.Н.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: s.malakhov@mail.ru

В последние десятилетия продукция на основе углеводородного сырья является важнейшим компонентом как промышленности, так и транспортной индустрии. На каждом из этапов работы с углеводородами (добыча, транспортировка, переработка, хранение, использование, утилизация) существует риск их утечки, что приводит к загрязнению окружающей среды. Многие объекты, занимающиеся добычей, переработкой, хранением нефти и продуктов ее переработки, располагаются в акваториях мирового океана. При чрезвычайных происшествиях техногенного характера на данных объектах (разрыв трубопроводов на дне водоемов, крушения танкеров с нефтепродуктами, аварии на нефтяных платформах в океане и т.д.) становится особенно актуальным вопрос о быстром, безопасном и недорогом способе удаления загрязнений с поверхности воды. Одним из перспективных типов сорбентов для использования в таких ситуациях являются нетканые материалы, получаемые методом электроформования.

В работе электроформованием расплава полилактида получены нетканые материалы со средним диаметром волокон 7.1 мкм, рассчитанным из данных сканирующей электронной микроскопии. С использованием рентгеноструктурного анализа в больших углах было установлено, что в процессе электроформования надмолекулярная структура полимера претерпевает существенные изменения: быстрое охлаждение в условиях вытяжки в сильном электрическом поле приводит к образованию в нетканых материалах исключительно аморфной фазы, в то время как исходный гранулярный полимер характеризуется наличием термодинамически стабильных кристаллов α -формы. Отжиг полимера позволяет восстановить кристаллическую структуру полилактида в волокне.

Максимальная сорбционная емкость полученных микроволокнистых матриц по моторному маслу составляет 85 г/г, что существенно выше, чем для стандартных коммерчески доступных сорбционных материалов, емкость которых составляет, как правило, 10-20 г/г [1]. В то же время, сорбционная емкость полилактидных материалов снижается после отжига, что может быть связано с их усадкой.

Литература

[1] Wei Q.F. et al. *Marine Pollution Bulletin*. **2003**, 46, 780.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-73-00328).

Нетканые композиционные материалы на основе полипропилена и карбоната кальция, полученные электроформованием расплава полимера

Малахов С.Н., Чвалун С.Н.

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: s.malakhov@mail.ru

В настоящее время полимерные нанокомпозиты являются объектом пристального внимания как с научной, так и с практической точек зрения. Введение небольшого количества наполнителя в полимерную матрицу позволяет существенно изменить характеристики полимера – механические, электрофизические, тепловые, барьерные – либо придать ему иные качества, например, антибактериальные или ранозаживляющие. При этом доля вводимых добавок в этих случаях невелика – от долей процента до единиц процентов. Кроме того, наполнение полимеров может быть использовано для снижения себестоимости выпускаемых изделий – в этом случае доля вводимой добавки может достигать до 50-60%, а сама она должна быть недорогой. Одним из наиболее распространенных наполнителей подобного рода является карбонат кальция.

В рамках данной работы были получены нетканые материалы методом электроформования из расплавов полипропилена, наполненного карбонатом кальция со степенью наполнения 5-50%. Было показано, что введение карбоната кальция приводит к росту вязкости расплава и увеличению электропроводности полимера. Изменение реологических и электрофизических свойств расплава вследствие добавления минерального наполнителя приводит к тому, что средний диаметр формируемых волокон увеличивается по мере роста доли карбоната кальция в образцах, при этом введение стеарата натрия позволяет существенно снизить средний диаметр волокна.

Методами рентгеноструктурного анализа в малых и больших углах было установлено, что надмолекулярная структура исходных полимеров и композитов характеризуется преобладанием кристаллов кристаллы стабильной α -формы, в то время как нетканые материалы демонстрируют наличие лишь мезофазы. Кроме того, было обнаружено, что введение карбоната кальция приводит к возрастанию краевых углов смачивания пленочных образцов, но не влияет на нетканые материалы, демонстрирующие супергидрофобные свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых-кандидатов наук (проект МК-3783.2018.3)

Получение нановолокон методом электроформования водных растворов соли полиаминокислоты, наполненной углеродными наночастицами

Матреничев В.В., Мягкова Л.А., Светличный В.М., Власова Е.Н., Елоховский В.Ю., Ваганов Г.В., Иванькова Е.М., Юдин В.Е.

Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: acrossq@gmail.com

Осуществлен синтез водорастворимой соли полиаминокислоты на основе пиромеллитового диангида (ПМ), диаминодифенилового эфира (ДАДФЭ) и триэтиламина (ТЭА). Строение соли подтверждено методами ИК- и ЯМР-спектроскопии. Исследована электропроводность, поверхностное натяжение и вязкость растворов различных концентраций. Получены композитные растворы соли ПМ-ДАДФЭ/ТЭА, содержащие одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ). Концентрация ОУНТ в растворе варьировалась в пределах 0.1-1.0 мас. %. При проведении процесса электроформования для снижения поверхностного натяжения и вязкости в композитный раствор соли был добавлен этиловый спирт. Из растворов композиций методом электроформования получены нановолокнистые материалы. Структура и морфология нанокompозитных нановолокон исследованы с помощью электронной сканирующей (СЭМ) микроскопии. На представленной микрофотографии (Рис.1) видно, что диаметр волокон составляет от 60 до 400 нм, волокно однородное по всей длине.

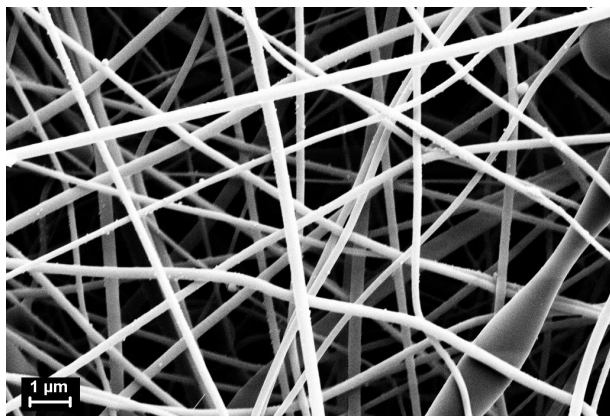


Рис. 1. СЭМ образца нановолокон полученных из водного раствора соли ПАК ПМ-ДАДФЭ/ТЭА, наполненной ОУНТ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 18-03-00568-а

Проводящие композиционные полимерные материалы на основе полимерных нановолокон и полипиррола

В. В. Матреничев^a, М. А. Шишов^b, П. В. Попрядухин^{a,b}, И. Ю. Сапурина^b,
Е. М. Иванькова^{a,b}, И. П. Добровольская^{a,b}, В. Е. Юдин^{a,b}

^a Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

^b Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

* E-mail: acrossq@gmail.com

В последние годы материалы на основе нановолокон находят все более широкое применение в медицине и тканевой инженерии, при этом большой интерес представляют биосовместимые электропроводящие матрицы. Это расширяет возможности применения материала, позволяя управлять процессами массопереноса и сорбции. Эффективным методом повышения электропроводности является модификация поверхности полимерных нановолокон электропроводящими полимерами, такими как полианилин, полипиррол (ППи), политиофен. Целью работы – получение биосовместимого электропроводящего материала на основе нановолокон из полимера-диэлектрика, модифицированного электропроводящим ППи, а также исследование его структуры и свойств.

Для получения нановолокон методом электроформования использован сополиамид алифатического строения (СПА) — сополимер ϵ -капролактама и гексаметилендиаминадипината с соотношением компонентов 40:60, молекулярной массой $M_w = 30$ кДа, $T_{пл} = 188^\circ\text{C}$ (ООО «Анид», Россия). Растворителем СПА являлась водоспиртовая смесь с соотношением этанол/вода = 80/20 об%, что делает процесс электроформования экологически безопасным. Коэффициент поверхностного натяжения раствора при концентрации СПА 18 мас% составлял $30 \text{ Н}\cdot\text{м}^{-1}$, что оптимально для электроформования. Электроформование проводили при напряженности электрического поля $E = (1.5-2.5)\cdot 10^5 \text{ В}\cdot\text{м}^{-1}$ и расстоянии между электродами 20 см, скорость подачи растворов составляла $Q = (28-70)\cdot 10^{-5} \text{ см}^3\cdot\text{с}^{-1}$. Нановолокна СПА, полученные данным способом не содержат цитотоксичных остатков растворителя, сохраняют структуру и свойства в водных средах в течение длительного времени. Модификацию поверхности нановолокон ППи проводили с методом окислительной полимеризации пиррола (ООО «Лабораторная техника», Россия) на поверхности нановолокон СПА с использованием хлористого железа в качестве окислителя.

Методом сканирующей электронной микроскопии показано, что на поверхности модифицированных нановолокон СПА диаметром 200-500 нм, сформировано сплошное покрытие из ППи, при этом пористая структура композиционного материала сохраняется. Покрытие представляет собой монослой плотно прилегающих друг к другу сферических частиц диаметром 50-80 нм и имеет ту же толщину. Такие частицы — результат нуклеации и роста ППи на поверхности волокон, поэтому нанослой имеет хорошую адгезию к СПА. Методом ИК-спектроскопии показано, что ППи в составе композита находится в окисленной электропроводящей форме. Композиционный материал имеет удовлетворительные механические свойства, его поверхностное электросопротивление составляет 0,4 кОм, что всего лишь на порядок превышает сопротивления исходного ППи.

Авторы благодарят РНФ, грант № 14-33-00003 за финансовую поддержку в проведении исследования.

Полиэлектrolитные комплексы на основе полиакриловой кислоты и би- и тетрафункциональных амфифильных веществ

Мечтаева Е.В.^а, Гаврилова Д.А.^а, Фетин П.А.^а, Зорин И.М.^а, Билибин А.Ю.^а

^а Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: mechtaeva.lisa@gmail.com

Полиэлектrolиты в результате взаимодействия с поверхностно-активными веществами, многозарядными неорганическими ионами или противоположно заряженными полиэлектrolитами и олигоэлектrolитами образуют соединения, называемые полиэлектrolитными комплексами (ПЭК). ПЭК находят применение в качестве флокулянтов, ионоселективных мембран, при создании антибактериальных покрытий. Такие соединения могут быть чувствительны к условиям окружающей среды, в частности рН среды, а также могут быть получены из биосовместимых и биodeградируемых или легко выводимых из организма полимеров. Это делает их интересными объектами для исследований, направленных на разработку систем доставки лекарств с контролируемым высвобождением.

Системы направленной доставки лекарств разрабатываются для снижения негативного влияния фармацевтических препаратов на здоровые клетки организма, поэтому при введении в состав лекарства дополнительных компонентов (носителей, векторов, маркеров) необходимо учитывать их собственную токсичность и стараться минимизировать их количество. С этой точки зрения, представляет интерес получение ПЭК непосредственно между полиэлектrolитом и лекарственным препаратом. В данной работе предложено использование производных биологически-активных веществ и алифатических диолов либо дикарбоновых кислот в роли ионных сшивателей полиэлектrolитов. В качестве модельных объектов для изучения таких взаимодействий были выбраны полиакриловая кислота и би- и тетрафункциональные амфифильные вещества, потенциально способные к биоразложению, содержащие гидрофобную развязку на основе 1,6- и 1,10-диолов или дикарбоновых кислот, а в качестве функциональных фрагментов звенья холина и бетаина, а также природных аминокислот, таких как: глицин, валин и лизин.

В результате было установлено влияние различных фрагментов структуры эфиров аминокислот, холина и бетаина на возможность и условия образования нерастворимых в воде полиэлектrolитных комплексов. Изучен состав, структура и морфология получаемых соединений. Установлено, что в зависимости от соотношения и концентрации реагентов в растворе можно получать продукт как в виде устойчивых коллоидных суспензий сферических частиц, так и в виде однородных плёнок. Кроме этого, показана возможность варьирования размеров частиц комплекса путём изменения концентрации полимера в растворе и соотношения количеств функциональных групп полимера и сшивателя.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты № 18-33-00618 мол_а, 18-03-00629, 16-03-00803) и ресурсных центров СПбГУ: РЦ «Методы анализа состава вещества», РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования», РЦ «Магнитно-резонансные методы исследования», МРЦ по направлению «Нанотехнологии».

Синтез привитых со-полиимид-полисилоксанов

Орлова А.М.^{a, b}, Солдатова А.Е.^a, Цегельская А.Ю.^a, Миленин С.А.^a, Шрагин Д.И.^a,
Кузнецов А.А.^a

^a ИСПМ РАН им. Ениколопова, г. Москва, Россия

^b МИРЭА-Российский Технологический Университет, г. Москва, Россия

E-mail: so2896@mail.ru

Полиимид-полисилоксановые (ПИ-ПДМС) полимерные системы являются очень интересными объектами как в фундаментальном, так и в прикладном аспектах. Введение силоксановых сегментов улучшает такие характеристики как термосвариваемость, адгезия, мембранные свойства и т. д. Наиболее интересными ПИ-ПДМС являются сополимеры с микрофазовым разделением. При анализе различных работ, было установлено, что введение блоков ПДМС в количестве не более 30% приводит к микрофазовому разделению [1].

Задачей представленного исследования является синтез привитых ПИ-ПДМС сополимеров и исследование их фазовой морфологии.

Синтез производился трехстадийным методом. На первом этапе исследования методом высокотемпературной поликонденсации в расплаве бензойной кислоты [2] был синтезирован полиимид (ПИ) с функциональной карбоксильной группой на основе 3,5-диаминобензойной кислоты (ДАБК). Далее на полученный полиимид методом прямой конденсации в присутствии трифенилфосфита (ТФФ) произвели прививку аллиламина на карбоксильную группу ПИ. На третьем этапе на модифицированный полиимид по двойной связи боковой цепи привили полидиметилсилоксан (ПДМС) методом каталитического гидросилилирования. Синтезированные сополиимидиды были охарактеризованы методами ^1H -ЯМР-спектроскопии, ИК-спектроскопии, ДСК. Наличие двух температур стеклования у привитого сополимера свидетельствует о микрофазовом разделении.

