



УНИВЕРСИТЕТ
КНИЖНЫЙ ДОМ

BOOK OF ABSTRACTS
II LUNINSKY READINGS
February 11, 2026
Chemistry Department
Lomonosov Moscow State University

Moscow
2026

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
II ЛУНИНСКИЕ ЧТЕНИЯ
11 февраля 2026 г.
Химический факультет
МГУ имени М.В. Ломоносова**

**Москва
2026**

УДК 544
ББК 24.5
Т29

Тезисы докладов. II Лунинские чтения (Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 11 февраля 2026 г.) / Составители Т.В. Богдан, Н.А. Мартынова, Д.А. Фирсов. – М.: «КДУ», 2026. – 151 с. – Электронное издание сетевого распространения. – URL: <https://bookonline.ru/node/84993> – doi: 10.31453/kdu.ru.978-5-00247-234-5-2026-151.

ISBN 978-5-00247-234-5

Представлены тезисы докладов участников II Лунинских чтений «11» февраля 2026 года, проводимых на химическом факультете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (МГУ). Лунинские чтения проводятся с 2025 г. в память о Валерии Васильевне Луниной – академике РАН и первом президенте химического факультета МГУ – и посвящены широкому спектру вопросов из разных областей химии, которые развивались при непосредственном участии и при руководстве В.В. Лунина. Тезисы ведущих ученых II Лунинских чтений посвящены фундаментальным и прикладным аспектам химических и биохимических каталитических реакций. Тезисы докладов молодых ученых посвящены исследованиям студентов, аспирантов и молодых ученых в области физической химии и смежных областей, биохимии и экологии, вопросам машинного обучения в химической науке.

Электронное издание сетевого распространения.

Фотография на обложке Засурской Л.А.

Публикуется в авторской редакции.

Составители: Богдан Т.В., Мартынова Н.А., Фирсов Д.А.

Адрес в сети Интернет <https://bookonline.ru/node/84993>

Объем данных 1,8 Мб. Опубликовано 09.02.2026.

Издательство «КДУ»: 8(495) 638-57-34. www.kdu.ru;

www.bookonline.ru

© Авторы, 2026

ISBN 978-5-00247-234-5

© Издательство «КДУ», 2026



Валерий Васильевич Лунин (1940–2020 гг.) – декан химического факультета МГУ с 1992 по 2018 гг. и первый президент химического факультета. После окончания химфака МГУ в 1967 г. вся жизнь В.В. Лунина была связана с химическим факультетом, с университетом. Сначала он преподавал на кафедре химии нефти и органического катализа. Под руководством А. Е. Агрономава защитил кандидатскую диссертацию. В конце 1980-х, будучи доктором наук, возглавил лабораторию катализа и газовой электрохимии на кафедре физической химии. В 1992 году стал деканом химического факультета. С 1994 года возглавил кафедру физической химии.

В. В. Лунин обладал исключительным чутьем к новым, прорывным направлениям научных исследований. В самом начале своей научной карьеры он занимался исследованием каталитических реакций в присутствии гидридов металлов и интерметаллических соединений. Этой теме были посвящены кандидатская и докторская диссертации В. В. Лунина, выполнены около 20 диссертационных исследований под его руководством. Данные работы опередили свое время: позже эта тематика стала очень востребованной и легла в основу работ по хранению и использованию водорода в качестве источника энергии.

II Лунинские чтения «11» февраля 2026 г. посвящены фундаментальным и прикладным аспектам химических и биохимических каталитических реакций, вопросам машинного обучения в химической науке. В лекциях пленарных докладчиков рассмотрены вопросы синтеза углеводородов и переработки различных видов углеродсодержащего сырья с использованием разного рода катализаторов, природоподобных и сверхкритических технологий. В докладах молодых ученых, кроме обозначенных выше тем, представлен широкий спектр вопросов из разных областей химии, отражающий многогранную деятельность В. В. Лунина.

Программный комитет

Председатель

Калмыков Степан Николаевич, академик РАН, вице-президент РАН, научный руководитель химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Заместители председателя

Карлов Сергей Сергеевич, профессор РАН, и.о. декана химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Богдан Виктор Игнатьевич – д.х.н., ведущий научный сотрудник, ИОХ РАН

Члены программного комитета

1. Алдошин Сергей Михайлович, академик РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН
2. Ананников Валентин Павлович, академик РАН, ИОХ РАН
3. Бухтияров Валерий Иванович, академик РАН, ИК СО РАН
4. Егоров Михаил Петрович, академик РАН, ИОХ РАН
5. Горбунова Юлия Германовна, академик РАН, ИОНХ РАН
6. Иванов Владимир Константинович, академик РАН, ИОНХ РАН
7. Цивадзе Аслан Юсупович, академик РАН, ИФХЭ РАН, президент РХО имени Д.И. Менделеева
8. Мартянов Олег Николаевич, чл.-корр. РАН, ФИЦ ИК СО РАН
9. Ненайденко Валентин Георгиевич, чл.-корр. РАН
10. Иванова Ирина Игоревна, МГУ имени М.В. Ломоносова
11. Караханов Эдуард Аветисович, МГУ имени М.В. Ломоносова
12. Кустов Леонид Модестович, ИОХ РАН
13. Локтева Екатерина Сергеевна, химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова
14. Синев Михаил Юрьевич, ИХФ РАН
15. Стахеев Александр Юрьевич, ИОХ РАН

Организационный комитет

1. Карлов Сергей Сергеевич – председатель, д.х.н., профессор
2. Богдан Виктор Игнатьевич – заместитель председателя, д.х.н.
3. Богатова Татьяна Витальевна к.х.н, доцент
4. Богдан Татьяна Вениаминовна, к.х.н., доцент
5. Горюнков Алексей Анатольевич, д.х.н., профессор
6. Засурская Лариса Александровна, к.х.н., с.н.с.
7. Кузнецова Наталья Николаевна, к.х.н., с.н.с.
8. Мартынова Наталья Александровна, к.х.н., м.н.с.
9. Миняйлов Владимир Викторович, к.х.н., с.н.с.
10. Ненайденко Валентин Георгиевич, д.х.н., профессор, чл.-корр. РАН
11. Савилов Сергей Вячеславович, д.х.н., профессор
12. Фирсов Денис Аркадьевич, к.ф.-м.н., доцент

ОГЛАВЛЕНИЕ

Тезисы докладов ведущих ученых	16
Адсорбционно-индуцированная сегрегация как способ управления составом поверхности и свойствами биметаллических катализаторов <i>Бухтияров А.В., Панафидин М.А., Машковский И.С., Зубавичус Я.В., Просвирин И.П., Бухтияров В.И., Стахеев А.Ю.</i>	17
Фитомайнинг – концентрирование металлов растениями: геохимические и технологические следствия <i>Варфоломеев С.Д.</i>	18
Синтез каолининовых наноструктур с новой “репейнико”-подобной морфологией, обладающих высокой каталитической активностью в реакции изомеризации α -пинена <i>Голубева О.Ю., Сидоренко А.Ю., Парих К.А.</i>	19
Галлуазитные трубки – «нанореакторы» синтеза углеводородов из CO и H ₂ <i>Елисеев О.Л., Мазурова К.М., Казанцев Р.В., Смирнова Е.М., Демихова Н.Р., Ставицкая А.В.</i>	20
От механизма синтеза цеолитов к созданию высокоэффективных цеолитных катализаторов <i>Иванова И.И.</i>	21
Переработка различных видов углеродсодержащего сырья с использованием дисперсных катализаторов <i>Максимов А.Л.</i>	22
Металлогидриды и возможные варианты их промышленного применения в газопереработке и газохимии <i>Рябченко П.В.</i>	23
Вода при высоких параметрах состояния: реагент, реакционная среда и катализатор процессов переработки органического сырья и синтеза сложных оксидов <i>Синев М.Ю.</i>	24
Порошкообразные MeAl сплавы как прекурсоры керамометаллических катализаторов и носителей <i>Тихов С.Ф.</i>	25
Тезисы докладов молодых ученых	26
Синтез катализатора феррита кобальта методом Печини и его использование в конденсации ацетона <i>Абарина В.А., Мащенко Н.В., Богдан Т.В., Коклин А.Е., Богдан В.И.</i>	27
Сверхкритическое водное окисление модельной жидкости, имитирующей сточные воды производства бисфенола-А <i>Аетов А.У., Мазанов С.В., Соловьев В.О., Левицков В.В., Маннанова А.А.</i>	28
Кинетическое исследование окисления олеиновой кислоты пероксидом водорода в сверхкритической воде <i>Аетов А.У., Мазанов С.В., Соловьев В.О., Закирова Л.Л.</i>	29
Катализатор CaSn(OH) ₆ , полученный в условиях ультразвуковой активации, в альдольно-кетоновой конденсации ацетона <i>Азаров К.В., Богдан Т.В., Мащенко Н.В., Богородский С.Э., Богдан В.И.</i>	30
Влияние окислительного стресса как модулятора активности Na ⁺ /K ⁺ -АТФазы: исследование методами микроскопии сверхвысокого разрешения <i>Айтмухамбетова И.Р., Коркунов Р.Ю.</i>	31