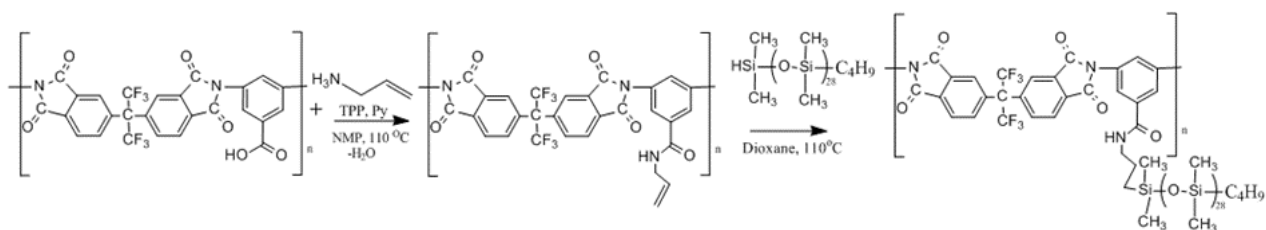


Схема 1. Схема синтеза привитого со-полиимид-полисилоксана

Литература

[1] Ghosh A., Komber H., Haubler L., Schneider K., Voit B. *Macromol. Mater. Eng.* 2011, 296 (5), 391.

[2] Kuznetsov A.A., *High Perform Polym.* 2000, 12, 445.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-03-01119.

Синтез полимеризацией *in situ* и свойства композиций на основе полипропилена и нанокремнеземных наполнителей

Палазник О.М.^a, Недорезова П.М.^a, Клямкина А.Н.^a, Польщиков С.В.^a, Шевченко В.Г.^b,
Крашенинников В.Г.^a, Монахова Т.В.^c

^a *Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия*

^b *Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова Российской академии наук, Москва, Россия*

^c *Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля, Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: siloxia@rambler.ru

С использованием металлокомплексных каталитических систем (рац- $\text{Me}_2\text{Si}(2\text{-Me-4-PhInd})_2\text{ZrCl}_2/\text{MAO}$ или $\text{TiCl}_4/\text{Et}_2\text{AlCl}$) в среде жидкого пропилена синтезированы композиты на основе ПП с нанокремнеземными наполнителями различного типа: графеновыми нанопластинами, полученными термическим восстановлением оксида графита (ТРОГ), многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ), а также бинарными наполнителями, включающими ТРОГ и многостенные (МУНТ) или одностенные (ОУНТ) нанотрубки. Удельная поверхность использованных наполнителей составляла 200-600 м²/г.

Изучено влияние типа нанонаполнителя на термо- и электрофизические характеристики композиций, механические свойства, термостойкость и устойчивость к термоокислительному разложению.

Полученные данные показали, что введение углеродных наночастиц практически не влияет на температуру плавления, но приводит к увеличению температуры кристаллизации полипропилена, что связано с нуклеирующим действием наполнителей.

Уже при малом содержании наполнителей отмечается увеличение температуры максимума скорости потери массы, свидетельствующее об увеличении термостабильности композиционных материалов по сравнению с чистым полипропиленом. Показано, что использованные наполнители являются ингибиторами термоокислительного разложения полипропилена. Наблюдается увеличение индукционного периода термоокислительной деструкции и падение скорости окисления.

Для композитов характерно увеличения модуля упругости при растяжении (на 30-40 % при содержании наполнителя 3-4 %мас.).

Порог перколяции для композитов на основе ТРОГ составил 3 %мас., на основе МУНТ около 3,5 %мас., для композитов ТРОГ+МУНТ около 2 %мас. Показано, что по сравнению с композитами на основе ТРОГ, при использовании бинарных наполнителей ТРОГ+МУНТ или ТРОГ+ОУНТ близкие значения проводимости достигаются при меньшей концентрации наночастиц.

Определены коэффициенты отражения электромагнитных волн СВЧ-диапазона при различных частотах. Полученные значения позволяют рекомендовать данные материалы для использования в качестве поглощающих экранов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-33-00573 мол_а.

Синтез полидиметилсилоксанов с гидроксильными группами, распределенными по цепи

Поляков Г.В.^a, Щеголихина О.И.^b, Калинина А.А.^a, Музафаров А.М.^{a, b}

^a Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С.Ениколопова, Москва, Россия

^b Институт Элементоорганических Соединений им. А.Н.Несмеянова, Москва, Россия

E-mail: glebpolyakov93@yandex.ru

Контроль над полимерной структурой на стадии синтеза является одной из главных целей современной макромолекулярной химии. Выбором метода синтеза, предшественников и условий проведения реакции достигается управление расположением и силой межмолекулярных взаимодействий в супрамолекулярной архитектуре, что делает возможным достижение требуемого контроля над свойствами конечных полимерных материалов. Среди межмолекулярных взаимодействий водородные связи являются уникальным инструментом с широким диапазоном силы взаимодействия от нескольких кДж·моль⁻¹ до нескольких десятков кДж·моль⁻¹, позволяющим варьировать свойства материала посредством процессов самоорганизации. [1]

В этом плане органоциклосилоксановые полиолы представляют собой уникальные модельные соединения и могут служить строительными фрагментами для целенаправленного молекулярного дизайна кремнийорганических полимеров, а именно полиорганосилесквиоксанов, с заданными свойствами. [2]

Цель данной работы - исследовать реакцию взаимодействия стереорегулярных олигофенилциклосилоксановых полиолов с α - ω -дихлорполидиметилсилоксаном, а также исследовать свойства полученных полимерных материалов.

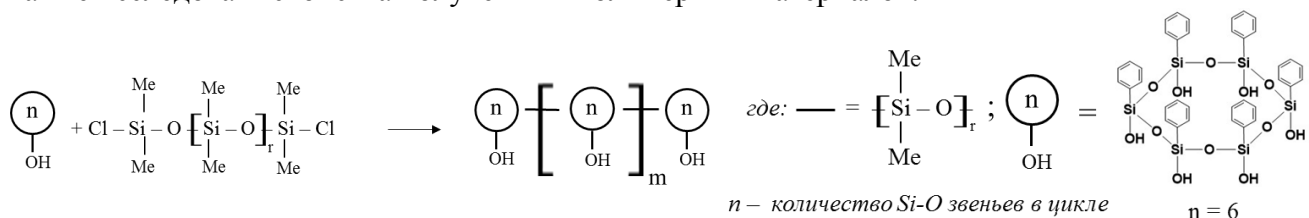


Схема 1.

В докладе будут представлены данные по синтезу новых полидиметилсилоксанов с гидроксильными группами, распределенными по цепи на основе реакции гетерофункциональной поликонденсации *cis*-гексафенилциклогексасилоксангексаола с α - ω -дихлорполидиметилсилоксаном.

Строение всех синтезированных новых соединений подтверждено физико-химическими методами анализа: ЯМР-, ИК-спектроскопия и ГПХ.

Литература

- [1] Louis M. Pitet et al. Nanostructured Supramolecular Block Copolymers Based on Polydimethylsiloxane and Polylactide // *ACS Macro Lett.* **2013**, 2 (11), pp 1006–1010
- [2] Olga I. Shchegolikhina et al. Synthesis and Properties of Stereoregular Cyclic Polysilanol: *cis*-[PhSi(O)OH]₄, *cis*-[PhSi(O)OH]₆, and Tris-*cis*-tris-*trans*-[PhSi(O)OH]₁₂ // *Inorg. Chem.* **2002**, 41, 6892–6904

Адгезионные свойства пленок полиэтилентерефталата, модифицированных в разряде постоянного тока

Пискарев М.С.^а, Зиновьев А.В.^б, Кечекьян А.С.^а, Гильман А.Б.^а, Кузнецов А.А.^а.

^аИнститут синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

^бРТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: mikhailpiskarev@gmail.com

Полиэтилентерефталат (ПЭТФ) находит широкое применение как в качестве пленки для электрической изоляции, так и в составе ламинированного материала. Однако, поверхность полимера не обладает гидрофильными свойствами, а величина краевого угла смачивания по воде (θ_v) составляет 70–84° в зависимости от условий получения пленок. Одним из наиболее эффективных, технологичных и экологически чистых методов улучшения контактных свойств пленок полимеров является воздействие низкотемпературной плазмы. Проведенные нами исследования показали, что под воздействием разряда постоянного тока контактные свойства ПЭТФ значительно улучшаются, а величина θ_v уменьшается до ~10°.

Данная работа посвящена изучению адгезионных свойств модифицированных в разряде постоянного тока пленок ПЭТФ (PETLAIN BT 1010 E, «Superfilm», Турция, толщина 40 мкм) в контакте с адгезивами различной химической природы и разными полимерами. Измерения силы отслаивания (A) методом Т-теста проводили согласно стандарту ASTM 1876-01[1]. В качестве адгезивов были использованы модифицированная эпоксидная смола ЭД-20, подиуретановый клей «Уран» (ПУ) и клей ЭВА (сополимер этилена с винилацетатом Evathene UE654-04, USI, Китай. Эксперименты были проведены как для контактов ПЭТФ/ПЭТФ, так и для контактов с пленками полипиромеллитимида (ПИ), сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) и политетрафторэтилена (ПТФЭ) толщиной 50 мкм, 100 мкм и 60 мкм, соответственно. Полученные результаты приведены в таблице.

Образец		A, Н/м		
		ЭД-20	ЭВА	ПУ
ПЭТФ/ПЭТФ	Без обработки	10±1	197±15	139±14
	Обработка в плазме на аноде	231±20	533±47	566±45
	Обработка в плазме на катоде	275±25	590±49	422±35
ПЭТФ/ПИ	Без обработки	10±1	205±16	142±13
	Обработка в плазме	261±21	610±51	550±47
ПЭТФ/СВМПЭ	Без обработки	28±3	20±2	22±2
	Обработка в плазме	283±25	461±32	470±30
ПЭТФ/ПТФЭ	Без обработки	10±1	10±1	10±1
	Обработка в плазме	160±19	233±16	280±24

Литература

[1] ASTM 1876-2001 // Standard Test Method for Peel Resistance of Adhesives (T-Peel Test).

**Контактные свойства, химическая структура и морфология
поверхности пленок полиэтилентерефталата, модифицированных
в разряде постоянного тока**

Пискарев М.С.^a, Гатин А.К.^b, Гильман А.Б.^a, Кузнецов А.А.^a

^a*Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,
Москва, Россия*

^b*Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия*

E-mail: mikhailpiskarev@gmail.com

Пленки полиэтилентерефталата (ПЭТФ) находят широкое применение для изоляции проводов, а также в составе ламинированного материала для пазовой изоляции высоковольтных электрических машин и в элементах солнечных батарей в качестве задней панели устройства. Для использования в этих целях необходимо улучшить контактные свойства поверхности полимера, обеспечивающие его адгезионную активность к связующему в ламинате или клеям в контактах с другими полимерами. Известно, что наиболее технологичным и экологически чистым методом, позволяющим существенно улучшить контактные свойства полимеров, является воздействие низкотемпературной плазмы. В этой связи несомненный интерес представляет исследование процесса модифицирования пленок ПЭТФ в разряде постоянного тока, изучение изменения их контактных свойств, химической структуры и морфологии.

Объектом исследования служила промышленная двухосноориентированная пленка ПЭТФ марки PETLAIN BT 1010 E («Superfilm», Турция) толщиной 40 мкм. Процесс модифицирования в разряде постоянного тока проводили по методике и на установке, подробно описанным нами в [1]. Образцы пленки ПЭТФ помещали на аноде или катоде, рабочим газом служил фильтрованный атмосферный воздух, давление в системе составляло ~10 Па, ток разряда 50 мА, время обработки (τ) варьировали от 10 до 180 с.

Изучение зависимости краевого угла смачивания (θ) по воде (деионизованной) и глицерину) от τ показало, что в течение 40–45с величина θ быстро уменьшается, а после 50 с выходит на плато. Модифицирование пленок приводит к существенной гидрофилизации поверхности, сохраняющейся в течение длительного времени. Расчеты величины полной поверхностной энергии (γ) и ее полярного компонента (γ^p) [2] показали, что после обработки в плазме γ возрастает в ~2.7 раза, а γ^p в ~4.5 раза. Методом рентгенофотоэлектронной спектроскопии было показано, что воздействие разряда приводит к образованию на поверхности пленки значительного количества кислородсодержащих групп, а ее шероховатость (метод атомно-силовой микроскопии) существенно возрастает.

Литература

[1] Гильман А.Б.; Пискарев М.С.; Яблоков М.Ю.; Кузнецов А.А. // *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева)*, **2013**, 57, (3-4). 99.

[2] Wu S. *Polymer Interfaces and Adhesion*. N.Y.: Marcel Dekker. **1982**.152.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00901 (исследования методами РФЭС, АСМ).

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТОЛЩИНЫ МУЛЬТИСЛОЕВ НА РОСТ И МОРФОЛОГИЮ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ Na-КМЦ/ХИТОЗАН

Савденбекова Б.Е.^a, Оспанова А.К.^a, Уваров Н.Ф.^b

^aКазахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы, Казахстан

^bИнститут химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: balzhan.savdenbekova@gmail.com

Разработка оптимальных условий получения биоактивных покрытий на поверхностях имплантируемых медико-биологических изделий является актуальной проблемой практической медицины. Эти исследования важны с точки зрения теоретических и прикладных задач, прежде всего в области травматологии, поскольку взаимодействие с биологической средой напрямую влияет на характеристики имплантируемых биоматериалов. Как известно, в последнее время для получения антибактериальных и противовоспалительных покрытий на поверхности имплантатов используют различные биополимеры. Понимание динамики роста, а также морфологии и шероховатости покрытий от числа нанопленок на основе биополимеров является важным при разработке условий покрытий для целевого применения в биомедицине. Поэтому целью данной работы было получение мультислоев на поверхности кремниевых пластинок и исследование влияния различных факторов на толщину и морфологию слоев.

Тонкие пленки на основе биополимеров были получены методом LbL, который основан на межмолекулярном или электростатическом взаимодействии молекул с противоположными зарядами. Na-карбоксиметилцеллюлоза (Na-КМЦ) и хитозан использованы в качестве полианиона и поликатиона, соответственно, из-за их нетоксичности, биосовместимости и биоразлагаемости. Предварительно были установлены оптимальные условия активации поверхности подложек раствором серной кислоты в присутствии перекиси водорода (раствор пирания). Наслаивание на поверхности подложек проводили с помощью полуавтоматического способа "dip-coating". Для всех систем, предварительно, один слой полиэтиленимина (ПЭИ) осаждался на подложке для увеличения плотности заряда на поверхности. Получение тонких пленок начинали с погружки подложек в раствор Na-КМЦ с последующей сушкой, для закрепления адсорбированных частиц полимера, и промывкой дистиллированной водой, имеющей такое же значение pH, для удаления неадсорбированных частиц. Нанесение на поверхность хитозана проводили в аналогичной последовательности. Таким путем получали нужное количество бислоев. Исследования проводились в интервале pH = 3-6. Структура и средняя квадратическая шероховатость пленок исследованы с использованием атомно-силового микроскопа (АСМ). Результаты АСМ показали эволюцию рельефа поверхности пленок собранных при различных pH: рост пленок начинается со случайно сформированных, на первых бислоях, "островков", и морфология поверхности развивается по мере увеличения числа бислоев. Методом спектрального эллипсометра оценена не только толщина нескольких бислоев, а также толщина единичного слоя полиэлектролита для оценки ионизации каждого полимера в монослое, тем самым показывая как каждый полиэлектролит адсорбируется и ионизируется на поверхности при разных pH. Изображения поверхностей подложек получены с использованием СЭМ.

Работа выполнена при поддержке Проекта ГФ МОН РК ИРН AP05131647

Формирование металлополимерных нанокомпозитов из термореактивных систем

Сенчихин И.Н.^a, Урюпина О.Я.^a, Уродкова Е.К.^{a, b}, Хасанова Р.Р.^b, Жаворонок Е.С.^b
^a ИФХЭ им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия
^b РТУ МИРЭА, ИТХТ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: isenchikhin@gmail.com

Создание металлополимерных нанокомпозитов, в частности, содержащих наночастицы серебра и золота, вызывает большой интерес, который особенно усилился в последнее время. Это обусловлено возможностью получения из них новых материалов с каталитической и бактерицидной активностью, а также другими уникальными свойствами (например, оптическими). Разработке методик формирования нанокомпозитов в различных средах посвящено большое число работ, однако возможные механизмы восстановления металла при этом обычно не рассматриваются. Однако важным фактором, влияющим на закономерности формирования нанокомпозита, является природа среды (матрицы), в которой происходит формирование наночастиц.

В настоящей работе исследовано восстановление серебра из его нитрата в среде диановых и/или алифатических эпоксидных олигомеров, отличающихся наличием и количеством протонодонорных групп. Показана принципиальная возможность синтеза наночастиц серебра в жидких эпоксидных системах без использования дополнительно вводимых восстановителей. Образование наночастиц в исследованных системах подтверждено методами динамического светорассеяния и УФ-видимой спектрофотометрии. Средний размер наночастиц серебра в полученных нанодисперсиях составляет, в зависимости от соотношения олигомеров в бинарной смеси, порядка 20–35 нм.

Установлено, что в условиях эксперимента возможно восстановление ионов серебра без химического участия среды, за счет фотохимических процессов. Скорость восстановления определяется скоростью растворения исходной соли серебра в органической среде и возможностью образования сольватов этими компонентами. Для наблюдения за кинетикой растворения нитрата серебра в эпоксидных олигомерах и образования наночастиц серебра предложено использовать рефрактометрию. Получены стабильные дисперсии наночастиц серебра в среде эпоксидных олигомеров. Рассмотрены временная и температурная стабильность полученных систем, предложен возможный вариант механизма восстановления серебра.

Последующее отверждение полученных нанодисперсных систем олигоамином приводит к образованию агрегатов наночастиц серебра и росту их среднего размера, что было показано методом растровой электронной микроскопии. Вместе с тем, отмечена и возможность получения нанокомпозитов с изолированными (индивидуальными) наночастицами серебра.

Полученные закономерности позволяют развить подходы для направленного синтеза металлополимерных нанокомпозитов на основе эпокси-аминных систем.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проект №17-08-00630).

Luminescent bithiofensilane dendrimers with effective and fast intramolecular energy transfer

M.S. Skorotetcky^a, E.A. Kleymyuk^a, O.V. Borshchev^a, N.M. Surin^a, S.A. Ponomarenko^{a,b}

^a Enikolopov Institute of Synthetic Polymer Materials RAS, Moscow, Russia

^b Chemistry Department, Lomonosov Moscow State University, Russia

E-mail: Skoroteckiy@ispm.ru

The creation of molecular antennas or light-harvesting complexes is an extremely difficult task for synthetic chemistry. A key feature of these arrays is a well-defined topology in a way that directed energy transfer (ET) from donor to acceptor units can occur. Therefore, highly efficient organosilicon luminophores with branched or dendritic structures which possess unique optical properties are of particular interest [1,2]. By using silicon, which separates the donor and acceptor conjugated fragments, it is possible to very accurately predict the properties of the molecules formed and an effective ET between them can be observed [3].

In this work, new dendrimers with molecular antennas effect, consisting of two types of luminophores: a donor and an acceptor, covalently bound together through silicon atoms, are synthesized and studied (Fig.1). As the donor fragments, the 2,2-bithiophene derivatives with absorption maxima at 330 nm were used. As the acceptor fragment, the 1,4-bis(5-phenylthienyl-2-yl)-benzene with high photoluminescence (PL) quantum yield up to 91% and fast PL decay time down to 800 ps was used [4]. A number of dendrimers and their less branched analogues were obtained and different donor-acceptor ratio was varied from 4 up to 36. The investigation of optical properties in such molecules will make it possible to establish the nature and fundamental principles of the ET in organosilicon luminophores, to study the effect of the number and distance of the donor fragments with respect to the acceptor.

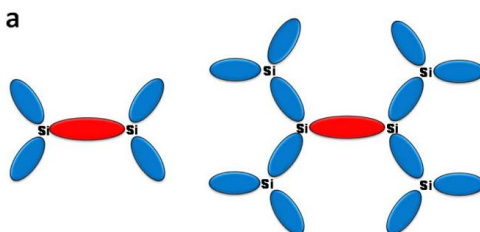


Fig. 1. Schematic representation of dendrimers with inner acceptor (red) and the peripheral donor (blue) parts.

References

- [1] Ponomarenko S.A., Surin N.M., Borshchev O.V. et al. *Sci. Rep.* **2014**, *10*, 6549
- [2] Ponomarenko S.A., Surin N.M., Borshchev O.V. et al. *Proc. SPIE* **2015**, *9545*, 954509
- [3] Borshchev O.V., Kleymyuk E.A., Surin N.M., et al. *Org. Photonics Photovolt*, **2017**, *5*, 1-8
- [4] Starikova T.Y., Surin N.M., Borshchev O.V. et al. *J. Mater. Chem. C*, **2016**, *8*, 1-10

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research (grant 16-03-01118) in the framework of leading science school NSh-5698.2018.3.

Синтез диметилсилоксандиолятов натрия в качестве реагентов для получения высокофункциональных олигомеров и полимеров

Талалаева Е. В.^a, Калинина А. А.^{a,b}, Чернов Е.В.^c, Белова Л.О.^d, Демченко Н. В.^a,
Музафаров А. М.^{a,b}

^aИнститут синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова, Москва, Россия

^bИнститут элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова, Москва, Россия

^cМосковский физико-технологический университет (государственный университет), Москва, Россия

^dМосковский технологический университет (МИРЭА), Москва, Россия

talalaeva@ispm.ru

Кремнийорганические мономеры и полимеры в настоящее время широко используются для получения новых гибридных материалов с заданными свойствами. Для синтеза таких соединений представляется перспективным использование диметилсилоксандиолятов натрия различной длины. Из литературы известно о наличии корреляции между соотношением циклосилоксан/щелочь [1] и вязкостью получаемого продукта. Однако при синтезе индивидуальных солей такая корреляция наблюдается только в случае дисилоксановых солей [2].

Таким образом, целью данной работы является исследование взаимодействия гидроксида натрия и различных силоксановых мономеров, влияния соотношения мономер/щелочь на выход и длину цепи диметилсилоксандиолятов натрия и синтез на их основе циклических и линейных олигомеров и полимеров (схема 1).

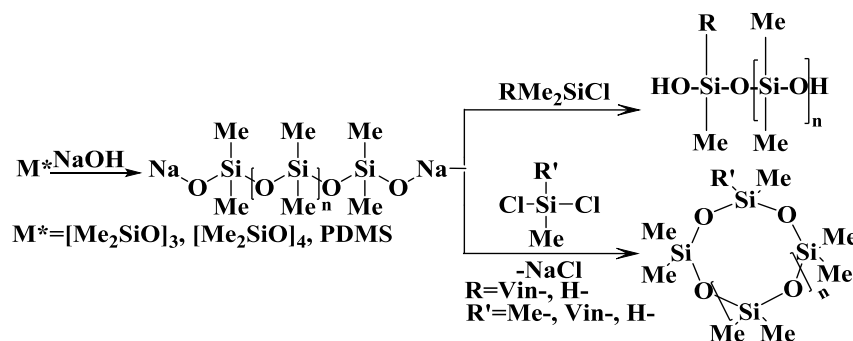


Схема 1.

В работе будут представлены результаты исследования влияния соотношения исходных реагентов, типа мономера, продолжительности процесса на выход и длину цепи получаемых диметилсилоксандиолятов натрия; на примере синтезированных солей будут показаны перспективы их использования для получения функциональных смешанных циклосилоксанов с H- и Vin- группами и линейных полимеров с H- и Vin- группами, распределенными по цепи. Полученные продукты охарактеризованы совокупностью методов физико-химического анализа: газо-жидкостной и гельпроникающей хроматографии, ИК- и ¹H ЯМР-спектроскопии.

Литература:

1. Clarke St. R., Graiver D. et al. Method of making dialkali metal silanolates and siloxanolates. US. Patent. 1999
2. Hyde J. F. Silanol derivatives of the dimethyl substituted organosilicon compounds. Journal of the American Chemical Society, 1953. T75. №9. С. 2166-2167.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-03-00867 А, Гранта Президента для молодых ученых №МК-898.2017.3.

О перспективности суспензий монтмориллонита модифицированного кватернизированным полидиметилсилоксаном в качестве электрореологической жидкости

Столярова Д.Ю.^{a,b}, Кузнецов Н.М.^a, Городов В.В.^b, Белоусов С.И.^a, Чвалун С.Н.^{a,b}, Музафаров А.М.^b

^a Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, РФ

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия.

E-mail: Stolyarova.d@gmail.com

«Умные материалы» активно привлекают ученых и инженеров последние десятилетия. Электрореологические жидкости (ЭРЖ) являются подклассом таких материалов, так как обладают электрореологическим эффектом – способностью резко и обратимо изменять свои реологические свойства (вязкозть, появление и возрастание предела текучести) под воздействием внешнего электрического поля. Классические ЭРЖ – гетерогенные системы, состоящие из непроводящей жидкой среды и легко поляризуемых частиц наполнителя, которые образуют перколяционную сетку вдоль силовых линий поля. На величину электрореологического эффекта влияет множество факторов: разница диэлектрических проницаемостей наполнителя и дисперсионной среды, седиментационная устойчивость суспензий, химическая природа, структура и распределение наполнителя в среде и др. В качестве исследуемых образцов в работе применяли суспензии на основе полидиметилсилоксана и монтмориллонита, модифицированного различными олигодиметилсилоксанами, содержащими четвертичные аммониевые основания при концевых атомах кремния. Синтезированные модификаторы обладали заданной длиной силоксановой цепи с одним или двумя активными центрами на концах молекулы (рис.1). Долю обработанной дисперсной фазы варьировали от 1 до 8 масс. %.

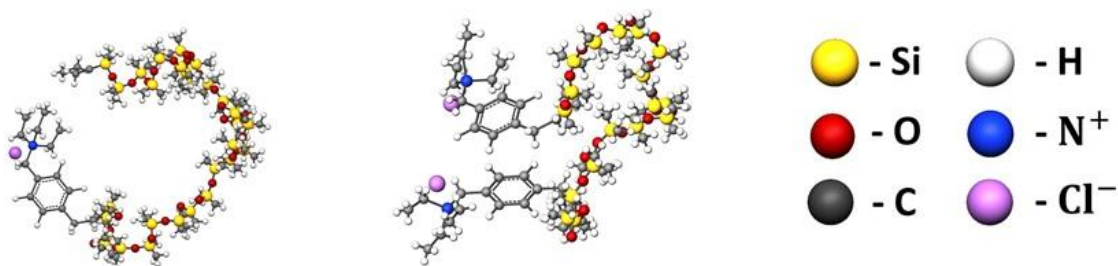


Рис. 1. Шаростержневые модели молекул кватернизированных силоксанов.

В работе проведено комплексное исследование структурной организации частиц модифицированного наполнителя в дисперсионной среде, диэлектрических характеристик, реологических свойств образцов вне и под действием электрического поля, а также показано влияние модификатора на электрореологический эффект.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-01123 мол_а.