Нетканые ультраволокнистые материалы на основе полимерных композиций с модифицирующими углеродсодержащими добавками: структура, свойства, применение <i>Алешин Н.О., Кочеткова В.А., Коростелев Н.В., Сафиева Р.З., Ольхов А.А.</i>	32
Динамика лазерно-индуцированного плазмообразования в CO ₂ <i>Ашарчук Н.М., Епифанов Е.О., Мареев Е.И.</i>	33
Пути превращения 4-йоданизола в присутствии азиды натрия и полимерных медьсодержащих каталитических систем <i>Бахвалова Е.С., Неметц В., Матвеева В.Г., Никошвили Л.Ж.</i>	34
Влияние состава атмосферы прокаливания на свойства Mo-V-содержащих катализаторов парциального окисления акролеина <i>Блажко А.А., Чесноков Е.А., Никифоров А.И.</i>	35
Молекулярно-динамическое моделирование агрегации красителей на основе BODIPY <i>Близнин А.А., Сопова Н.С., Старушко А.В., Боченков В.Е., Боченкова А.В.</i>	36
Гидрирование фруктозы на металлосодержащих катализаторах, синтезированных с использованием сверхсшитого полистирола <i>Богданова А.М., Сульман М.Г., Григорьев М.Е.</i>	37
Термодинамика адсорбции хлорпроизводных ароматических кислот на микропористых углях: тестирование моделей и оценка энергии взаимодействия <i>Булкин С.А., Шарифуллина Л.Р.</i>	38
Дизайн органо-неорганических галогенометаллатов с использованием методов ML и DL <i>Быков А.В., Шевельков А.В.</i>	39
Pt/«нано»ZSM-5/SiC - новый эффективный катализатор гидроконверсии рапсового масла в «зелёные» компоненты топлив <i>Вагапова М.Н., Локтев А.С., Чердниченко К.А., Садовников А.А., Дедов А.Г.</i>	40
Гидрирование CO ₂ на FeK-катализаторе, нанесенном на углеродный носитель Сибунит <i>Васькова Д.В., Коклин А.Е., Богдан Т.В., Минаев Н.В., Богдан В.И.</i>	41
Гидрирование CO ₂ в метанол на катализаторах CuO-ZnO/SiO ₂ , CuO/CeO ₂ -SiO ₂ , CuO-ZnO/CeO ₂ -SiO ₂ : влияние состава и метода синтеза <i>Васюта Е.А., Ашурбеков К.Т., Фёдорова А.А., Капустин Г.И., Кустов А.Л., Морозов И.В.</i>	42
Медь-церий-оловянные катализаторы предпочтительного окисления CO в потоке водорода: влияние методики приготовления <i>Вахрушев А. Д., Каплин И.Ю., Локтева Е.С.</i>	43
Роль шероховатости поверхности электрода в реакции катодного восстановления нитрат-иона: моделирование и эксперимент <i>Вдовенков Ф.А., Козадеров О.А., Кузьменко Г.А., Тараканов П.П., Фомин П.В.</i>	44
Исследование конформационных переходов K-Ras(G12D) и K-Ras(G12C) в комплексе с YK-8S – новым ковалентным ингибитором онкогенных форм K-RAS <i>Вдовина М.В., Хренова М.Г.</i>	45
Исследование механизма инициации плазмон-индуцированной полимеризации на перфорированных нанопленках золота и серебра <i>Волосников М.И., Сопова Н.С., Боченков В.Е.</i>	46

Синтез левулиновой кислоты из фруктозы с использованием полимерных твёрдых кислотных катализаторов <i>Гаврилова Е.П., Манаенков О.В., Кислица О.В., Матвеева В.Г.</i>	47
Исследование фотофизических свойств флуоресцентных красителей на основе BODIPY <i>Галикберова М.Р., Клещина Н.Н., Боченкова А.В.</i>	48
Оценка структурных параметров и термодимических свойств 3-ацетил-4-аминофуросана с помощью квантово-химических расчётов <i>Галкин А.С., Степанова А.В., Лобанов Н.В.</i>	49
Применение мембран российского производства для осушки природного газа <i>Горохова А.Н., Колдышев В.Р.</i>	50
Синтез магнитных биокатализаторов на основе ферментов класса оксидоредуктаз <i>Гребенникова О.В., Юсеф-Азуз Несрин, Сульман А.М., Матвеева В.Г.</i>	51
Новые порфирилаты индия(III) для фотокаталитических приложений <i>Гринева У.В., Опарина А.Д., Поливановская Д.А., Бирин К.П., Цивадзе А.Ю.</i>	52
Трансформация гидролизного лигнина в ацетонитриле <i>Деменин А.К., Машченко Н.В., Богдан Т.В., Коклин А.Е., Богдан В.И.</i>	53
Гель-полимерные электролитные системы для суперконденсаторов <i>Деянков Д.А., Архипова Е.А., Иванов А.С., Савилов С.В.</i>	54
Двухступенчатая модель LLM–GNN для ускорения дизайна неорганических кристаллов <i>Дудаков И.В., Королев В.В., Митрофанов А.А.</i>	55
Адсорбционные, каталитические и сенсорные свойства оксида графена и его производных <i>Евсеев Г.С., Шишов А.С., Квашнин Д.Г.</i>	56
Планарные дефекты как фактор подвижности каркаса в кремнезёмах с топологией MFI <i>Енбаев З.С., Николаенко Я.И., Костюков И.А., Касьянов И.А., Никифоров А.И.</i>	57
Особенности структуры и каталитические свойства в углекислотной конверсии метана каталитического материала на основе никельсодержащего слоистого двойного гидроксида магния-алюминия <i>Ермаков Е.В., Локтев А.С., Садовников А.А., Дедов А.Г.</i>	58
Каталитические свойства MnO_x/CeO_2-SiO_2 и MnO_x/ZrO_2-SiO_2 в селективном окислении CO в избытке H_2 <i>Ефименко Л.А., Каплин И.Ю., Локтева Е.С.</i>	59
Гидрирование CO_2 на бифункциональном катализаторе в зависимости от компонентного состава <i>Иванов Г.К., Маерле А.А., Иванова И.И.</i>	60
Прогнозирование химических сдвигов ^{93}Nb , ^{95}Mo , ^{205}Tl ЯМР для комплексов редких и переходных металлов с помощью машинного обучения <i>Исаев Я.И., Ковалев А.Е., Ходов И.А.</i>	61
Каталитический крекинг бионефти, стабилизированной различными растворителями <i>Калинина Н.А., Кузнецов П.С., Дементьев К.И.</i>	62
Оценка спектральных характеристик дериватов аминокислот с дабсилхлоридом на примере разработанной аналитической методики определения аминокислот в белковых препаратах <i>Калмыкова А.А., Кустова Т.П., Калмыков П.А.</i>	63

Исследование комплексов Ni с аминокислотами и их 4f–металлакриплатов методами ИК-спектроскопии <i>Карманов А.Д., Саварец А.Р., Новикова Е.А., Долженко В.Д.</i>	66
Разработка модели с использованием машинного обучения для предсказания химических сдвигов ядер ^{55}Mn и ^{57}Fe <i>Ковалев А.Е., Исаев Я.И., Ходов И.А.</i>	65
Качественный и количественный состав органических кислот в вине как показатель идентификации такого вида фальсификации, как петиотизация <i>Ковалёва А.М., Липатова Л.П.</i>	66
Свойства антистоксовых люминофоров и механизмы антистоксовой люминесценции <i>Кожаткин И.Д., Щербинин А.В.</i>	67
Квантово-химическое моделирование адсорбции ацетилена и этилена на малых биметаллических кластерах InPd <i>Коляденков А.Р., Пичугина Д.А., Марков П.В., Машковский И.С., Стахеев А.Ю.</i>	68
Влияние условий сверхкритической флюидной экстракции диоксидом углерода на эффективность извлечения биоактивных соединений и витамина Е из коры осины (<i>Populus tremula L.</i>) <i>Корепанова Я.Ю., Яруллин Л.Ю., Коваленко С.А., Хайрутдинов В.Ф.</i>	69
Влияние соотношения Ce/La и введения оксида меди на активность $\text{CeO}_2\text{-La}_2\text{O}_3$ катализаторов в предпочтительном окислении CO в присутствии водорода <i>Коржова А. Н., Каплин И.Ю., Голубина Е.В.</i>	70
Нанопористый триазиновый каркас на основе молекулы F4-TCNQ: исследование физических свойств <i>Коровина А.В., Квашнин Д.Г.</i>	71
Разработка деэмульгатора на основе сложных эфиров растительного происхождения для разрушения нефтешламовых эмульсий <i>Космынина Т.А., Буров Е.А.</i>	72
Моделирование восстановительного гидрирования $\text{C}_{70}[\text{NCO}_2\text{Me}]$ <i>Кочеров С.А., Горюнков А.А.</i>	73
OLED на основе комплексов Yb^{3+} : статистический анализ и машинное обучение <i>Кошелев Д.С., Емельянов Д.Ю., Уточникова В.В.</i>	74
Иммобилизация как метод повышения устойчивости целлюлолитических ферментных препаратов в процессах получения биоэтанола <i>Кравцова О.А., Соколова А.В., Панькова Д.А., Сульман М.Г., Ожимкова Е.В., Сульман А.М., Матвеева В.Г.</i>	75
Влияние способа введения W-содержащей промотирующей добавки на свойства VPO катализаторов парциального окисления <i>n</i> -бутана <i>Кравченко В.Д., Зорина А.А, Воробкало В.А., Никифоров А.И.</i>	76
Структура и водородсорбционные свойства ряда многокомпонентных редкоземельных сплавов <i>Крот П.А., Вербейский В.Н.</i>	77
Аморфные ароматические полимеры как носители наночастиц палладия – катализаторов селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола <i>Кунарева А.А., Бахвалова Е.С., Матвеева В.Г., Никошвили Л.Ж.</i>	78

Особенности образования формальдегида и его производных в процессе гидрирования диоксида углерода на поверхности катализатора Pt-Ni-Cu/SiO ₂ <i>Курагин А.А., Цветков Д.Ю., Петрова А.И., Лакина Н.В., Долуда В.Ю.</i>	79
Разработка мобильного приложения для статистической обработки результатов эксперимента на базе ОС Android <i>Лобанов М.В., Лобанов В.Н., Лобанов Н.В.</i>	80
Допированные хромом силикаты лантана как катализаторы паровой конверсии этанола <i>Лопатин М.Ю., Фёдорова А.А., Морозов И.В., Казаков С.М., Фёдорова Ю.Е., Кнотько А.В., Ларина Т.В., Маслаков К.И., Беззубов С.И., Садыков В.А.</i>	81
Совместный пиролиз отходов полимеров и древесной биомассы <i>Луговой Ю.В., Чалов К.В., Монжаренко М.А., Косивцов Ю.Ю., Сульман М.Г.</i>	82
Каталитические свойства феррита кобальта в реакции конденсации ацетона в сверхкритических условиях <i>Лукьянов П.С., Богдан Т.В., Мащенко Н.В., Купреенко С.Ю., Богдан В.И.</i>	83
Экстракция эфиров жирных кислот в сверхкритических флюидных условиях <i>Мазанов С.В., Аетов А.У., Монахов И.И., Соловьева А.О., Исаев А.Д.</i>	84
Фазовое равновесие бинарной смеси «СО ₂ -ацетон» в СКФ области состояния за пределами бинодали <i>Мазанов С.В., Накипов Р.Р., Зарипов З. И., Гумеров Ф. М.</i>	85
Влияние различных осадителей на морфологию пористых полуволоконных мембран из полифениленсульфона <i>Макжанова Д.Т., Сторчун А.В., Матвеев Д.Н.</i>	86
Объёмно-упругие свойства тройных растворов вода–ацетонитрил–диметилформаид <i>Малышева А.Е., Абрамович А.И.</i>	87
Синтез и исследование электрокаталитических свойств Мо ₂ С <i>Мартынова Н.А., Кузнецова Н.Н.</i>	88
Применение диизононилфталата в пластизолях <i>Мартынова Т.А., Чалов К.В., Луговой Ю.В., Долуда В.Ю.</i>	89
Оптимизация метода синтеза перовскитного катализатора на основе LaCo _(1-x) M _x O ₃ (M = Mn, Fe, Ni) <i>Матвиевич Д. В., Баева Г. Н., Парамошин И. В., Машковский И. С., Стахеев А. Ю.</i>	90
Структура кластеров [(MeCN)-(PhCl)] _n (n=1–4) (расчеты методом теории функционала плотности) <i>Мисатюк Ф.С., Богдан Т.В., Фирсов Д.А., Абрамович А.И.</i>	91
Pt-ZnO/SiO ₂ для неокислительного дегидрирования пропана: влияние метода синтеза на каталитические свойства <i>Михайлюк Я. Б., Каплин И. Ю.</i>	92
Прямое дегидрирование этана на катализаторе Pt-CaSnO _x /γ-Al ₂ O ₃ <i>Мишанин И.И., Богдан Т.В., Федосеев Т.В., Азаров К.В., Богдан В.И.</i>	93
Сравнение CaSnO _x /γ-Al ₂ O ₃ и CaSnO _x /SiO ₂ катализаторов в прямом дегидрировании этана <i>Мишанин И.И., Богдан Т.В., Федосеев Т.В., Азаров К.В., Богдан В.И.</i>	94
Идентификация структуры продукта присоединения диоксида углерода к флуфенамовой кислоте на основе данных спектроскопии ядерного магнитного резонанса	

<i>Мололина А.А., Опарин Р.Д., Белов К.В., Дышин А.А., Крестьянинов М.А., Киселев М.Г., Ходов И.А.</i>	95
Влияние условий синтеза на активность PtCo/ZSM в селективном окислении CO в присутствии водорода <i>Монина Т.С., Гараева А.Т., Кротова И.Н., Удалова О.В., Дворяк С.В., Шилина М.И.</i>	96
Получение оксидов ванадия и никеля (II) для накопления энергии <i>Мороз Ю.Д., Осипов Н.И., Столбов Д.Н.</i>	97
Порошкообразный композиционный материал на основе полиэфиркетонкетона и молотого углеродного волокна для СЛС-печати <i>Морозова В.С., Павлюкович Н.Г.</i>	98
Карбоксилирование фенилацетилена с участием CO ₂ на гетерогенных Cu, Ni – содержащих катализаторах <i>Мякота В.Е., Стрекалова А.А.</i>	99
Применимость TD-DFT для расчета спектральных характеристик нейтральной формы хромофора зеленого флуоресцентного белка <i>Никитин К.Ю., Щербинин А.В.</i>	100
Получение и теоретическая оценка биологической активности сложных эфиров 3,5-динитробензойной кислоты <i>Норкина Д.Д., Путис С.М.</i>	101
Пиразинопорфирины с электроноакцепторными группами как фотокатализаторы реакции окисления сульфидов <i>Овчинников Г.А., Шремзер Е.С., Бирин К.П., Цивадзе А.Ю.</i>	102
Фотоиндуцированный перенос электрона снижает яркость флуоресцентной РНК <i>Одинцов К.В., Домрачева Т.М.</i>	103
Получение контрастирующих агентов для энергочувствительной компьютерной томографии на основе оксидов лантанидов <i>Осипов Н.И., Сулова Е.В., Шелков Г.А.</i>	104
Гидролиз растительных полисахаридов с использованием сульфированного сверхсшитого полистирола <i>Панскова Л.Д., Гаврилова Е.П., Манаенков О.В., Кислица О.В., Сульман М.Г.</i>	105
Адсорбционно-каталитическое удаление ЛОС в присутствии озона на ионообменном Co-Beta <i>Парамошин И.В., Бокарев Д.А, Баева Г.Н., Стахеев А.Ю.</i>	106
Получение высокоактивных наноцеолитов для глубокой переработки сырья различного типа <i>Перепечаева В.Б., Кузнецов П.С., Дементьев К.И.</i>	107
Адсорбционно-каталитическая очистка воды от диклофенака: влияние природы углеродного материала <i>Песоцкий М.Д., Локтева Е.С., Харланов А.Н.</i>	108
Исследование эффективных условий каталитического окисления D-глюкозы <i>Петрова А.И., Цветков Д.Ю., Лакина Н.В., Долуда В.Ю., Сульман М.Г.</i>	109
Синергизм церия и платины в окислении CO на Pt-Ce-модифицированных цеолитах ZSM-5 <i>Петрова С.А., Кротова И.Н., Удалова О.В., Шилина М.И.</i>	110

Моделирование и анализ физико-химических и электронных свойств заполненных углеродных нанотрубок на основе системы Te@УНТ <i>Петрова С.С., Квашин Д.Г.</i>	111
Возникновение двойного электрического слоя в системе NaCl-CaSO ₄ -H ₂ O и его влияние на результаты аналитического контроля процесса кристаллизации гипса кондуктометрическим методом <i>Поликуров П.И., Почиталкина И.А.</i>	112
Каталитическое гидрирование гидропероксида кумола с получением α-кумилового спирта при комнатной температуре и атмосферном давлении <i>Попова Д.Д., Редина Е.А.</i>	113
Исследование ассоциации молекул N,N-диметилформамида в водных растворах методом молекулярной динамики <i>Пронкевич С.А., Фирсов Д.А., Богдан Т.В., Абрамович А.И.</i>	114
Тандемный синтез замещенных олефинов в присутствии PdCu биметаллического катализатора <i>Рассолов А.В., Патиль Е.Д., Баева Г.Н., Стахеев А.Ю.</i>	115
Сорбционные свойства наноцеллюлозы, модифицированной функциональными группами <i>Репина Н.Д.</i>	116
Прогнозирование распределения размеров металлических и фармакологических субмикронных частиц на основе нейросетей <i>Ровенко В.В., Семенов Т.А., Епифанов Е.О., Мишаков Г.В., Минаев Н.В., Гарматина А.А., Мареев Е.И.</i>	117
Физико-химическое превращение станната кальция при конверсии 1,4-диоксана в сверхкритических условиях <i>Саварец А.Р., Богдан Т.В., Коклин А.Е., Мащенко Н.В., Богдан В.И.</i>	118
Полиморфизм β-аланината Cu(II) <i>Саварец А.Р., Карманов А.Д., Новикова Е.А., Долженко В.Д.</i>	119
Исследование влияния люминофора на процесс и механизм кристаллизации CaSO ₄ <i>Самохин Н. А., Почиталкина И. А.</i>	120
Энтальпия сублимации бис(2-гидрокси)этил терефталата <i>Семавин К.Д., Чилингаров Н.С., Скокан Е.В.</i>	121
Смачиваемость смесевых мембран из полиэфиров и альбумина, полученные методом электроспиннинга <i>Сидорова А.Е., Рамонова А.А., Бонарцев А.П., Войнова В.В., Багров Д.В.</i>	122
Элементный и фазовый состав магнитного песка Халактырского пляжа и его применение в гидрировании CO ₂ <i>Скиба М.А., Коклин А.Е., Богдан Т.В., Чернавский П.А., Богдан В.И.</i>	123
Исследование «корочковых» PdAu _x /Al ₂ O ₃ катализаторов в условиях фронтального гидрирования ацетилена в этилен <i>Смирнова Н.С., Машковский И.С., Ваулина А.Е., Мельников Д.П., Марков П.В., Баева Г.Н., Стахеев А.Ю.</i>	124
Пути модернизации технологии окисления циклогексана до циклогексанола и циклогексанона <i>Смурова А.А., Косицына А.В., Фролов А.С., Курганова Е.А.</i>	125