Электрореологические свойства суспензий на основе силиконового масла и слоистых алюмосиликатов модифицированных кватернизованным полидиметилсилоксаном

Каприелова М.С.^a, Неманова Н.В.^a, Столярова Д.Ю.^{a,b}, Городов В.В.^b,
Кузнецов Н.М.^a, Белоусов С.И.^a, Чвалун С.Н.^{a,b}, Музафаров А.М.^b

^a Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, РФ;

^b Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия.

E-mail: Stolyarova.d@gmail.com

Электрореологические жидкости (ЭРЖ) представляют собой «умные материалы» вызывающие интерес научной общественности уже более 60 лет. ЭРЖ обычно состоят из смеси твердой легко поляризуемой дисперсной фазы, и жидкой диэлектрической среды. Частицы в подобных суспензиях под действием внешнего электрического поля образуют сетку зацепления, что ведет к резкому изменению реологических свойств жидкостей от вязких к вязко-упругим. Использование в качестве дисперсной фазы монтмориллонита (ММТ), частицы которого обладают большим характеристическим отношением, позволяет получить электрореологический отклик при относительно низких концентрациях (1–8 масс.%) наполнителя [1]. Одним из условий стабильной работы электрореологической жидкости является её седиментационная устойчивость, которую можно повысить за счет модификации дисперсной фазы соединениями, обладающими близкими к дисперсионной среде лиофильными характеристиками. В работе в качестве наполнителя применяли ММТ, модифицированный олигодиметилсилоксаном, содержащим четвертичные аммониевые основания при концевых атомах кремния. Концентрацию дисперсной фазы варьировали от 1 до 8 масс.%. Дисперсионная среда – полидиметилсилоксановое масло. Исследовано реологическое и электрореологическое поведение полученных образцов. Суспензии модифицированного наполнителя демонстрировали большую седиментационную устойчивость по сравнению с ЭРЖ на основе монтмориллонита натриевой формы [1]. Повышение содержания наполнителя приводит к ожидаемому росту динамической вязкости образцов, величина которой зависит от концентрации дисперсной фазы. Продemonстрировано, что без наложения внешнего электрического поля, во всем исследованном диапазоне концентраций модифицированного ММТ, суспензии ведут себя как ньютоновские жидкости. Во внешнем электрическом поле динамическая вязкость суспензий существенно возрастает и зависит от концентрации наполнителя, напряженности приложенного поля и использованного модификатора. Изучено влияние строения модификатора на возникновение предела текучести.

Литература

[1] Столярова Д.Ю., Белоусов С.И., Чвалун С.Н. В книге: XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии тезисы докладов в пяти томах. РАН 2016. С. 113.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект 18-33-01123 мол_a.

Нанокompозиты на основе эпоксидной смолы ЭД-20 и наночастиц серебра с олигостирилкарбоксилатными лигандами

Гурьева Л.Л., Кузуб Л.И., Тарасов А.Е., Бадамшина Э.Р.

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка, Россия

E-mail: atarasov@icp.ac.ru

Ранее [1] нами был предложен способ синтеза наночастиц серебра (НЧС) восстановлением прекурсора олигостирилмонокарбоксилата серебра (ОС-СООAg), ММ=1000, ММР=1.1 [2], диэпоксидной смолой ЭД-20. Получены сферические НЧС, стабилизированные карбоксилатными лигандами, со средним диаметром 2 нм и с тенденцией к упорядоченному расположению в пространстве эпоксидного связующего. В настоящей работе эпоксидное связующее, модифицированное реакционной смесью НЧС с ОС-СООAg при исходных концентрациях прекурсора 0,15-2,5% мас., отверждали диаминодифенилметаном (ДАДФМ) и триэтиламином (ТЭА) по соответствующим температурным режимам. В процессе отверждения модифицированного связующего, продолжается накопление НЧС в реакциях ОС-СООAg как с ЭД-20, так и с амином. Структуру и свойства полученных сетчатых эпоксидных нанокompозитов изучали методами UV-vis-спектроскопии, СЭМ и ДСК.

Показано, что сферическая форма и размеры НЧС сохраняются в процессе отверждения. Отсутствие агрегации НЧС подтверждается UV-vis-спектрами. При отверждении модифицированного связующего первичным амином ДАДФМ наблюдается более равномерное распределение НЧС в объеме нанокompозита, что, вероятно, связано с поликонденсационным механизмом реакции, по которому формируется более однородная полимерная сетка, по сравнению с полимеризационным механизмом, приводящим к неоднородной структуре сетчатого полимера при отверждении третичным амином ТЭА.

Установлено, что присутствие смеси НЧС с прекурсором ОС-СООAg в поликонденсационном сетчатом нанокompозите (отвердитель ДАДФМ) лишь незначительно (на ~ 5°C) снижает температуру стеклования T_g , что объясняется слабым влиянием НЧС на плотность упаковки межузловых цепей. Неоднородная надмолекулярная структура полимеризационной эпоксидной сетки (отвердитель ТЭА) проявляется в наличии нескольких T_g . При этом модификатор НЧС с ОС-СООAg оказывает более сильный пластифицирующий эффект – снижение низкотемпературных T_{g1} и T_{g2} на ~ 50°C, что объясняется нарушением упаковки полимерной сетки в менее плотных областях проходных цепей при совмещении с олигомерным карбоксилатом. Величина высокотемпературной T_{g3} менее чувствительна к наличию модификатора в эпоксидной матрице, вероятно, в более плотных областях сетки.

Литература

[1] Кузуб Л.И., Гурьева Л.Л. и др. Высокомолек. соед., Серия Б, 2017, 59(5), 348.

[2] Гурьева Л.Л., Кузуб Л.И. и др. // Высокомолек. соед. Б. 2013. Т. 55. №3. С. 354.

Работа выполнена по теме Государственного задания, № гос. регистрации 01201055328. Исследование выполнено с использованием оборудования Аналитического центра коллективного пользования ИПХФ РАН

Исследование влияния фуллерена, функционализированного теломерами тетрафторэтилена, на свойства отвержденного эпоксиаминного нанокompозита

Тарасов А.Е., Гарифуллин Н.О., Малков Г.В., Бадамшина Э.Р., Кирюхин Д.П.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

E-mail: atarasov@icp.ac.ru

В настоящее время по-прежнему остро стоит проблема создания полимерных композиционных материалов с улучшенными как конструкционными, так и функциональными свойствами по сравнению с существующими композитами. Несмотря на многочисленные работы по модифицированию связующих, опубликованные со времени открытия углеродных наночастиц, значительных успехов в существенном улучшении свойств композиционных материалов на основе, в частности, наномодифицированных эпоксидных связующих (обладающих сеткой химических и физических связей, близкой к оптимальной) пока достичь не удалось. Одной из причин, ограничивающих проявление положительного эффекта от введения углеродных наночастиц (УНЧ) в качестве наномодификаторов, как известно, является их склонность к агрегации, преодолеть которую можно (и этому есть примеры) путем одновременного использования нескольких типов наночастиц, ожидая при этом проявление синергетического эффекта на свойства нанокompозита по сравнению с введением только одного типа нанонаполнителя и придания композиту новых, нехарактерных для него свойств.

Представленная работа посвящена получению и исследованию отвержденной эпоксиаминной композиции (ОЭК), модифицированной фуллереном и наноразмерными теломерами тетрафторэтилена (ТТФЭ), синтезированных радиационной полимеризацией тетрафторэтилена, с целью придания композиту гидрофобных свойств. ОЭК и нанокompозиты получали при стехиометрическом соотношении эпоксидных и аминных групп. Установлено, что добавки (0,005 – 0,5 мас. %) фуллерена практически не оказывают влияния на максимальную прочность, удлинение на разрыв и работу разрушения ОЭК, а изменение модуля упругости носит экстремальный характер, его минимальное значение наблюдается при 0,05 мас. % фуллерена. Введение ТТФЭ в тех же количествах в эпоксидную матрицу приводит к значительному ухудшению всех физико-механических характеристик. Так, наибольшее снижение прочности на разрыв (на 21 %) и разрывного удлинения (на 38 %) по сравнению с немодифицированной ОЭК наблюдается при концентрации ТТФЭ 0,5 мас. %. Модуль упругости при этой концентрации ТТФЭ на 10 % ниже такового по сравнению с ОЭК, а максимальное снижение модуля на 20 % наблюдается при сверхмалой концентрации теломера (0,005 мас.%). Введение обработанной ультразвуковым смеси ТТФЭ с фуллереном в эпоксидной связующее в соотношении нанонаполнителей 1:1 позволяет нивелировать ухудшение физико-механических характеристик от добавления только ТТФЭ и практически не оказывает влияния на физико-механические параметры ОЭК, но придает нанокompозиту гидрофобные свойства. Введение фуллерена, ТТФЭ и их смеси во всем диапазоне изученных концентраций не оказывает влияния на температуру стеклования нанокompозита.

Работа выполнена при поддержке программы президиума РАН № 32 «Наноструктуры: физика, химия, биология, основы технологий»

Природа эффектов разного вида воздействий и наночастиц анатаза на поли-N-винилкапролактам

Тимаева О.И.^а, Сафьянова Л.В.^а, Чихачева И.П.^а, Кузьмичева Г.М.^а, Кубракова И.В.^б.

^аМИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва, Россия

^бИнститут геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Россия

E-mail: gertrudejames@mail.ru

В последнее время возрос интерес к разного рода воздействиям на полимеры, в результате чего в системах проходят сложные и недостаточно изученные процессы и существенно меняются свойства. Цель работы – выявление и интерпретация результатов механического перетирания (**МП**) в фарфоровой ступке, механоактивации (**МА**) в высокоэнергетической планетарно-шаровой мельнице, микроволновой (**МВО**) и ультразвуковой (**УЗО**) обработки, рентгеновского облучения (**РО**; дифрактометр и синхротрон) пленок поли-N-винилкапролактама (**ПВК**). Образцы исследованы методами рентгенографии (основной метод), ДСК, ИК-спектроскопии, ЯМР, СЭМ. В пленках ПВК40, полученных поливом 2% водного раствора ПВК на стекло и сушкой до постоянной массы при 40°C (выше температуры фазового перехода ПВК $T_{\text{фп}} \sim 32-34^\circ\text{C}$; ПВК25 ниже $T_{\text{фп}}$), при переходе из жидкого в твердое состояние наблюдается разориентация фрагментов молекулярных цепей (в меньшей степени в ПВК25), ориентированных преимущественно нормально к поверхностным слоям тонких пленок, чему способствует постоянный дипольный момент у ПВК, и усиление межмолекулярного взаимодействия (водородная связь) между гетероциклами ПВК, которые существенны для полимеров с большой ММ. При этом возникает неполный плоскостной порядок в пленках из-за механических напряжений в полимере при удалении воды. **МП** пленок приводит к текстурированию (ориентированию) молекулярных фрагментов доменов (жесткие блоки), уменьшению количества присоединенных молекул воды к функциональной группе N-C=O гетероцикла водородной связью (N-C=O...H-O...H) и, соответственно, уменьшению межмолекулярного взаимодействия. Добавление стирола при полимеризации винилкапролактама с последующим получением пленки высокомолекулярного ПВК25 разупорядочивает молекулярные цепи и гетероциклы в пленках и упорядочивает их в порошках при **МП**. **МВО** (печь Discover, SEM Corp., USA; $\nu=2.45$ ГГц, $W=100$ Вт; $\tau=20$ мин, $t=90^\circ\text{C}$) пленок и порошков уменьшает содержание воды в системе при сохранении всех остальных характеристик исходной пленки. **УЗО** пленки ПВК40, помещенной в ультразвуковую ванну (Skymen JP-010S, China; $W=60$ Вт; $\tau=30$ мин) с водой при 40°C и высушенной при 40°C, уменьшает межмолекулярное взаимодействие, но сохраняет разориентацию молекулярных фрагментов исходной пленки. **МП** пленки после **УЗО** содействует их ориентированию, но при этом частично разупорядочиваются гетероциклы, вероятно, из-за уменьшения доли водородной связи. Наноразмерный анатаз (НА) в системе с ПВК и их совместное **МП** приводит к частичной кристаллизации с текстурированием НА, **МА** и **РО** - деструкции ПВК с изменением периодичности доменов, **МА** – полному разупорядочению гетероциклов ПВК40.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 4.1069.2017/ПЧ; 2017-2019).

Получение и физико-химические свойства композиционных гидрогелей на основе поли-N-винилпирролидона с наночастицами оксида титана(IV)

Тимаева О.И.^а, Кузьмичева Г.М.^а, Пашкин И.И.^а

^а МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва, Россия

E-mail: gertrudejames@mail.ru

Гидрогели - системы из высокомолекулярных веществ, которые образуют непрерывную трёхмерную макромолекулярную сетку (полимерный каркас) с водой, заполняющей пустоты этого каркаса. Появлением дополнительных функциональных свойств гидрогели обязаны другому компоненту, входящему в состав композиционных гидрогелей. Цель работы – получение и характеристика новых композиционных 3D гидрогелей в системе наноразмерный анатаз - поли-N-винилпирролидон. Выбор системы для изучения гидрогелей обусловлен свойствами исходных компонентов. Поли-N-винилпирролидон (ПВП) является водорастворимым, биосовместимым и нетоксичным полимером и представляет научный и практический интерес в качестве полимерной матрицы композиционных гидрогелей. Функциональные наночастицы анатаза (А) обладают фотокаталитическими, адсорбционными, бактерицидными и другими свойствами, что должно способствовать появлению новых свойств и новых областей применения, в том числе, медицинского назначения.

Гидрогели А/ПВП получены золь-гель технологией с использованием ПВП, тетраэтоксисилана и коммерческого Hombifine N (0.25 масс.%) с наноразмерным анатазом (А).