Установление сорбционных и структурных характеристик композитных материалов на основе аэрогеля НКЦ, импрегнированного феноматами, на основе данных спектроскопии ЯМР <i>Соборнова В.В., Белов К.В., Дышин А.А., Толстой П.М., Муллоярова В.В., Киселев М.Г., Ходов И.А.</i>	126
Окисление гваякола пероксидом водорода в мягких условиях <i>Соколова А.В., Бородкина П.М., Акинчиц М.В., Маркова М.Е., Степачёва А.А.</i>	127
Влияние содержания оксидов меди(II) и церия(IV) на эффективность реакции гидрирования фурфурола до фурфурилового спирта на кремниевых носителях <i>Солнцева А.В., Фёдорова А.А., Кнотько А.В., Сорокина Н.М., Шестеркина А.А.</i>	128
Влияние дефектов и легирующих атомов в структуре наночастиц никеля полимерстабилизированных каталитических систем на адсорбцию водорода и непредельных субстратов реакций гидрирования <i>Спиридонова Ю.В., Быков А.В.</i>	129
Исследование влияния эфиров жирных кислот на физико-химические характеристики дизельного топлива <i>Степанов Е.Д., Буров Е.А.</i>	130
Электрохимическое исследование антикоррозионных покрытий, модифицированных углеродными наноматериалами <i>Столбов Д.Н., Яковлев С.В., Сулова Е.В., Иванов А.С.</i>	131
Получение компонентов экологически чистых топлив прямым и двухстадийным ожижением биоуглей <i>Сулейманов Х.А., Куликова М.В.</i>	132
Кинетика образования оксидных плёнок на поверхности сплавов вентильных металлов <i>Сюрин А.О., Фишгойт Л.А.</i>	133
Цеолит 13X: Влияние структуры поверхности на адсорбцию малых органических молекул <i>Тагирова М.Р., Ланин С.Н.</i>	134
Влияние адсорбционной-индуцированной сегрегации на активность модифицированного платиной катализатора $\text{CrO}_x\text{-ZrO}_2/\text{SiO}_2$ неокислительного дегидрирования пропана <i>Ужув И.К., Голубина Е.В.</i>	135
Флуктуации температуры водно-этанольной смеси в проточной системе при высоких параметрах состояния <i>Федосеев Т.В., Богдан Т.В., Богородский С.Э., Богдан В.И.</i>	136
Влияние твёрдого электролита на работу потенциометрических сенсоров на водород в сухом воздухе <i>Фрейман В.М., Стариков А.С., Талагаева Н.В., Леонова Л.С., Винюков А.В.</i>	137
Изучение влияния физико-химических параметров реакции на полноту каталитического окисления L-сорбозы до 2-кето-L-гулоновой кислоты <i>Цветков Д.Ю., Петрова А.И., Лакина Н.В., Долуда В.Ю., Сульман М.Г.</i>	138
Низкотемпературная теплоемкость 6- (4- метоксифенил)- 1,5- диазабицикло[3.1.0]гексана <i>Чумаков А.А., Кузнецов В.В., Дружинина А.И.</i>	139
Водородсорбционные характеристики модифицированных интерметаллидов TiFe и их композитов <i>Шамов И.Д., Санин В.В., Арбузов А.А., Лотоцкий М.В., Тарасов Б.П.</i>	140

Высокотемпературная реакторная ячейка с контролируемой атмосферой для «in situ» синхротронных рентген-дифракционных исследований <i>И.Г. Шептун, А.Ю. Серегин, О.Ю. Грапенко, В.А. Шуваева, Н.В. Тер-Оганесян</i>	141
Синтез, спектральные характеристики и профиль возможной биологической активности комплексных соединений лантана (III), содержащих N- и O- донорные органические лиганды <i>Шубина А.А., Орлова Т.Н.</i>	142
Взаимодействие оксида железа с 5-фторурацилом. Экспериментальное и расчетное исследование <i>Шумилкин А.С., Ермилов А.Ю., Верная О.И., Шабатина Т.И.</i>	143
Исследование термоустойчивости полиэтилентерефталата (ПЭТ) <i>Щенявский Д.В.</i>	144
Селективное гидрирование примесей ацетилена в этилене на Pd–Ag катализаторах в условиях фронтальной схемы <i>Якубов К.Ш., Ваулина А.Е., Баева Г.Н., Смирнова Н.С., Машковский И.С., Стахеев А.Ю.</i>	145
Безметалльный катализ в электрохимическом способе получения аммиака <i>Дмитриев Д.А., Кузнецова И.И., Захаров В.Н., Культин Д.Ю., Лебедева О.К., Чернышев В.В., Асланов Л.А., Кустов Л.М.</i>	146
O ₃ -промотированное NH ₃ -СКВ оксидов азота на VW/TiO ₂ нанесенном на сотовый носитель <i>Парамошин И.В., Бокарев Д.А., Баева Г.Н., Стахеев А.Ю.</i>	147
Влияние металла (Fe, Co, Cu) на активность катализатора Me-FER в реакции разложения N ₂ O <i>Макова А.С., Кустов Л.М.</i>	148
Систематическое описание структур фаз внедрения <i>Гаранин Д.К., Засурская Л.А.</i>	149
Влияние серебра на эффективность работы палладиевых катализаторов селективного гидрирования диенов <i>Гетманова А.Д., Маслов И.А.</i>	150
Катализаторы гидрирования CO ₂ на основе СВС-ВЭС, полученные выщелачиванием под воздействием ультразвука <i>Ромазева К.А., Пугачева Е.В., Борщ В.Н.</i>	151

**Тезисы докладов
ведущих ученых**

Адсорбционно-индуцированная сегрегация как способ управления составом поверхности и свойствами биметаллических катализаторов

**Бухтияров А.В.,^{1*} Панафидин М.А.,¹ Машковский И.С.,² Зубавичус Я.В.,¹
Просвирин И.П.,³ Бухтияров В.И.,³ Стахеев А.Ю.²**

**Заместитель директора по научной работе*

¹ЦКП «СКИФ» Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
Наукоград Кольцово, Россия

²Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

³Институт катализа СО РАН, Новосибирск, Россия

E-mail: avb@catalysis.ru

В докладе рассмотрена природа сегрегационных процессов для двух типов систем: твердых растворов замещения (Pd-Au, Pd-Ag) и интерметаллических соединений (Pd-In), а также продемонстрирована возможность их использования для «тонкой настройки» активных центров на поверхности катализаторов. При помощи методов РФЭС, ИК адсорбированного СО и каталитического тестирования показано, что сегрегационные эффекты являются эффективным инструментом для настройки поверхности, позволяющим оптимизировать активность и селективность катализатора в реакциях селективного гидрирования тройной C≡C связи.

Ключевые слова: адсорбционно-индуцированная сегрегация, палладий, биметаллический катализатор, интерметаллическое соединение, твёрдый раствор замещения, селективное гидрирование.

Благодарность: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ЦКП «СКИФ» Института катализа СО РАН (FWUR-2024-0042).

Adsorption-induced segregation as a tool for turning the surface composition and properties of bimetallic catalysts

**Bukhtiyarov A.V.,^{1*} Panafidin M.A.,¹ Mashkovsky I.S.,² Zubavichus Y.V.,¹ Prosvirin I.P.,³
Bukhtiyarov V.I.,³ Stakheev A.Yu.²**

**Deputy Director of science*

¹ Synchrotron Radiation Facility SKIF, Borekov Institute of Catalysis, Kol'tsovo, Russian Federation

² N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

³ Borekov Institute of Catalysis, Novosibirsk, Russian Federation

E-mail: avb@catalysis.ru

The lecture discusses the nature of segregation processes for two types of systems: substitutional solid solutions (Pd-Au, Pd-Ag) and intermetallic compounds (Pd-In), and demonstrates the potential for their use for fine tuning of active sites on the catalyst surface. Using XPS, IR spectroscopy of adsorbed CO, and catalytic testing, it is demonstrated that adsorption-induced segregation effects are an effective tool for surface tuning, enabling optimization of catalyst activity and selectivity in selective hydrogenation reactions of the C≡C triple bond.

Keywords: adsorption-induced segregation, palladium, bimetallic catalyst, intermetallic compound, substitution solid solution, selective hydrogenation.

Фитомайнинг – концентрирование металлов растениями: геохимические и технологические следствия

Варфоломеев С.Д.^{1*,2}

**Директор*

¹*Института физико-химических основ функционирования сетей нейронов и искусственного интеллекта МГУ имени М.В. Ломоносова*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: sdvarf@bk.ru

Рассмотрено явление фитомайнинга – аккумуляирования растениями металлов, включая благородные и редкоземельные элементы, основанного на способности растений выкачивать из почвы колоссальное количество воды. Разработаны и детально проанализированы кинетические модели процесса, показана двухкамерность аккумуляции, проведена верификация моделей экспериментальными данными. Анализируется роль фитомайнинга в формировании угольных месторождений. Проведен обобщённый анализ содержания металлов в природных углях России и в техногенных минеральных образованиях – зольных отходах угольных электростанций. Дан обзор содержания металлов в отходах наиболее значимых электростанций России. Показано, что техногенные минеральные образования – источник в высшей степени востребованных металлов, а также повышенной экологической опасности.

Ключевые слова: фитомайнинг, металлы, кинетические модели, техногенные минеральные образования

Phytomining – metal concentration by plants: geochemical and technological implications

Varfolomeev S.D.^{1*,2}

**Director*

¹*Institute of Physicochemical Foundations of Neuron Networks and Artificial Intelligence,
M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia*

²*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: sdvarf@bk.ru

This lecture examines the phenomenon of phytomining – the accumulation of metals, including precious and rare earth elements, by plants. This accumulation is based on the plants' ability to extract colossal amounts of water from the soil. Kinetic models of the process are developed and analyzed in detail, demonstrating a two-chambered accumulation process, and the models are verified with experimental data. The role of phytomining in the formation of coal deposits is analyzed. A generalized analysis of metal content in natural coals in Russia and in man-made mineral formations—ash waste from coal-fired power plants – is conducted. An overview of metal content in waste from Russia's most significant power plants is provided. It is shown that man-made mineral formations are a source of highly sought-after metals and pose a significant environmental hazard.

Keywords: phytomining, metals, kinetic models, man-made mineral formations

Синтез каолинитовых наноструктур с новой “репейнико”-подобной морфологией, обладающих высокой каталитической активностью в реакции изомеризации α -пинена

Голубева О.Ю.,^{1*} Сидоренко А.Ю.,² Парих К.А.¹

**Заведующий лабораторией химии силикатных сорбентов*

¹ *Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова*

НИЦ «Курчатовский институт» —

Институт химии силикатов имени И.В. Гребенщикова РАН, Санкт-Петербург, Россия

² *Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск, Республика Беларусь*

E-mail: olga_isc@mail.ru

В гидротермальных условиях впервые синтезирован иерархически-структурированный каолинит ($Al_2Si_2O_5(OH)_4$) с частицами сферической формы, состоящими из изогнутых псевдотрубчатых нанопластинок. Каолинит с новой “репейнико-подобной” морфологией (“burdock-like” morphology) характеризуется высокой степенью кристалличности с удельной поверхностью $54 \text{ м}^2/\text{г}$, что в 3.9 раза больше, и концентрацией кислотных центров $39.7 \text{ мкмоль}/\text{г}$, что в 4.7 раза выше, чем у природного каолинита пластинчатой формы. Исследование кислотных свойств методом ИК-спектроскопии адсорбированного пиридина показало высокую концентрацию активных центров с преобладанием кислотных центров типа Льюиса. Синтетический каолинит с новой морфологией продемонстрировал значительную каталитическую активность в промышленно важной реакции изомеризации α -пинена. Конверсия α -пинена на синтетическом каолините составила 99.9% через 1 час, тогда как природный каолинит показал незначительную активность (5.5%). Полученные результаты указывают на перспективность использования этого материала в гетерогенном катализе.

Ключевые слова: каолинит, гидротермальный синтез, нанотрубки, каталитическая активность, α -пинен, изомеризация

Работа проводится при поддержке Санкт-Петербургского научного фонда (конкурс совместных проектов с республикой Беларусь, проект “Каталитические системы на основе синтетических алюмосиликатов для получения продуктов различного функционального назначения из возобновляемого сырья”, 2026-2027 гг.).

Synthesis of kaolinite nanostructures with a new “burdock”-like morphology possessing high catalytic activity in α -pinene isomerization reaction

Golubeva O.Yu.,^{1*} Sidorenko A.Yu.,² Parikh K.A.¹

**Head of the Laboratory of Silicate Sorbent Chemistry, Chief Researcher*

¹ *B.P. Konstantinov Petersburg Institute of Nuclear Physics” of*

National Research Center “Kurchatov Institute” -

I.V. Grebenshchikov Institute of Silicate Chemistry RAS, St. Petersburg, Russia

² *Institute of Chemistry of New Materials, National Academy of Sciences of Belarus,*

Minsk, Republic of Belarus

E-mail: olga_isc@mail.ru

Галлуазитные трубки – «нанореакторы» синтеза углеводородов из CO и H₂

Елисеев О.Л.,^{1*} Мазурова К.М.,² Казанцев Р.В.,¹ Смирнова Е.М.,²
Демихова Н.Р.,² Ставицкая А.В.²

**заместитель директора по научной работе*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Российский государственный университет нефти и газа (национальный
исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

E-mail: oleg@ioc.ac.ru

Процессы «газ в жидкость», «уголь в жидкость», «биомасса в жидкость» являются перспективными процессами для производства горюче-смазочных материалов, высокочистых парафинов, продуктов основного органического синтеза из ненефтяного сырья. Актуальной является задача повышение активности и селективности катализаторов гидрирования CO. Нами впервые предложено использовать в качестве носителя для Ru и Ru-Co катализаторов синтеза Фишера–Тропша природный алюмосиликат галлуазит, имеющий уникальное строение нанотрубок. Описаны методы приготовления моно- и биметаллических Ru и Co катализаторов с селективной локализацией кристаллитов металлов внутри и снаружи нанотрубок, их физико-химические и каталитические свойства.

Ключевые слова: синтез-газ, высшие углеводороды, галлуазит, кобальтовые катализаторы, синтез Фишера–Тропша

Работа выполнена при поддержке РФФ, грант № 24-73-10225

Halloysite tubes as "nanoreactors" for the synthesis of hydrocarbons from CO and H₂

Eliseev O.,^{1*} Mazurova K.,² Kazantsev R.,¹ Smirnova E.,² Demikhova N.,² Stavitskaya A.²

**Deputy Director of science*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*
²*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia*

E-mail: oleg@ioc.ac.ru

Gas-to-liquid, coal-to-liquid, and biomass-to-liquid processes are promising routes to motor fuels, lubricants, high-purity paraffins, and basic organic synthesis products from non-petroleum feedstocks. Improving the activity and selectivity of CO hydrogenation catalysts is still an issue. We are the first to propose using halloysite, a natural aluminosilicate with a unique nanotube structure, as a support for Ru and Ru-Co Fischer–Tropsch synthesis catalysts. Methods for preparing mono- and bimetallic Ru and Co catalysts with selective localization of metal crystallites inside and outside the nanotubes, as well as their physicochemical and catalytic properties, are described.

Keywords: synthesis gas, higher hydrocarbons, Halloysite, cobalt catalysts, Fischer–Tropsch synthesis.

От механизма синтеза цеолитов к созданию высокоэффективных цеолитных катализаторов

Иванова И.И.*

**Заведующий лабораторией адсорбции и катализа
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: irinaiivanova@yahoo.com*

*В докладе обобщены результаты работ лаборатории адсорбции и катализа Химического факультета МГУ, направленных на разработку методов установления механизмов синтеза и создание научных основ приготовления цеолитных катализаторов. В работе предложен новый подход к исследованию механизмов синтеза, основанный на применении спектральных методов *in situ*. Получены фундаментальные данные о механизмах формирования цеолитов и разработан новый способ их синтеза, основанный на методе парофазной кристаллизации. На основе проведенных фундаментальных исследований созданы новые цеолитные материалы, обладающие уникальными каталитическими свойствами: иерархические молекулярные сита, нанокристаллические цеолиты, цеолиты с изоморфным замещением на Sn, Zr и Ti, обладающие высокой льюисовской кислотностью и окислительно-восстановительными свойствами, Cs-содержащие цеолиты с основными свойствами и др. На базе этих материалов разработаны новые высокоэффективные катализаторы процессов каталитического крекинга и гидроконверсии алканов, олигомеризации олефинов, алкилирования и диспропорционирования ароматических углеводородов, эпоксидирования пропилена, окисления циклогексана в капролактон, а также гидроконверсии углекислого газа в олефиновые и ароматические углеводороды.*

Ключевые слова: механизмы синтеза цеолитов, иерархические цеолиты, нанокристаллические цеолиты, крекинг, гидроконверсия, алкилирование, диспропорционирование, эпоксидирование.

Благодарность: Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 24-13-00103.

From the mechanism of zeolite synthesis to the creation of highly efficient zeolite catalysts

Ivanova I.I.*

**Chief Researcher of the Laboratory of Adsorption and Catalysis
M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: irinaiivanova@yahoo.com*

Переработка различных видов углеродсодержащего сырья с использованием дисперсных катализаторов

Максимов А.Л.^{1*,2}

**Директор*

¹ *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: max@ips.ac.ru

Традиционный подход к каталитической переработке углеродсодержащего сырья основан на организации процесса в проточной системе с использованием классических гетерогенных катализаторов. Переход к нетрадиционному сырью, такому как нефтяные остатки, полимерные отходы, биосырье различных типов существенно затрудняет эффективную реализацию таких процессов. Из-за наличия в реакционной системе молекул сырья размером от нескольких до сотен нанометров, высокого риска потери агрегативной устойчивости в процессе превращения сложного сырья гетерогенные катализаторы подвергаются быстрой дезактивации. В случае переработки азотсодержащего (полимерные отходы, ряд видов биомассы) и кислородсодержащего сырья (кислородсодержащие полимеры, биомасса), дополнительная дезактивация связана с формированием монооксида углерода, аммиака, воды и т.п. Поэтому существующие технологические подходы как правило основаны на термической деполимеризации такого сырья в низкомолекулярные соединения с их переработкой в конечные продукты на гетерогенных катализаторах.

*Альтернативой такому подходу является создание процессов, в которых катализатор по своим размерам сравним с размером молекул сырья, причем формирование каталитически активного «коктейля» различных по строению и природе частиц происходит непосредственно в реакционной среде из использованных предшественников. Такие каталитические системы нашли практическое применение в гидроконверсии гудрона в легкую синтетическую нефть и в настоящее время используются в промышленности. В докладе будут рассмотрены различные варианты применения таких систем для гидроконверсии тяжелых нефтяных остатков, полимерных отходов, в том числе кислородсодержащих полимеров, биосырья. Будут представлены результаты исследования каталитических систем, формирующихся *in situ* из соединений молибдена, вольфрама, никеля, кобальта с образованием различных активных дисперсий (сульфиды, фосфиды, оксиды и др.), описаны основные закономерности поведения таких систем в указанных реакциях.*

Processing of various types of carbon-containing raw materials using dispersed catalysts

Maksimov A.L.^{1,2}

¹ *A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

² *M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: max@ips.ac.ru

Металлогидриды и возможные варианты их промышленного применения в газопереработке и газохимии

Рябченко П.В.*

**Директор
ООО «Иркутская Нефтяная Компания», Департамент газохимии,
Иркутск, Россия
ryabchenko_pv@irkutskoil.ru*

В докладе приводится анализ практического опыта эксплуатации блока очистки гелия при реализации проекта производства жидкого гелия на объектах ООО «Иркутская Нефтяная Компания». Рассмотрены возможности применения металлогидридов для очистки гелий-водородных смесей от водорода, проанализированы преимущества и недостатки предлагаемых технических решений и задачи, стоящие перед разработчиками. Рассмотрены вопросы активации водорода с помощью металлогидридов и возможности практического применения этого эффекта в процессах газохимии.

Ключевые слова: металлогидриды, очистка гелия от водорода, активация водорода, газопереработка и газохимия.

Metal hydrides and their possible industrial applications in gas processing and gas chemistry

Ryabchenko P.V.*

**Director
Irkutsk Oil Company, Gas Chemistry Department, Irkutsk, Russia
ryabchenko_pv@irkutskoil.ru*

This report analyzes practical experience in operating a helium purification unit during the liquid helium production project at Irkutsk Oil Company. The paper examines the potential of using metal hydrides to remove hydrogen from helium-hydrogen mixtures, analyzes the advantages and disadvantages of the proposed technical solutions, and addresses the challenges facing developers. It also examines hydrogen activation using metal hydrides and the potential for practical application of this effect in gas chemistry processes.

Keywords: metal hydrides, helium purification, hydrogen activation, gas processing and gas chemistry.

Вода при высоких параметрах состояния: реагент, реакционная среда и катализатор процессов переработки органического сырья и синтеза сложных оксидов

Синев М.Ю.*

**Ведущий научный сотрудник*

*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия
mysinev@yandex.ru*

В физико-химическом поведении воды наблюдается ряд аномалий, отличающих её от других веществ, особенно при высоких параметрах состояния (температуре и плотности/давлении). В окрестностях критической точки воды можно выделить ряд областей, в которых её физическое состояние имеет качественные особенности:

- разреженный пар;*
- докритическая вода (слабая зависимость плотность от давления);*
- суб-критическая вода;*
- плотный пар;*
- сверхкритический флюид;*
- близкий к идеальному газ (зависимость плотность от давления близка к пропорциональной).*

Границы между этими областями, не являющимися жёстко очерченными, задаются значениями температуры и плотности, которые определяют соотношение энергий теплового движения и межмолекулярных взаимодействий. Соответственно, это соотношение определяет многие важнейшие физико-химические свойства, такие как диэлектрическая постоянная, степень диссоциации, сольватирующая/растворяющая способность.