Рентгенографическим методом установлено, что в нативном гидрогеле А/ПВП по сравнению с нативным ПВП больше воды, связанной с амидной группой N-C=O водородными связями, но больше в виде кластеров. Суммарное содержание молекул воды существенно меньше у высушенных и перетертых в порошок тех же гидрогелей. Отсутствие взаимодействия анатаза с ПВП подтверждено наличием дифракционных отражений ПВП и анатаза на дифрактограммах как нативных, так высушенных композиционных гидрогелей А/ПВП.

Данные сканирующей электронной микроскопии сколов нативного гидрогеля ПВП после лиофильной сушки свидетельствуют об отсутствии у него упорядоченной структуры. Хранение лиофильно-высушенного гидрогеля ПВП при 11°C в течение 1 месяца привело к формированию в сколе гидрогеля сферических образований со средним размером 30-40 нм.

Изучение кинетики сорбции - десорбции воды (набухание-высыхание) высушенных образцов гидрогелей показало, что наноразмерный анатаз не «вымывается» из структуры гидрогеля и практически не меняет сорбционную способность А/ПВП по сравнению с ПВП, но увеличивает количество циклов сорбции. С каждым последующим циклом сорбции-десорбции 3D-сетка гидрогелей растягивается, что увеличивает сорбционную способность по сравнению с первым циклом.

Гидрогели ПВП и А/ПВП имеют высокую резистентность к проникновению микроорганизмов *Staphylococcus aureus* и могут рассматриваться как потенциальный материал для использования в качестве раневых покрытий.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№18-03-00330).

ПДМС с регулярно распределенными функциональными группами

Темников М.Н.^a, Зимовец С.Н.^{a,b}, Музафаров А.М.^{a,b}

^a Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова РАН, Москва, РФ

^b Институт Синтетических Полимерных Материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, Россия

E-mail: temnikov88@ineos.ac.ru

Такие продукты, как полидиметилсилоксан (ПДМС) имеют большое значение. Данные соединения нашли применение практически во всех областях человеческой деятельности благодаря своим уникальным свойствам, таким как высокая термо- и термоокислительная стабильность, стойкость к УФ-излучению, широкий диапазон рабочих температур, биоинертность, перерабатываемость и др.

При несомненных достоинствах полидиметилсилоксана, его существенным недостатком являются плохие механические свойства, что является следствием слабых межмолекулярных взаимодействий. Введение в этот полимер заместителя, (например, способного к образованию водородных связей) позволяет решить данную проблему. Однако задача поиска подходящих для этой цели групп, остается открытой, т.к. как при их введении нельзя не учитывать компромисс между механическими и термическими свойствами полимера.

В настоящей работе рассмотрен синтез ПДМС с регулярно распределенными функциональными группами и их последующей модификации (Рис. 1):

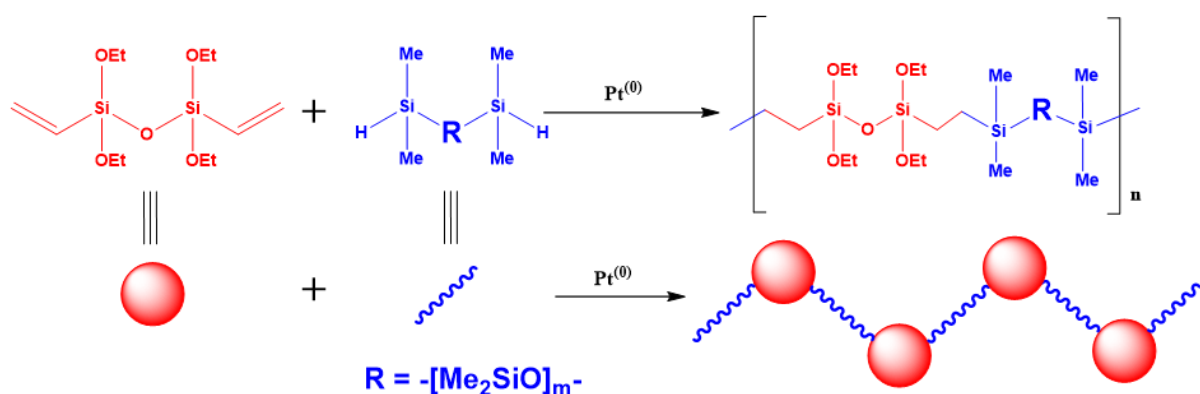


Схема 1. Подпись к схеме (по необходимости)

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки, грант Правительства РФ № 14.W03.18.0031

Роль гребнеобразного полиэлектролита при создании упорядоченных структур интерполиэлектrolитных комплексов

П.А. Фетин^а, И.А. Макаров^а, Е.В. Мечтаева^а, М.Д. Повshedная^а, И.М. Зорин^а,
А.Ю. Билибин^а

^а Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: p.fetin@spbu.ru

Процессы самоорганизации и самосборки являются одним из ключевых направлений в науке о полимерах при создании новых функциональных материалов. В частности, процессы самосборки используют для получения интерполиэлектrolитных комплексов (ИПЭК). Традиционным способом получения ИПЭК является смешение двух полиэлектролитов в гомогенной среде [1]. В большинстве работ для синтеза ИПЭК используют полиэлектролиты линейного строения. Такие комплексы, в основном, имеют аморфную структуру, для ее описания используют англоязычный термин «*scrambled eggs*». В этой работе в результате самосборки были получены ИПЭК, имеющие упорядоченную структуру. Катионным компонентом для таких комплексов является гребнеобразный поликатион поли-11-акрилоилоксиундецилтриметиламмония, (пАУТА⁺), а линейным компонентом - полианион поли-2-акриламидо-2-метил-1-пропансульфоната, (пАМПС⁻), полистиролсульфонокислоты (пСС⁻) и полиакриловой кислоты (пАК⁻). Синтез комплексов осуществляли смешением соответствующих полиэлектролитов в гомогенной смеси (использовали общий растворитель для полимеров) или же в гетерогенной смеси (использовали два несмешивающихся растворителя для полиэлектролитов). Согласно данным малоуглового рентгеновского рассеяния, полученные осадки ИПЭК обладают гексагональной упорядоченностью (синтез в гомогенной смеси) или имеют кубическую упаковку (синтез на межфазной границе). Автор убежден, что ключевую роль в формировании упорядоченных структур ИПЭК играет гребнеобразный поликатион пАУТА⁺. Этот полиэлектролит склонен к образованию устойчивых агрегатов в растворе, разрушить которые не удастся при помощи многократного разбавления, изменения ионной силы раствора, замене противоиона на более гидрофобные (бромиды на трифторацетат, тозилат, камфорсульфонат). Самосборка ИПЭК в растворе происходит с участием темплата пАУТА⁺, в роли которого выступают агрегаты полимера. Наличие одиннадцати метиленовых фрагментов (CH₂)₁₁ в каждом мономерном звене пАУТА⁺, приводит к увеличению локальной концентрации вещества, склонного к гидрофобной ассоциации, это обеспечивает формирование зачатков упорядоченных структур в агрегатах полимера. Подобный эффект, приводящий к гексагональным и кубическим фазам, описан в литературе для растворов низкомолекулярных ПАВ при высоких концентрациях [2].

Ссылки

[1] Pergushov, D. V; Muller A.H.E; Schacher, F.H; *Chem. Soc. Rev.* **2012**, 41(21), 6888–6901.

[2] Ланге, К.Р. Поверхностно-активные вещества: синтез, свойства, анализ, применение / К.Р. Ланге – СПб: Профессия, 2005.– 240 с.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (проект № 18-33-00618 мол_а, № 16-03-00803 А)

Obtaining functional fibrous materials based on polylactide by the mechanism of crazing

Khavpachev M.A.^{a,b}, Trofimchuk E.S.^a, Nikonorova N.I.^a, Uspenskii S.A.^b

^a M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

^b N.S. Enikolopov Institute of Synthetic Polymeric Materials RAS, Moscow, Russia

E-mail: mukhamed_hav@mail.ru

In the last decade, the special interest in biodegradable polymers has increased significantly due to the possibility of their production from renewable resources, for example, plant raw materials. One of the promising applications of biodegradable polyesters is the possibility of their use as the fibers and threads for suture materials, and also as the basis for the production of functional textile and nonwoven materials.

Structural-mechanical modification by the mechanism of solvent crazing (or environmental) is one of the effective methods for obtaining functional fibrous materials. Plastic deformation of polymer fibers in the presence of liquid adsorption active media (AAM) leads to the formation of oriented and dispersed polymer fibrils separated by nanovoids. During crazing the pores of 5–30 nm in size develops, and they are filled with the surrounding medium. If AAM contains nonvolatile additives, they are imbibed and remain inside the fiber after evaporation of the solvent. So, solvent crazing leads to a modification of the fiber bulk, and the porosity generated by fibrillation of the polymer during the uniaxial deformation provides easy access to the additives [1].

In this work, unoriented amorphous fibers based on polylactide (PLA) were uniaxial stretched in the water-ethanol solutions (ethanol content of 10-75 wt%) of different antiseptic agents, namely, in 0.5 wt% solution of brilliant green or carbol fuchsin and in 5 wt% solution of iodine.

It was determined that uniaxial deformation of PLA in water-ethanol solutions with an ethanol concentration of more than 30-40 wt% proceeds to the high tensile strain of 400-600% via the mechanism of crazing and is accompanied by crystallization of polymer fibrils formed in crazes (the degree of crystallinity reaches 40%) [2]. Simultaneously with the development of a highly disperse fibrillar-porous structure, an imbibition of antiseptic substances from AAM to fiber occurs (for example, the concentration of brilliant green in the fiber was 0.06-0.07 wt%). The antimicrobial properties of the fibers obtained were studied. It has been found that fibers containing carbol fuchsin or iodine have bacteriostatic properties for gram-positive actinobacterium *Rhodococcus erythropolis* X5.

Thus, crazing is an effective and universal approach to solving the problem of obtaining functional fibrous materials by introducing various additives into the polymer, as well as a predictable modification of the structure and properties of fibers.

References

- [1] Arzhakova, O.V.; Dolgova, A.A.; Yarysheva, L.M.; et al. *Polymer*. **2015**, *56*, 256 – 262.
- [2] Trofimchuk, E.S.; Efimov, A.V.; Grokhovskaya, T.E.; et al. *ACS applied materials & interfaces*. **2017**, *9*, 34325 – 34336.

This work has been financially supported by the Russian Foundation for Basic Research, project 16-03-00504.

Органо-неорганические нанокompозиты со структурой полу- взаимопроникающих сеток

Трофимчук Е.С.^a, Мешков И.Б.^b, Никонорова Н.И.^a, Москвина М.А.^a, Хавпачев М.А.^{a,b},
Музафаров А.М.^b, Волынский А.Л.^a

^a*Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

^b*Институт синтетических полимерных материалов РАН имени Н.С. Ениколопова, Москва, Россия*

E-mail: mukhamed_hav@mail.ru, elena_trofimchuk@mail.ru

Функциональные полимер-неорганические гибридные наноматериалы сочетают в себе свойства полимерной матрицы (пластичность, низкая плотность, перерабатываемость, др.) и наполнителя неорганической природы (электропроводность, магнитная восприимчивость, сенсорный отклик, др.). Одной из наиболее изучаемых систем данного типа являются полимер-кремнеземные нанокompозиты, которые представляют интерес в качестве материалов с улучшенными барьерными, оптическими, механическими и др. свойствами.

Очень перспективными представляются полимер-неорганические системы со структурой взаимопроникающих сеток (ВПС), в которых неорганическая фаза формирует трехмерный каркас в матрице полимера. При этом если полимерная фаза не представляет собой трехмерную химически сшитую структуру и ее можно удалить из материала или перераспределить без разрушения неорганической сетки, такие полимер-неорганические системы относят к полу-взаимопроникающим сеткам (ПВПС).

Наиболее распространенным способом получения материалов с ВПС и ПВПС является проведение синтеза неорганического компонента по золь-гель технологии одновременно с процессом полимеризации или в растворе полимерного компонента.

В данной работе композиты на основе полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) и диоксида кремния со структурой ПВПС были получены, используя механизм крейзинга полимеров в жидких (гептан, изопропанол, сверхразветвленный полиэтоксисилоксан (СПЭОС)) и сверхкритических (CO₂, Xe, воздух) адсорбционно-активных средах. Высокодисперсная взаимопроникающая фибриллярно-пористая структура полимера, формирующаяся в процессе крейзинга, была заполнена изопропанольными растворами прекурсора СПЭОС различной концентрации. Последующее проведение реакции гидролитической конденсации СПЭОС в присутствии катализаторов приводило к образованию фазы SiO₂ непосредственно в порах ПЭВП. Было определено, что структура неорганического компонента в полученных нанокompозитах зависела от его содержания: при концентрации менее 15 мас.% формировались дискретные наночастицы, выше 20 мас.% наблюдали образование трехмерного каркаса из кремнезема. Нагрев нанокompозитов со структурой ПВПС выше температуры плавления матрицы полиэтилена (160°C) в среде ортофосфорной кислоты приводил к миграции полимера из объема на поверхность, а кислота заполняла образовавшиеся в объеме пустоты (диаметр пустот 7-75 нм). Количество введенной кислоты линейно зависело от концентрации SiO₂ и достигало 45 мас.%. Полученные трехкомпонентные композиты обладали протонной проводимостью: величина их удельной электропроводности достигала 10⁻³ Ом·см⁻¹ при комнатной температуре.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 17-13-01017).

The development of building blocks for organometallic dendrimers

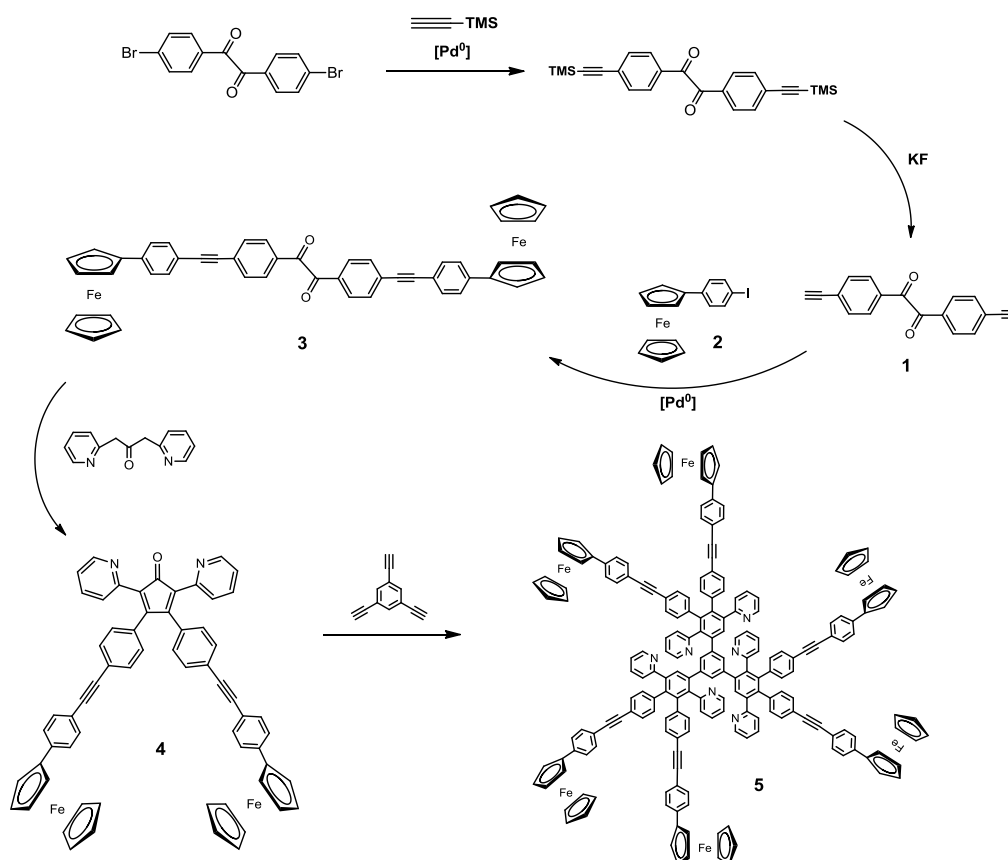
D.U. Khaitmetova^a, E.S. Serkova^b, A.A. Chamkin^b, Z.B. Shifrina^b

^a Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia

^b A.N.Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, Moscow, Russia

E-mail: elena.serkova@ineos.ac.ru

The research on dendrimers is currently undergoing an exponential growth. Organometallic dendrimers combine the unique feature of the dendrimer architecture with the rich chemistry exhibited by organo-transition metal complexes and have already proved to be useful as electron-transfer mediators in redox catalysis, molecular recognition, and electrochemical biosensors. Herein, the novel «building blocks» for the ferrocenyl-containing dendrimers are reported (Scheme 1).



Scheme 1.

The cross-coupling of easily accessible diketone **1** with 4-iodophenylferrocene (**2**) gives **3** that may be readily converted to cyclopentadienone **4** using Knoevenagel condensation. The resulting precursor **4** is a suitable diene for “click” Diels-Alder reaction with different ethynyl compounds that represents useful approach for synthesis of rigid organometallic dendrimers (e.g. **5**).

The reported study was funded by RFBR according to the research project № 18-33-01031.

P-105

СИНТЕЗ КРЕМНЕЗЕМНЫХ НАНОГЕЛЕЙ С АМФИФИЛЬНЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

Холодков Д. Н.², Казакова В. В.¹, Музафаров А. М.^{1,2}

¹ *Институт синтетических полимерных материалов им. Н. С. Ениколопова РАН*

² *Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН*

dima_holodkov@mail.ru

Гибридные наночастицы, ядро которых состоит из неорганических или металлических частиц, а оболочка из органических полимеров обладают уникальными свойствами связанные с наночастицами и желаемыми свойствами полимеров, в том числе способность к переработке и совместимость с окружающей средой.

Органические оболочки, состоящие из двух разных гомополимерных цепей хаотично или поочередно, привитые на поверхность наночастиц интенсивно изучаются в последние годы из-за уникального фазового поведения и потенциального применения в инкапсулировании, «смарт» материалах и др.

В данной работе представлена схема получения кремнеземных наногелей с амфифильным поверхностным слоем.

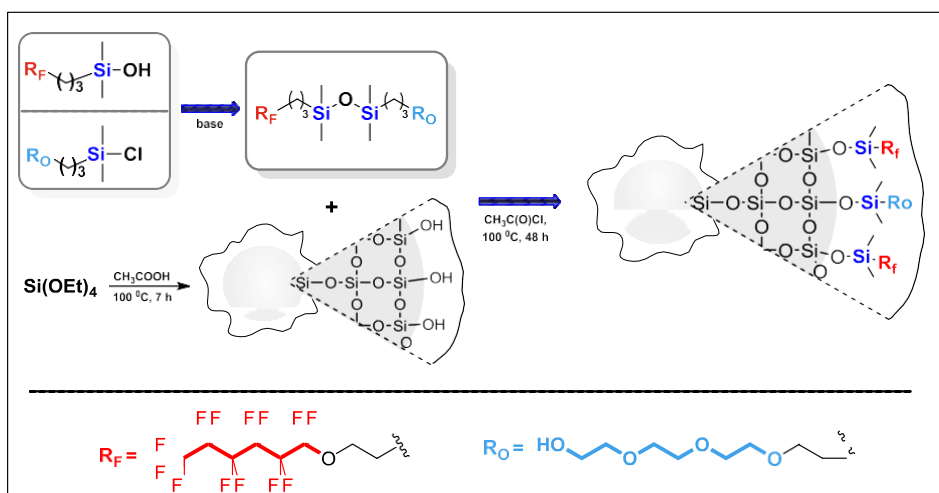


Рис. 1 – Схема синтеза

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (№ 17-03-01037 А)

[1] D. Li, X. Sheng, B. Zhao // J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 6248-62

Участие поли-N-винилкапролактама в синтезе нанодиоксида титана и композиций на его основе

Чихачева И.П.^a, Пашкин И.И.^a, Лобанова Н.А.^a, Шумова Т.Б.^a, Терехова Р.П.^b

^a МИРЭА – Российский Технологический Университет, Москва, Россия

^b ФГБУ «Национальный медицинский исследовательский центр им. А.В. Вишневского», Москва, Россия

E-mail: chipova1941@mail.ru

Особый интерес для создания нанокomпозиций представляют полимеры, обладающие откликом на внешние воздействия. Наиболее часто используются температурно-чувствительные соединения. Участие smart polymer при формировании гибридных нанокomпозитов позволяет расширить возможности их синтеза.

В работе опробованы несколько методов синтеза диоксида титана и органо-неорганических композиций с участием поли-N-винилкапролактама (ПВК). Выбор ПВК обусловлен его высокой комплексообразующей способностью, не токсичностью и наличием нижней критической температуры растворения ($T_{НКТР}$), при которой макромолекула в водном растворе претерпевает фазовый переход от набухшего рыхлого клубка к плотной глобуле. Рассматриваемые методы синтеза нанокomпозитов или диоксида титана базируются на использовании в качестве полимерного компонента различных модификаций макромолекулы, что, в свою очередь, может предопределять скорость взаимодействия и свойства конечного продукта.

Исследовано термоосаждение полимера в водном растворе в присутствии диоксида титана для получения нанокomпозиций; изучена кинетика реакции; установлено, что степень захвата диоксида титана при фазовом переходе полимера зависит от структурной модификации диоксида и его дзета-потенциала.

Предложена методика синтеза нанокomпозиции на основе гидрогеля и диоксида титана золь-гель методом *in situ* с одновременным использованием алкоксида кремния, прекурсора (сульфата титанила) и ПВК. В этом случае сульфат титанила выполняет роль как прекурсора диоксида титана, так и катализатора реакции гелеобразования.

Показана возможность синтеза нанокomпозиции золь-гель методом с использованием ПВК, алкоксида титана в органических средах в присутствии органических и неорганических бактерицидных соединений.

Используя свойство ПВК – увеличение константы комплексообразования с ростом температуры – опробован гидротермальный синтез стабилизированного диоксида титана при введении сульфата титанила в водный раствор ПВК при 30-32⁰С, т.е. в условиях, когда макромолекула находится преимущественно в глобулярном состоянии. Исследованы сравнительные характеристики и свойства синтезированных диоксида титана и композиций (фотоактивность, бактерицидные свойства и другие).

Structural characterization of novel chitosan aerogels with silver nanoparticles prepared *via* eco-sustainable approach

Shulenina A.V.^{a,b}, Elmanovich I.V.^{a,c}, Rubina M.S.^c, Vasil'kov A.Yu.^c,
Peters G.S.^b, Svetogorov R.D.^b

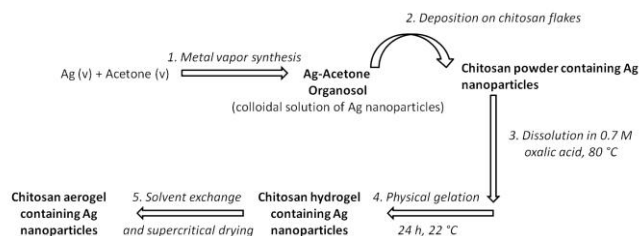
^a Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University 119991 Moscow, Russia

^b National Research Centre "Kurchatov Institute" 123182 Moscow, Russia

^c A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds RAS 119991 Moscow, Russia

E-mail: avp@srd.sinp.msu.ru

Chitosan aerogel materials in various forms like microgranules, blocks, films, etc. are widely used for biomedical applications. Incorporation of biocide silver nanoparticles to a biopolymer matrix improves its antimicrobial properties making it a promising candidate as a dressing material for treatment of infected wounds. In this work we prepared chitosan aerogel using an eco-sustainable approach that combines techniques of metal vapor synthesis and supercritical drying (Scheme 1).



Scheme 1. The main steps for preparing chitosan aerogel containing silver nanoparticles

The structural characterization of all the prepared materials was done using synchrotron radiation techniques including powder X-ray diffraction and small-angle X-ray scattering at the Kurchatov synchrotron radiation source (NRC "Kurchatov Institute", Moscow). Surface of the obtained aerogels was studied using low temperature nitrogen adsorption measurements, as well as scanning electron microscopy.

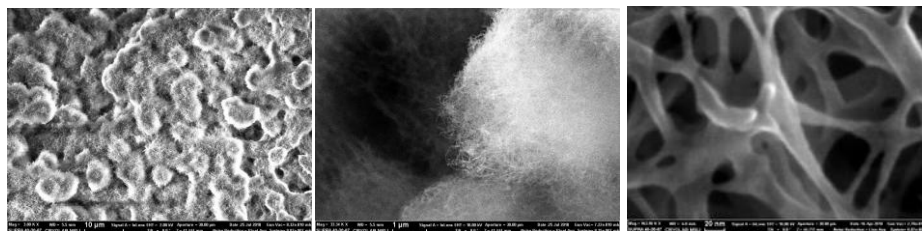


Fig. 1. Typical SEM images of chitosan aerogel prepared in this work

Such a thorough investigation with modern analytical methods is utterly important for understanding the structure of materials on different levels of organization, from atomic to macroscopic. Thus it can be very useful for revealing the structure-properties dependency which is the key for designing new materials with functional properties.

This work was supported by the RFBR grant №18-33-01094.

The authors gratefully acknowledge Center for molecule composition studies (INEOS RAS), Dr. S.S. Abramchuk for TEM measurements and Dr. A.V. Pastukhov for BET measurements.

Контроль размера и свойств коллоидного золота блок-сополимерами тирозина и этиленоксида

Якимов Н.П.^a, Мелик-Нубаров Н.С.^a, Еремина Е.А.^a

^a МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: mr.mr.koks@mail.ru

Коллоидные частицы золота находят множество приложений в биосенсорных системах, катализе и терапии. Медицинские применения золотых наночастиц требуют их включения в биосовместимые носители, обеспечивающие возможность циркуляции в кровотоке и последующего выведения наночастиц. Амфифильные блок сополимеры этиленоксида и аминокислот являются эффективными носителями для подобных задач. Полиаминокислотный блок может связываться с металлическим золотом (гидрофобные взаимодействия), а полиэтиленоксидный блок способен стабилизировать частицы в растворе, а также обладает биосовместимостью. В связи с этим, в данной работе мы попытались синтезировать коллоидные частицы золота в реакции HAuCl_4 с блок-сополимером этиленоксида и тирозина в водной среде и контролировать размер и свойства частиц с помощью изменения соотношения блоков в сополимере. Тирозин был выбран ввиду его восстановительных свойств и гидрофобности.

Нами были синтезированы блок-сополимеры с различным соотношением блоков. Блок-сополимеры получали в ходе цепной полимеризации N-карбоксииангидрида тирозина с раскрытием цикла, инициированной аминотерминированными ПЭГ различной длины. Свойства сополимеров были исследованы методами гель-проникающей хроматографии, ядерного магнитного резонанса, динамического светорассеяния.

Для проведения реакции синтезированные сополимеры диспергировали в воде путем 50-кратного разбавления раствора полимеров в N,N-диметилформамиде водой, в результате чего образовывались мицеллы со средним гидродинамическим диаметром 20-1000 нм в зависимости от состава сополимера. Добавление HAuCl_4 приводило к образованию коллоидных частиц золота, размер и свойства которых зависели от состава блок-сополимера.