Особое внимание уделяется реакционной способности воды при высоких параметрах состояния, в частности, тому, какими характеристиками и параметрами определяются направление и скорость процессов в присутствии (или иначе – в среде) ВФ. Этот вопрос более подробно рассматривается на примере реакций некоторых видов органических веществ, а также превращений в твёрдых оксидах при обработке в среде ВФ – структурирования, фазообразования, синтеза и модифицирования сложных оксидов. Показано, что вода в этих процессах играет роль не столько реакционной среды, сколько реагента и в ряде случаев – катализатора превращений.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-13-00360, <https://rscf.ru/project/23-13-00360/>.

Water at high state parameters: reagent, reaction medium and catalyst for the processing of organic raw materials and the synthesis of complex oxides

Sinev M. Yu. *

**Leading Researcher*

*N.N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics,
Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

Порошкообразные MeAl сплавы как прекурсоры керамометаллических катализаторов и носителей

Тихов С.Ф.*

**Главный научный сотрудник
Института катализа им. Г.К.Борескова СО Российской академии наук,
Новосибирск, Россия
E-mail: tikhov@catalysis.ru*

Исследованы закономерности механохимической обработки (МА) Fe,Cu-Al порошков. Методами РСА, ЭМ, МС, ТА, РФЭС, ЭДС, а также адсорбционными методами. исследованы полученные из нанокompозитных продуктов МА керамометаллы как катализаторы сжигания топлив и паровой конверсии СО.

Ключевые слова: мехактивация MeAl порошков, нанокompозиты, керамометаллические катализаторы сжигания топлив и конверсии СО.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0033).

Powdered MeAl alloys as precursors of ceramometal catalysts and supports

Tikhov S.F.*

**Chief Researcher
Boreskov Institute of Catalysis SB Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia
E-mail: tikhov@catalysis.ru*

The mechanochemical processing of Fe,Cu-Al powders was studied. The evolution of the particle microstructure from layered to homogeneous was revealed, as well as changes in the phase composition of the resulting nanocomposites. Porous ceramometals CuAlO/CuAl and CuO/Al₂O₃/FeAlO/FeAl were synthesized by hydrothermal processing of the powders followed by heat treatment in air. The ceramometals obtained from the nanocomposite MA products were studied as catalysts for fuel combustion and steam reforming of CO using X-ray diffraction, electron microscopy, mass spectrometry, TA, XPS, EDX and adsorption methods. The advantages of ceramometallic catalysts are shown to be due to their high strength, developed macroporous structure, and thermal conductivity

Keywords: mechanical activation of MeAl powders, nanocomposites, ceramic-metal catalysts for fuel combustion and CO conversion.

**Тезисы докладов
молодых ученых**

Синтез катализатора феррита кобальта методом Печини и его использование в конденсации ацетона

Абарина В.А.,^{1,*2} Машченко Н.В.,² Богдан Т.В.,^{1,2} Коклин А.Е.,² Богдан В.И.^{1,2}

**Студент, 2 курс*

¹*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

²*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: vera2006av@yandex.ru

*Методом Печини синтезированы образцы феррита кобальта CoFe_2O_4 с прокаливанием при 500 и 1000 °С. Образцы охарактеризованы методами рентгенофазового анализа, сканирующей электронной микроскопии, *in situ* магнитометрии. Изучена альдольная конденсация ацетона на CoFe_2O_4 при 400 °С и 12.0 МПа: конверсия ацетона составила 9–22% при селективности по окиси мезитила 69%.*

Ключевые слова: феррит кобальта, метод Печини, ацетон, альдольная конденсация.

Synthesis of a cobalt ferrite catalyst by the Pechini method and its use in acetone condensation

Abarina V.A.,^{1,*2} Mashchenko N.V.,² Bogdan T.V.,^{1,2} Koklin A.E.,² Bogdan V.I.^{1,2}

**Student*

¹*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

²*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: vera2006av@yandex.ru

*Cobalt ferrite CoFe_2O_4 samples were synthesized using the Pechini method, and were calcinated at 500 and 1000 °C. The samples were characterized by XRD, scanning electron microscopy, and *in situ* magnetometry. The aldol condensation of acetone on CoFe_2O_4 was studied at 400 °C and 12.0 MPa: the acetone conversion was 9–22% with a selectivity to mesityl oxides of 69%.*

Keywords: cobalt ferrite, Pechini method, X-ray phase analysis, acetone, aldol condensation.

Сверхкритическое водное окисление модельной жидкости, имитирующей сточные воды производства бисфенола-А

Аетов А.У.,* Мазанов С.В., Соловьев В.О., Левицков В.В., Маннанова А.А.

**Старший преподаватель*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: aetovalmaz@mail.ru

В работе экспериментально исследовано окисление модели концентрированного водного стока производства бисфенола-А, представляющей собой систему «вода-фенол-ацетон». Процесс проводили в непрерывном режиме в сверхкритических флюидных условиях в диапазоне температур 523–873 К и давлении 25 МПа. Показано, что эффективность окисления, оцениваемая по снижению химического потребления кислорода (ХПК), существенно возрастает с увеличением температуры, времени контакта и коэффициента избытка кислорода. Установлено, что при оптимальных параметрах ($T = 873$ К, $КИК = 30$, $\tau = 4$ мин) достигается степень конверсии органических загрязнителей до 98.3%, а значение ХПК очищенной воды снижается до 94 мг O_2 /л, что соответствует нормативам для технической воды.

Ключевые слова: сверхкритическое водное окисление, фенол, ацетон, сточные воды, очистка, химическое потребление кислорода, степень конверсии.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (соглашение № 22-19-00117-П) за финансовую поддержку исследования.

Supercritical water oxidation of a model fluid simulating bisphenol-A production wastewater

Aetov A.U.,* Mazanov S.V., Solovyov V.O., Levitskov V.V., Mannanova A.A.

**Senior Lecturer*

Kazan National University of Research and Technology, Kazan, Russia

E-mail: aetovalmaz@mail.ru

This paper experimentally studies the oxidation of a model of concentrated bisphenol-A production wastewater, which is a water-phenol-acetone system. The process was carried out continuously under supercritical fluid conditions in the temperature range of 523–873 K and a pressure of 25 MPa. It is shown that the oxidation efficiency, assessed by the reduction in chemical oxygen demand (COD), increases significantly with increasing temperature, contact time, and oxygen excess ratio. It was found that under optimal parameters ($T = 873$ K, $COD = 30$, $\tau = 4$ min), a conversion rate of organic pollutants of up to 98.3% is achieved, and the COD value of the purified water decreases to 94 mg O_2 /L, which complies with the standards for industrial water.

Keywords: supercritical water oxidation, phenol, acetone, wastewater, purification, chemical oxygen demand, degree of conversion.

Кинетическое исследование окисления олеиновой кислоты пероксидом водорода в сверхкритической воде

Аетов А.У.,* Мазанов С.В., Соловьев В.О., Закирова Л.Л.

**Старший преподаватель*

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

E-mail: aetovalmaz@mail.ru

Исследована кинетика окисления олеиновой кислоты пероксидом водорода в среде сверхкритической воды. Эксперименты проводились в установке периодического действия в температурном диапазоне 673–723 К и при давлении 29.4 МПа. Для интенсификации процесса использована ультразвуковая обработка с целью получения устойчивой водной эмульсии реагентов. Эффективность окисления оценивалась по изменению химического потребления кислорода. На основе кинетических данных рассчитаны константы скорости реакции, энергия активации и степень превращения субстрата. Показано, что процесс описывается кинетикой первого порядка и позволяет достичь высоких степеней окисления в исследуемых условиях.

Ключевые слова: сверхкритическое водное окисление, олеиновая кислота, кинетика, химическое потребление кислорода, ультразвуковая эмульсия, пероксид водорода.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (соглашение № 22-19-00117-П) за финансовую поддержку исследования.

A Kinetic Study of Oleic Acid Oxidation with Hydrogen Peroxide in Supercritical Water

Aetov A. U.,* Mazanov S. V., Soloviev V. O., Zakirova L. L.

**Senior Lecturer*

Kazan National University of Research and Technology, Kazan, Russia

E-mail: aetovalmaz@mail.ru

This paper presents a study of the kinetics of oleic acid oxidation with hydrogen peroxide in supercritical water. Experiments were conducted in a batch reactor at temperatures ranging from 673 to 723 K and at a pressure of 29.4 MPa. Ultrasonic treatment was used to intensify the process and obtain a stable aqueous emulsion of the reactants. Oxidation efficiency was assessed by measuring changes in chemical oxygen demand. Based on the kinetic data, the reaction rate constants, activation energy, and substrate conversion were calculated. It was shown that the process is described by first-order kinetics and enables high oxidation states to be achieved under the studied conditions.

Keywords: supercritical water oxidation, oleic acid, kinetics, chemical oxygen demand, ultrasonic emulsion, hydrogen peroxide.