Исследование полученных образцов с помощью УФ-спектроскопии и просвечивающей электронной микроскопии показало, что в присутствии блок-сополимеров с содержанием тирозина 20-40% формируются крупные золотые наночастицы размером 20-300 нм и характеризующиеся интенсивной полосой возбуждения поверхностных плазмонов. В присутствии сополимеров, содержащих 60-80% политирозина могут образоваться частицы размером менее 2 нм, способные флуоресцировать. Такие частицы с несформированной зонной структурой называются золотыми нанокластерами и вызывают большой интерес в связи с возможностью их использования в биосенсорных системах.

Таким образом мы впервые показали возможность образования коллоидных частиц золота при взаимодействии HAuCl_4 с блок-сополимерами этиленоксида и аминокислот, а также установили наличие зависимости свойств получаемых частиц от состава сополимера.

Работа была поддержана: грантом РФФИ №18-03-01234а, а также грантом Президента Российской Федерации № 573 от 20.12.2017 г.

ИК-спектроскопическое исследование структуры нанокompозитов поливинилового спирта/полиакриламид/клиноптилолит

Дабижа О.Н.

Забайкальский государственный университет, Чита, Россия

E-mail: dabiga75@mail.ru

ИК-спектроскопия представляет собой простой и удобный метод исследования полимерных нанокompозитов [1], полученных на основе водорастворимых органических полимеров и клиноптилолита. Равные объемы 1; 2; 4 мас. % водных растворов поливинилового спирта ПВС (марка 02-1799, Китай) и полиакриламида ПАА (130617, Китай) тщательно перемешивали при 25 °С на магнитной мешалке. Далее добавляли механоактивированные в течение 3 мин в дисковой вибрационной мельнице Essa LM2-P клиноптилолитовые породы Холинского (Х) и Шивыртуйского (Ш) месторождений [2] и перемешивали еще 10 мин. Концентрации полимеров и минерального наполнителя варьировали: 1; 2; 4 и 0.1; 0.4 мас. % соответственно. Всего получено и исследовано 36 образцов и 9 полимерных композиций без наномодификатора. ИК-спектры регистрировали спектрометром SHIMADZU FTIR-8400S в области 4000–400 см⁻¹ на пленках, отлитых на воздухе при 25 °С из водных растворов. Степень кристалличности ПВС (а) рассчитывали по формуле [3]:

$a, \% = -13.1 + 89.5(A_{1144}/A_{1094})$, где A_{1144} и A_{1094} - значения интенсивностей полос поглощения (п.п.) при 1144 и 1094 см⁻¹. Взаимодействие между компонентами оценивали по сдвигу частоты п.п. ν_{OH, NH_2} и по отношению интенсивностей п.п. при 1668 и 3350 см⁻¹ (табл. 1).

Табл. 1. Частота и отношение интенсивностей некоторых полос поглощения

Образцы	$\nu_{OH, NH_2}, \text{см}^{-1}$	$\Delta\nu, \text{см}^{-1}$	A_{1668}/A_{3350}	A_{1144}/A_{1094}	a, %
2-1	3343	–	0.171	0.828	61.0
2-1 _{0.1} Ш	3320	-23	0.397	0.828	61.0
4-1	3343	–	0.309	0.882	65.9
4-1 _{0.4} Х	3302	-41	0.351	0.923	69.5
4-2	3354	–	0.188	0.825	60.7
4-2 _{0.1} Ш	3337	-17	0.228	0.829	61.1
4-2 _{0.4} Ш	3341	-13	0.366	0.840	62.1
4-4	3329	–	0.380	0.852	63.1
4-4 _{0.1} Ш	3352	+23	0.667	0.714	50.8
4-4 _{0.4} Ш	3350	+21	0.683	0.690	48.7

В табл. 1 приведены данные только тех образцов, для которых наблюдается значимое изменение не менее двух из трех указанных спек-тральных критериев.

Установлено, что оптимальная концентрация ПВС в составе полимерных композиций для структурирования среды и ее самоорганизации должна составлять 4 мас. %. Выявлено, что высококремнеземная клиноптилолитовая порода Шивыртуйского месторождения присутствует в 5 из 6 лучших образцов, перспективных для дальнейших исследований.

Литература

- [1] Кодолов В.И.; Тринеева В.В. *Химическая физика и мезоскопия*, **2011**, 13(3), 363.
 [2] Дабижа О.Н.; Дербенева Т.В.; Хатькова А.Н.; Филенко Р.А.; Патеюк Т.П. *Химия в интересах устойчивого развития*, **2016**, 24(2), 193-201.
 [3] Третинников О.Н.; Загорская С.А. *Журн. прикл. спектр.*, **2012**, 79(4), 538-543.

Синтез и строение кремнийсодержащего полиакрилонитрила

Попова Н.А.^a, Молоткова Н.Н.^b, Кузнецова М.Г.^a, Мадоян А.М.^c, Степанов Г.В.^a,
Грачев А.А.^a, Бровкина Е.Ю.^a, Алексеева Е.И.^a, Драчев А.И.^a, Стороженко П.А.^a

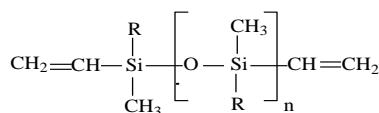
^a АО “Государственный научно-исследовательский институт химии и технологии элементоорганических соединений”, Москва, Россия

^b Институт пластмасс им. Г.С.Петрова, Москва, Россия

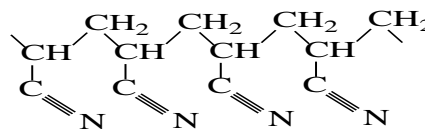
^c Московский технологический университет, Москва, Россия

E-mail: popova-n@yandex.ru

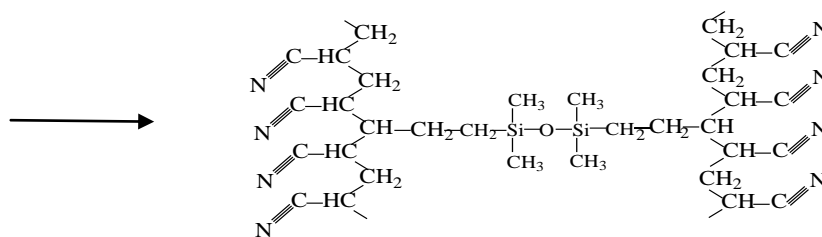
С целью формирования углеродных волокон (УВ), допированных кремнийсодержащими наночастицами, нами разработан метод синтеза полиакрилонитрилов, содержащих в своей структуре равномерно распределенные силоксановые звенья (ПАН-Si) [1]. Введенные в небольших количествах, силоксановые группы играют роль внутренних модификаторов и пластификаторов, что позволяет обеспечить устойчивое бесперебойное формование тонкого и гибкого волокна и реализовать более высокие прочностные и теплофизические характеристики конечных УВ. На стадиях отверждения ПАН прекурсоров присутствие Si-O-Si групп в качестве окислителя позволяет ускорить процесс отверждения, снизить его температуру и избежать введения нежелательного избытка кислорода в результате поверхностного окисления. Модификацию ПАН проводили с использованием винил-замещенных силоксанов (n=1-8, R= CH₃, CH=CH₂) путем прививки винильных групп к метиленовым звеньям ПАН:



Винилсилоксаны



ПАН



ПАН-Si

Строение синтезированных ПАН-Si, а также закономерности протекания реакций, в зависимости от положения функциональных заместителей и длины цепи силоксанов, исследовано с помощью методов ЯМР (¹H, ¹³C, ²⁹Si) и ИК-Фурье спектроскопии.

Литература

[1] Попова Н.А., Степанов Г.В., Драчев А.И. // Патент РФ 2639865. 2017 .

[2] Попова Н.А., Степанов Г.В., Драчев А.И., Скворцов И.Ю., Куличихин В.Г., Бучнев Л.М., Эйсмонт З.В., Бейлина Н.Ю. // Сб. тез. докл. 10-ой Междунар. конф. «Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология». Москва, Троицк. 2016. 355-356.

Conducting composite materials based on polyimides filled with carbon nanotubes

Ivanov V.S., Yegorov A.S., Bogdanovskaya M.V., Gudeeva D.S., Chayka V.A.

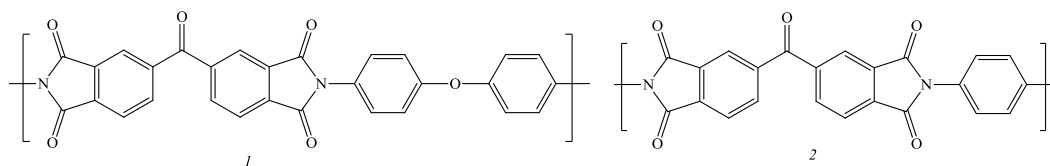
Federal State Unitary Enterprise «State Scientific Research Institute of Chemical Reagents and High Purity Chemical Substances», Moscow, Russian Federation.

E-mail: ivanov@irea.org.ru

Earlier in our research institute were made polyimide-based composites with different contents of single-walled carbon nanotubes (CNT). CNTs were uniformly distributed in the polyimide matrix. Composite materials showed high values of thermal resistance and resistance to thermo-oxidative degradation, and good mechanical properties [1].

It was shown that stable iodine doped CNT-polymer composites show an increase in conductivity 2-5 times compared to composite materials with undoped CNTs on the same polymer matrix [2].

We made a series of polyimide based composites, and the conductivity of the samples with different filler contents was studied. It can be seen (**Table 1**) that the percolation threshold for matrix 1 and 2 is less than 0.1 mass% CNT (I_2). A significant influence of the polymer chain structure on the conductivity has been established. The presence of a heteroatom in the diamine component (**Scheme 1**) facilitates intramolecular rotation and provides a more loose packing, which leads to an increase in conductivity.



Scheme 1. Matrixes for conductive polyimide-iodine doped CNT composites 1 – 3,3',4,4'-BPDA/ODA; 2 – 3,3',4,4'-BPDA/p-PDA

Table 1. Conductivity of polyimide-iodine doped CNT composites

<i>N_o</i>	<i>Matrix</i>	<i>Filler</i>	σ , <i>S/cm</i>	<i>Type of conductivity</i>
1	BPDA/ODA	0,1% MWCNT (I_2)	$2.97 \cdot 10^{-6}$	<i>p</i>
2		0,5% MWCNT (I_2)	$1.77 \cdot 10^{-5}$	<i>p</i>
3		1% MWCNT (I_2)	$1.04 \cdot 10^{-5}$	<i>p</i>
4	BPDA/p-PDA	0,25% SWCNT (I_2)	$9.34 \cdot 10^{-6}$	<i>p</i>
5		0,5% SWCNT (I_2)	$5.71 \cdot 10^{-7}$	<i>p</i>
6		1% MWCNT (I_2)	$8.43 \cdot 10^{-8}$	<i>p</i>

References

- [1] Wozniak A. I., Ivanov V. S., Kosova O. V., Yegorov A. S. *Oriental journal of chemistry*, 2016, 32(6), 2967-2974.
 [2] Sankapal B. R., Setyowati K., Chen J., Liu H. *Appl. Phys. Lett.* 2007, 91, 173103.

Applied researches are carried out with state financial support represented by the Ministry of Education of Russia under the Agreement on granting subsidies No. 14.625.21.0037 of October 3, 2016. Unique identifier for Applied Scientific Researches (project) RFMEFI62516X0037.

Р-112

Разработка полиимидного связующего для получения полимерного композитного материала армированного непрерывным волокном методом трехмерной печати

Богдановская М.В., Иванов В.С., Егоров А.С.

НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА, Москва, Россия

E-mail: bogdanovskaya@irea.org.ru

В настоящее время большое внимание уделяется развитию аддитивных технологий, в частности, изготовлению изделий методом трехмерной печати. Однако, основным недостатком такого рода изделий является низкие рабочие температуры.

В ходе выполнения работ для увеличения рабочих температур был получен ряд термореактивных полиимидных связующих, предназначенных для пропитки углеродного волокна (Рис. 1) и изготовления препрега. Была изучена их вязкость, а также термостойкость и механические свойства (Табл. 1).

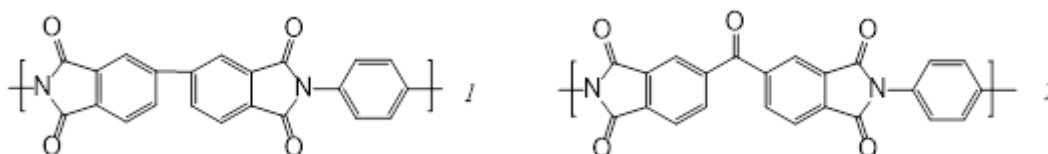


Рис. 1. Структуры термореактивных полиимидных связующих

Табл.1. Физико-механические характеристики термореактивных связующих

ПИ матрица	Модуль упругости при растяжении, МПа	Относительное удлинение, %	Прочность при растяжении, МПа
1	7378,50	9,01	176,30
2	2049,60	7,10	48,30

Также был получен ряд термопластичных полиимидных связующих (Рис. 2) для получения композитного материала. Были изучены термостойкость (Табл. 2) и механические свойства полиимидных связующих [1].

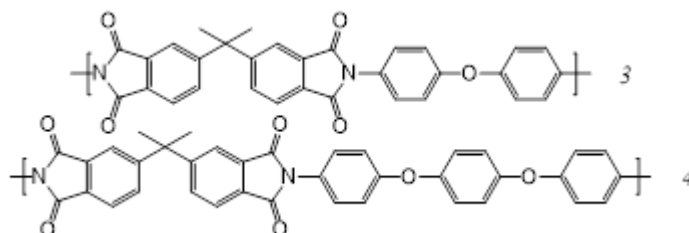


Рис. 2. Структуры термопластичных полиимидных связующих

Табл. 2. Термостойкость термопластичных связующих

ПИ матрица	Аргон		Воздух	
	5%	10%	5%	10%
3	527,47	537,53	483,38	518,00
4	526,47	531,77	522,07	532,67

Литература

[1] Averina E. A., Yegorov A. S., Bogdanovskaya M. V., Wozniak A. I., Zhdanovich O. A. *Oriental Journal of Chemistry*. **2018**, 34(1), 743-749.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках соглашения о предоставлении субсидии №14.625.21.0037 от 3 октября 2016 года. Уникальный идентификатор прикладных научных исследований (проекта) RFMEFI62516X0037.

КРУГЛЫЙ СТОЛ

R-1

Применение аддитивных технологий в химических исследованиях и смежных областях

Гордеев Е.Г.,^a Анаников В.П.^a

^a *Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

E-mail: gordeev_e@ioc.ac.ru

Аддитивные технологии в последние годы получили широкое распространение не только в профессиональной среде инженеров-машиностроителей, но и среди специалистов из других областей. Сегодня 3D-печать используется в медицине, научных исследованиях, ювелирном деле, промышленном и художественном дизайне и даже в кондитерском производстве. 3D печать постепенно проникает во все сферы материального производства, что связано с легкостью эксплуатации современных 3D-принтеров, во многих случаях не требующих высокой инженерной квалификации со стороны пользователя, если речь не идет о критически важных изделиях.

Интересные перспективы открываются при использовании аддитивных технологий в химии, химической технологии и биотехнологии. В частности, при правильном подборе конструкционного материала, открываются широкие возможности по созданию сложных химических реакторов и оснастки в условиях химической лаборатории только с использованием 3D-принтера без привлечения дополнительного обрабатывающего оборудования [1]. Возможность относительно быстрого создания сложных деталей аддитивными методами позволяет в короткие сроки проводить оптимизацию конструкции реактора для конкретных экспериментальных условий. Принципиальным вопросом при использовании аддитивных технологий в химии является устойчивость конструкционных материалов к органическим растворителям. Немаловажной является и возможность создания из выбранного материала герметичного изделия с помощью имеющейся в распоряжении исследователя технологии аддитивного производства [1].

Другим важным направлением использования аддитивных технологий в химии является разработка новых каталитически-активных компонентов химических реакторов в гетерогенном катализе. Разработка таких компонентов (картриджей) включает в себя не только разработку каталитически-активного материала (или подбор уже существующего материала), но и создание из такого материала методом 3D печати оптимальным образом организованной системы каналов, в которой и реализуется каталитический процесс.

В биотехнологии, медицине и тканевой инженерии актуальны не только «классические» конструкционные материалы, но и биоразлагаемые материалы, которые могут использоваться для создания имплантов. Есть успешные примеры использования 3D биопечати для создания биоразлагаемых костных имплантов замещаемых впоследствии естественной костной тканью организма. Поэтому оптимизация уже имеющихся биоразлагаемых материалов для аддитивных технологий и создание новых материалов для биопринтинга – актуальное направление развития аддитивных технологий [2].

Литература

[1] Gordeev E.G.; Galushko A.S.; Ananikov V.P. *PLoS ONE*, **2018**, 13(6): e0198370.

[2] Kucherov F.A.; Gordeev E.G.; Kashin A.S., Ananikov V.P. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56(50), 15931.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (проект 14-50-00126).

R-2

Аддитивные технологии в производстве композитов

Александр Полежаев

*Центр коллективного пользования ИНЭОС РАН им. А.Н. Несмеянова
Лаборатория «Новые материалы» НОЦ «НМКН» МГТУ им. Н.Э. Баумана*

Аддитивные технологии или 3D-печать за последние 15 лет полностью изменили облик производства композиционных изделий. В настоящее время, аддитивные технологии охватывают практически все области производства композитов, от строительства и авиации до биомедицины. В аддитивных технологиях используется широкая линейка материалов, от «неорганических», таких как стекла и цементы до «органических», таких как термо и реактопластичные полимеры. Мое сообщение призвано кратко суммировать современные достижения в области наиболее популярных технологий 3D-печати, в первую очередь моделирования методом наплавления и лазерной фотопечати. Будет кратко рассмотрено устройство 3D-принтеров и показаны возможности наиболее популярных на рынке моделей. Будут рассмотрены наиболее популярные термопласты, используемые для печати, их достоинства, недостатки и области применения, а также подходы к созданию композитов. Отдельно будет рассмотрена лазерная фотопечать, основы метода и материалы, применяемые в печати.

R-4

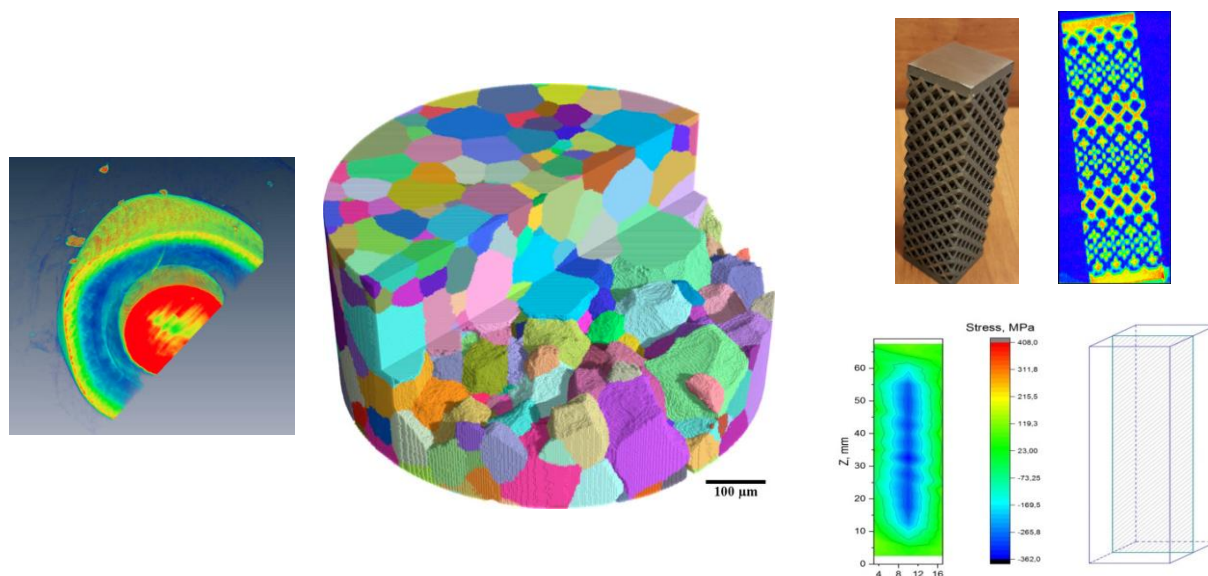
Синхротронные и Нейтронные Методы Визуализации – от Объектов Культурного Наследия до Изделий Аддитивных Технологий

Сенин Р.А.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: senin_ra@nrcki.ru

В докладе рассматриваются основные методы получения пространственной информации о структуре объектов – рентгеновская и нейтронная томография на синхротронном излучении, фазовый контраст, варианты рентгеновской микроскопии. Описываются локально чувствительные дифракционные методы, в том числе дифрактометрия для анализа структуры зерен и анализа напряжений. Приводятся примеры широчайшего спектра применения синхротронных и нейтронных методов – от исследования кристаллической структуры красок, использовавшихся в доисторические времена, до анализа изделий высоких технологий, получаемых методами лазерного спекания металлов.



R. A. Senin et al, Upgraded X-Ray topography and microtomography beamline at the Kurchatov synchrotron radiation source // Crystallography Reports, 2013, Vol. 58, No. 3, pp. 517–52

Анализ ориентации зерен в поликристаллическом образце. Ludwig W. et al. Three-dimensional grain mapping by x-ray diffraction contrast tomography and the use of Friedel pairs in diffraction data analysis //Review of Scientific Instruments. – 2009. – Т. 80. – №. 3. – С. 033905.

Внешний вид, томографические срезы и распределение напряжений сетчатой структуры образца из сплава CL20es. В.П.Гласков, В.Т.Эм. НИЦ КИ, В печати.

Исследование фазового состава красок выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №17-29-04172

Получение и исследование полиимидных композиционных материалов с применением аддитивных технологий

Поляков И.В.^a, Ваганов Г.В.^{ab}, Юдин В.Е.^{ab}, Иванькова Е.М.^{ab}, Попова Е.Н.^b,
Елоховский В.Ю.^b

^a Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

^b Институт Высокмолекулярных Соединений РАН, г. Санкт-Петербург, Россия

E-mail: polyakov-iv@yandex.ru

В последние годы, во многих сферах, таких как аэрокосмическая, медицинская, архитектурная, и автомобильная, широко внедряются аддитивные технологии. Аддитивные технологии – это получение продукта методом послойного нанесения материала на специальном оборудовании по компьютерной модели будущего изделия. Данные технологии позволяют быстро создавать уникальные изделия, которые практически невозможно или трудно получить традиционными методами. На сегодняшний день самой популярной технологией, которая широко используется для изготовления трехмерных моделей, является моделирование методом послойного наплавления (FDM). В настоящее время FDM-печать использует стандартные термопластичные полимерные материалы, такие как ABS, PLA, PC и PA. Однако, изделия, полученные из этих полимеров, имеют довольно низкие механические характеристики. Поэтому перспективным направлением в FDM является использование термостойких термопластичных полимеров. Помимо термостойкости, данные материалы обладают более высокими механическими характеристиками, нежели стандартные полимеры для 3D-печати. Кроме того, возможным способом улучшения механических свойств печатных материалов является модификация полимера различными наполнителями с высокой степенью анизотропии, например, волокон, как микронного, так и наноразмерного диапазона.

Целью этой работы является применение FDM-печати для получения и исследования термостойких, высокопрочных пластиков на основе полиимида, модифицированных и углеродными нановолокнами и волокнами микронного размера.

В данной работе использовали термостойкий аморфный полиэфиримид (PEI) торговой марки **Ultem 1000** (SABIC Innovative Plastics). Углеродные нановолокна VGCF (Pyrograf®-III), $D \times L$: 100нм x 20-200мкм. Дискретные углеродные волокна (CF) (Tenax-J PE C702, Toho Tenax, Япония), $D \times L$: бмкм x бмм.

В результате работы были получены композиционные материалы на основе полиэфиримида, наполненного различными видами углеродных волокон. На их основе были получены филаменты и изготовлены образцы, методами FDM-печати и литья под давлением. Были исследованы реологические, термические свойства и структура этих материалов. Механические исследования показали, что напечатанные образцы, наполненные микронными волокнами, имеют более высокие показатели прочности и модуля, нежели наполненные нановолокнами. Характеристики данных образцов, приближаются к значениям образцов, полученных методом литья под давлением, из чистого PEI. Таким образом, термостойкие термопластичные композиционные и наноконпозиционные материалы открывают еще более широкие возможности для применения и распространения FDM-печати в самых различных областях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 14-33-00003

Реактивы и Оборудование для Пробоподготовки и Работы с Наноразмерными Объектами

Парамонов Д.А., Эллис В.В.

Компания «Лабораторка», Москва, Россия

E-mail: dp@laboratorka.com

Коллектив компании "Лабораторка" более 15 лет работает на рынке лабораторного оборудования и химических реактивов. Мы поставляем реагенты и оборудование научно-исследовательским и контрольно-аналитическим лабораториям, а также химическим и биотехнологическим производителям.

В числе наших основных направлений:

- реактивы для органического и неорганического синтеза и аналитических исследований, в т.ч. блоки для строительства различных наноструктур, производные фтора, интермедиаты, катализаторы;
- высокочистые кислоты и растворители для анализа важнейших элементов и примесей металлов со сверхнизким пределом обнаружения (ppb и ppt), в том числе продукты линии ULTRA LC/MS;
- высокочистые активированные полиэтиленгликоли для пэгирования: многофункциональные линейные ПЭГи, бифункциональные, многоветвевые, разветвлённые, гетерофункциональные, вильчатые, ПЭГи с контролируемым высвобождением активной субстанции;
- ультрачистый полисорбат 80;
- липиды и фосфолипиды для липосомных препаратов;
- дейтерированные растворители европейского производства со склада в Москве;
- оборудование и реактивы для микроскопии, в т.ч. сканирующие электронные микроскопы с разрешением 4 нм;
- высокотехнологичные системы водоочистки для получения воды любого типа чистоты в нужных количествах, в нужное время с минимальной стоимостью эксплуатации;
- спектрофотометры, сканирующие спектрофотометры;
- широкий модельный ряд центрифуг – от персональных микроцентрифуг до высокопроизводительных полупромышленных установок;
- лабораторные холодильники и морозильники различного объёма и с различным регулируемым температурным диапазоном вплоть до -164°C ;
- боксы с ламинарным потоком воздуха и чистые зоны;
- счётчики частиц западных производителей, в т. ч. портативные;
- 3D-принтеры и расходные материалы для 3D-печати;
- шейкеры-инкубаторы с регулируемой орбитой как настольные, так и напольные и штабелируемые.



Лабораторное оборудование BUCHI Решения для научных исследований

Ротационный испаритель



- Русский язык, сенсорный дисплей 7".
- Датчик пены и датчику уровня обеспечивают автоматическую дистилляцию.
- Уведомления на телефон о статусе процесса.

Препаративный хроматограф



- Флэш-хроматография и препаративная ВЭЖХ.
- Встроенные ELSD и UV-Vis детекторы.
- Распознавание хромофоров и нехромофоров.
- Давление до 120 бар.

Распылительная сушилка



- Одностадийное получение порошка из водных, органических или кислотных растворов.
- Сушка термолabile соединений.
- Корректировка размера частиц на выходе.

Контакты представительства BUCHI в России/СНГ:
Тел. +7 495 36 36 495
russia@buchi.com | www.buchi.ru

www.buchi.ru

Quality in your hands

**При технической поддержке профессионального
конгресс организатора MESOL Agency**

www.mesol.ru