Катализатор $\text{CaSn}(\text{OH})_6$, полученный в условиях ультразвуковой активации, в альдольно-кродононой конденсации ацетона

Азаров К.В.,^{1,2*} Богдан Т.В.,^{1,3} Машенко Н.В.,¹ Богородский С.Э.,¹ Богдан В.И.^{1,3}

**Студент, 4 курс бакалавриата*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: azkrestian@gmail.com

*Серия кристаллических образцов $\text{CaSn}(\text{OH})_6$ получена методом соосаждения с ультразвуковой обработкой разной мощности (30%, 45%, 60%, 75%), исследованы их физико-химические характеристики и каталитическая активность в реакции альдольно-кродононой конденсации ацетона при 300°C и 12.0 МПа. Образцы, синтезированные в условиях ультразвуковой обработки, обладают большей площадью поверхности и характеризуются более высокой каталитической активностью по сравнению с необработанным ультразвуком образцом. Установлена нелинейная зависимость площади удельной поверхности катализаторов от мощности излучателя. Для всех образцов характерна умеренная селективность по окиси мезитила ($S \approx 20\%$). Образец, обработанный при 45% мощности, обладает наиболее развитой поверхностью (128 м²/г), наибольшей активностью ($K = 28.2\%$), а также наименьшей склонностью к образованию продуктов уплотнения на его поверхности ($S_{(C9+)} = 4\%$).
Ключевые слова: катализатор $\text{CaSn}(\text{OH})_6$, ультразвуковая обработка, БЭТ, альдольно-кродононая конденсация, ацетон.*

$\text{CaSn}(\text{OH})_6$ catalyst obtained under ultrasonic activation conditions in aldol-croton condensation of acetone

K.V. Azarov,^{1,2*} T.V. Bogdan,^{1,3} N.V. Mashchenko,¹ S.E. Bogorodskiy,¹ V.I. Bogdan^{1,3}

**4th year underGraduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: azkrestian@gmail.com

A series of $\text{CaSn}(\text{OH})_6$ crystalline samples were obtained by the method of co-deposition with ultrasonic treatment of different power (30%, 45%, 60%, 75%), Their physicochemical characteristics and catalytic activity in the aldol-croton condensation of acetone at 300°C and 12.0 MPa have been studied. The samples synthesized by ultrasonic treatment have a larger surface area and are characterized by higher catalytic activity compared to the sample untreated by ultrasound. A nonlinear dependence of the specific surface area of the catalysts on the emitter power has been established. Moderate mesityl oxide selectivity ($S \approx 20\%$) is typical for all samples. The sample processed at 45% power has the most developed surface (128 m²/g), the highest activity ($K = 28.2\%$), and the least tendency to form compaction products on its surface ($S_{(C9+)} = 4\%$).

Keywords: calcium hexahydroxystannate $\text{CaSn}(\text{OH})_6$, ultrasonic treatment, catalyst, BET, aldol-croton condensation, acetone.

Влияние окислительного стресса как модулятора активности Na⁺/K⁺-АТФазы: исследование методами микроскопии сверхвысокого разрешения

Айтмухамбетова И.Р.,^{1,2*} Коркунов Р.Ю.¹

**Аспирант*

¹ Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

² Тюменский государственный медицинский университет Министерства здравоохранения Российской Федерации, Тюмень, Россия

E-mail: ilnara.serikova.01@bk.ru

Исследовано влияние окислительного стресса на динамические характеристики транспортных АТФаз в клеточной мембране с использованием методов флуоресцентной микроскопии сверхвысокого разрешения. Дополнительно исследована динамика мембранного белка SNAP25B в клетках HEK293TN в нормальных условиях и при действии H₂O₂.

Ключевые слова: транспортные АТФазы, окислительный стресс, модуляторы, флуоресцентная микроскопия, PALM, коэффициент диффузии, мембранные белки.

Oxidative stress as a modulator of Na⁺/K⁺-ATPase activity: investigation by super-resolution microscopy methods

Aitmukhambetova I.R.*^{1,2} Korkunov R.Y.¹

**Graduate student*

¹ Tyumen State University, Tyumen, Russia

² Tyumen State Medical University, Ministry of Health of Russian Federation, Tyumen, Russia

E-mail: ilnara.serikova.01@bk.ru

The present study investigated the influence of oxidative stress on the dynamic characteristics of transport ATPases in cell membranes using super-resolution fluorescence microscopy methods. Additionally, the dynamics of membrane protein SNAP25B in HEK293TN cells under normal conditions and under H₂O₂ treatment were investigated.

Keywords: transport ATPases, oxidative stress, modulators, fluorescence microscopy, PALM, diffusion coefficient, membrane proteins.

Нетканые ультраволокнистые материалы на основе полимерных композиций с модифицирующими углеродсодержащими добавками: структура, свойства, применение

Алешин Н.О.,^{1*} Кочеткова В.А.,¹ Коростелев Н.В.,¹ Сафиева Р.З.,¹ Ольхов А.А.²

**Студент, 4 курс*

¹*Российский государственный университет нефти и газа (научно-исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

²*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: mailtonikolay@yandex.ru

Введение модифицирующих углеродных добавок в полимерные композиции позволяет получать материалы, обладающие улучшенными эксплуатационными характеристиками для применения в различных областях (медицине, строительной индустрии, сельском хозяйстве, нефтяной отрасли и т.д.). Полимеры выполняют роль структурообразующей среды, обеспечивая формирование стабильных прядильных расплавов/растворов и равномерное распределение модификаторов. Так, введение аморфного несовершенного углерода нефтяного происхождения в состав полимерной матрицы, как правило асфальтенов, методом диспергирования модификатора в расплаве или растворе полимера с последующим испарением растворителя и получением модифицированных композитов привело к проведению полномасштабных исследований, которые стали основой серии патентоспособных решений. В результате внедрения этих решений организовано производство полимербитумных материалов в дорожном строительстве, другие решения ждут своего внедрения в качестве асфальтено-полимерных композитов как новых перспективных материалов с добавленной стоимостью в электротехнической области.

Ключевые слова: полилактид, асфальтены, фуллереновая чернь, сорбционные материалы, ультраволокнистые материалы, электроспиннинг.

Non-woven ultra-fibrous materials based on polymer compositions with carbon-containing modifying additives: structure, properties, and application

Aleshin N.O.,^{1*} Kochetkova V.A.,¹ Korostelev N.V.,¹ Safieva R.Z.,¹ Olkhov A.A.²

**Student, 4th year*

¹*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia*

²*N.M. Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: mailtonikolay@yandex.ru

The introduction of modifying carbon additives into polymer compositions allows for the production of materials with improved performance characteristics for use in various fields (medicine, construction, agriculture, the oil industry, etc.). Polymers act as a structuring medium, ensuring the formation of stable spinning melts/solutions and the uniform distribution of modifiers. Thus, the introduction of amorphous imperfect carbon of petroleum origin into the polymer matrix, usually asphaltenes, by dispersing the modifier in a polymer melt or solution, followed by solvent evaporation and the production of modified composites, led to the conduct of full-scale research, which became the basis for a series of patentable solutions. As a result of the implementation of these solutions, the production of polymer-bitumen materials in road construction has been organized, and other solutions are awaiting implementation as asphalt-polymer coals.

Keywords: polylactide, asphaltenes, fullerene black, sorption materials, ultra-fibrous materials, electrospinning.

Динамика лазерно-индуцированного плазмообразования в CO₂

Ашарчук Н.М.,* Епифанов Е.О., Мареев Е.И.

**Аспирант*

*Отделение Институт фотонных технологий, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
E-mail: nikaasharchuk@yandex.ru*

Сверхкритические флюиды пользуются большой популярностью в многочисленных областях науки, техники и промышленности, что вызывает повышенный интерес в исследовании свойств данного вещества. Переход в сверхкритическую область может быть осуществлен при острой фокусировке коротких и ультракоротких лазерных импульсов в объем среды, где может быть достигнута высокая плотность энергии (~5-10 кДж/см³), и в среде образуется лазерно-индуцированная плазма. Из-за высоких давлений и температур в плазме в среде инициируются различные физико-химические процессы (например, оптический пробой, ударные волны, кавитация). Исследование характеристик плазмы является актуальной задачей и позволяет лучше понимать процессы, происходящие в сверхкритическом веществе. В данной работе представлены результаты численного и экспериментального исследования зависимости фемтосекундного лазерного излучения на порог образования плазмы в сверхкритическом диоксиде углерода.

Ключевые слова: сверхкритический флюид, сверхкритический диоксид углерода, лазерно-индуцированная плазма, ударные волны.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 25-79-20057.

Dynamics of laser-induced plasma formation in CO₂

Asharchuk N.,* Epifanov E., Mareev E.

**Graduate student*

*Institute of Photon Technologies Department, Kurchatov Complex of Crystallography and Photonics, NRC "Kurchatov Institute", Moscow, Russia
E-mail: nikaasharchuk@yandex.ru*

Supercritical fluids are very popular in numerous fields of science, technology and industry, which arouses increased interest in the study of the properties of this substance. The transition to the supercritical region can be carried out by tightly focusing short and ultrashort laser pulses into the volume of the medium, where a high energy density (~5-10 kJ/cm³) can be achieved, and a laser-induced plasma is formed in the medium. Due to the high pressures and temperatures in the plasma, various physico-chemical processes are initiated in the medium (for example, optical breakdown, shock waves, cavitation). The study of plasma characteristics is an urgent task and allows for a better understanding of the processes occurring in supercritical fluids. This paper presents the results of a numerical and experimental study of the dependence of femtosecond laser radiation on the threshold of plasma formation in supercritical carbon dioxide.

Keywords: supercritical fluid, supercritical carbon dioxide, laser-induced plasma, shock waves.

Пути превращения 4-йоданизола в присутствии азид натрия и полимерных медьсодержащих каталитических систем

Бахвалова Е.С.,* Неметц В., Матвеева В.Г., Никошвили Л.Ж.

**Старший преподаватель*

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: bakhvalova.es@mail.ru

Проводилось исследование возможности получения триазинов путем проведения многокомпонентной реакции между 4-йоданизолом, фенилацетиленом и азидом натрия в присутствии медьсодержащего катализатора на основе меди и сверхсшитого полистирола. В зависимости от набора исходных реагентов и условий были обнаружены продукты реакций аминирования, азидирования, кросс-сочетания Соногашира, а также гомосочетания субстратов.

Ключевые слова: медьсодержащий катализатор, сверхсшитый полистирол, 4-йоданизол, азид натрия, многокомпонентная реакция

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-20071).

Transformations of 4-iodoanisole in the presence of sodium azide and polymeric copper-containing catalytic systems

Bakhvalova E.,* Nemetz V., Matveeva V., Nikoshvili L.

**Senior Lecturer*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: bakhvalova.es@mail.ru

The possibility of producing triazines via a multicomponent reaction between 4-iodoanisole, phenylacetylene and sodium azide in the presence of a copper-containing catalyst prepared using copper acetate and hyper-crosslinked polystyrene was investigated. Depending on the initial reagents and conditions products of amination, azidation, Sonogashira cross-coupling and homocoupling were detected.

Keywords: copper-containing catalyst, hyper-crosslinked polystyrene, 4-iodoanisole, sodium azide, multicomponent reaction

Влияние состава атмосферы прокаливания на свойства Mo-V-содержащих катализаторов парциального окисления акролеина

Блажко А.А.,* Чесноков Е.А, Никифоров А.И.

**Студент, 3 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: blazhkoa@my.msu.ru*

Синтезирована серия Mo-V-содержащих катализаторов методом соосаждения с последующей термоактивацией в токе O₂/N₂ с долей кислорода от 0 до 21%. Полученные материалы охарактеризованы рядом физико-химических методов анализа (РФА, РФЭС, ТПВ), проведена модельная реакция окисления акролеина в акриловую кислоту в условиях высокой конверсии. Установлено, влияние кислорода на стадии термоактивации на каталитические свойства систем. С увеличением кислорода снижается активность, но сокращается образование побочных продуктов окисления в изоконверсионных условиях.

Ключевые слова: акролеин, акриловая кислота, парциальное окисление, Mo-V-содержащие катализаторы, термоактивация

The influence of the calcination atmosphere on the properties of Mo-V(-containing) catalysts for partial oxidation of acrolein

Blazhko A.,* Chesnokov E., Nikiforov A.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: blazhkoa@my.msu.ru*

A series of Mo-V-containing catalysts was synthesized by co-precipitation followed by thermoactivation in an O₂/N₂ stream with an oxygen content ranging from 0 to 21%. The obtained materials were characterized using a range of physical and chemical analysis methods (X-ray diffraction, X-ray photoelectron spectroscopy, and thermogravimetric analysis), and a model reaction of acrolein oxidation to acrylic acid was conducted under high conversion conditions. The influence of oxygen during the thermoactivation stage on the catalytic properties of the systems was investigated. As oxygen increases, activity decreases, but the formation of oxidation by-products in isoconversion conditions decreases.

Keywords: acrolein, acrylic acid, partial oxidation, Mo-V-based catalysts, thermoactivation.

Молекулярно-динамическое моделирование агрегации красителей на основе BODIPY

Близнин А.А.,* Сопова Н.С., Старушко А.В., Боченков В.Е., Боченкова А.В.

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: a.blizninam@gmail.com*

Производные BODIPY образуют молекулярные агрегаты с интенсивной флуоресценцией, благодаря чему представляют собой перспективные материалы для применения в биоимеджинге, в OLED и в сенсорах. Данная работа посвящена крупнозернистому (CG) молекулярно-динамическому моделированию молекулярных агрегатов производного BODIPY в водных растворах. CG модель BODIPY была построена в сравнительно новом и популярном силовом поле Martini 3. На основе теории Каша были проанализированы типы структуры агрегатов.

Ключевые слова: производные BODIPY, молекулярные агрегаты, теория агрегации Каша, J- и H-агрегаты, крупнозернистая молекулярная динамика, силовое поле Martini 3.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова (тема № АААА-А 21-121011590090-7).

Molecular dynamics simulation of the aggregation of the BODIPY based dye

Bliznin A.,* Sopova N., Starushko A., Bochenkov V., Bochenkova A.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: a.blizninam@gmail.com*

BODIPY derivatives demonstrate aggregate-enhanced emission that makes them promising materials for applications in bioimaging, OLEDs, and sensors. This work focuses on coarse-grained (CG) molecular dynamics simulations of molecular aggregates of a BODIPY derivative in aqueous solutions. The CG model of BODIPY was built using the Martini 3 force field. The aggregate structure types were analyzed basing on Kasha's theory.

Keywords: BODIPY derivatives, molecular aggregates, Kasha aggregation theory, J- and H-type aggregates, coarse-grained molecular dynamics, Martini 3 force field.

Гидрирование фруктозы на металлосодержащих катализаторах, синтезированных с использованием сверхсшитого полистирола

Богданова А.М.,* Сульман М.Г., Григорьев М.Е.

**Магистр, 1 год*

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: bogdanova.set@mail.ru

Гидрирование фруктозы проводилось с применением металлосодержащих каталитических систем, синтезированных с использованием сверхсшитого полистирола марки MN 100. Установлено, что рутенийсодержащие катализаторы (Ru/СПС MN100, Ru-Cu/СПС MN100) способны обеспечивать высокую конверсию фруктозы при мягких условиях проведения процесса гидрирования фруктозы.

Ключевые слова: гидрирование, катализатор, рутений, медь, сверхсшитый полистирол, фруктоза, маннит.

Hydrogenation of fructose on metal-containing catalysts synthesized using super cross-linked polystyrene

Bogdanova A.M., Sulman M.G., Grigoriev M.E.

**Masters's student, 1st year*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: bogdanova.set@mail.ru

Fructose hydrogenation was carried out using metal-containing catalytic systems synthesized using MN 100 hyper-cross-linked polystyrene. It has been established that ruthenium-containing catalysts (Ru/HPS MN100, Ru-Cu/HPS MN100) are capable of providing high fructose conversion under mild conditions of the fructose hydrogenation process.

Keywords: hydrogenation, catalyst, ruthenium, copper, hyper-cross-linked polystyrene, fructose, mannitol.

Термодинамика адсорбции хлорпроизводных ароматических кислот на микропористых углях: тестирование моделей и оценка энергии взаимодействия

Булкин С.А.,^{1*} Шарифуллина Л.Р.²

**Аспирант*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Академия гражданской защиты МЧС России, Химки, Россия*

E-mail: tarantul0112@mail.ru

В работе проведено сравнительное исследование термодинамики адсорбции хлорпроизводных ароматических кислот (3,5,6-трихлор-4-аминопикриновой и 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислот) на микропористом углеродном сорбенте Сибунит. Установлено, что равновесие для пиклорама адекватно описывается моделью Дубинина-Радушкевича, что указывает на механизм объемного заполнения микропор. Рассчитанная характеристическая энергия адсорбции соответствует физической, усиленной специфическими взаимодействиями.

Ключевые слова: адсорбция, хлорорганические соединения, углеродные сорбенты, физическая химия поверхностных явлений, изотермы адсорбции

Thermodynamics of adsorption of chlorinated derivatives of aromatic acids on microporous coals: model testing and evaluation of interaction energy

Bulkin S.A.,^{1*} Sharifullina L.R.²

**Graduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*Academy of Civil Defence EMERCOM of Russia, Khimki, Russia*

E-mail: tarantul0112@mail.ru

A comparative study of the thermodynamics of adsorption of chlorinated derivatives of aromatic acids (3,5,6-trichloro-4-aminopicric and 2,4-dichlorophenoxyacetic acids) on a microporous carbon sorbent Sibunit was carried out. It is established that the equilibrium for the picloram is adequately described by the Dubinin-Radostkevich model, which indicates the mechanism of volumetric filling of micropores. The calculated characteristic adsorption energy corresponds to the physical one, enhanced by specific interactions.

Keywords: adsorption, organochlorine compounds, carbon sorbents, physical chemistry of surface phenomena, adsorption isotherms

Дизайн органо-неорганических галогенометаллатов с использованием методов ML и DL

Быков А.В.,* Шевельков А.В.

*Аспирант 4 года обучения

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

E-mail: bykov.andrey.sw@gmail.com

Гибридные галогенометаллаты постпереходных элементов являются перспективным классом оптоэлектронных материалов, применение которых ограничено невозможностью их направленного синтеза. Из-за их особенностей можно выделить вклад природы катиона и условий синтеза в строение формирующегося комплекса и отдельно рассматривать соотношения «структура–свойство». В работе демонстрируется эффективность применения методов ML и DL для решения как QSPR-задач (например, предсказание ШЗЗ показывают точность ~0.1 эВ), так и для определения роли катионов (подходы на основе кластеризации позволили обнаружить первоочередную важность электротопологии молекул). Также нами предлагаются и апробируются LLM-модели для автоматизированной разметки химических данных.
Ключевые слова: гибридные галогенидные комплексы, органо-неорганические галогенометаллаты, ширина запрещённой зоны, фотолюминесценция, структуро-направляющий агент, датасет, структурные дескрипторы, QSPR, машинное обучение, LLM.

Работа выполнена при поддержке Некоммерческого Фонда развития науки и образования "Интеллект".

Design of organic-inorganic metal halides using ML and DL methods

Bykov A.,* Shevelkov A.

*Graduate student

M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: bykov.andrey.sw@gmail.com

Hybrid metal halides of post-transition elements are a promising class of optoelectronic materials; however, their practical application is limited by the lack of approaches to directed synthesis. Owing to their structural features, the contributions of the organic cation and synthesis conditions to the resulting crystal structure can be disentangled, enabling an independent analysis of structure–property relationships. In this work, we demonstrate the effectiveness of ML and DL methods for solving QSPR problems, including band gap prediction with an accuracy of approximately 0.1 eV, as well as for elucidating the role of organic cations (clustering-based approaches reveal the primary importance of molecular electrotopology). In addition, we propose and evaluate LLM-based approaches for the automated parsing of chemical data.

Keywords: hybrid halometallates, organic-inorganic metal halides, band gap, photoluminescence, structure-directing agent, dataset, structural descriptors, QSPR, machine learning, LLM.

Pt/«нано»ZSM-5/SiC - новый эффективный катализатор гидроконверсии рапсового масла в «зелёные» компоненты топлив

**Вагапова М.Н.^{*1,2}, Локтев А.С.^{1,2}, Чередниченко К.А.²,
Садовников А.А.¹, Дедов А.Г.^{1,2}**

**Младший научный сотрудник*

¹*Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева,
Российская академия наук, Москва, Россия*

²*Российский государственный университет нефти и газа (национальный
исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

E-mail: genchem@gubkin.ru

Впервые исследована гидроконверсия рапсового масла на синтезированном гидротермально-микроволновым методом модифицированном платиной материале наноразмерный цеолит ZSM-5/SiC. Катализатор показал высокий выход углеводородов C₅₊ – 69 масс. %, с содержанием алифатических углеводородов 59 масс. %, преимущественно керосиновой фракции (C₈–C₁₅).

Ключевые слова: рапсовое масло, наноразмерный цеолит, ZSM-5, платина, карбид кремния, моторное топливо, авиационный керосин, SAF.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИИХС РАН. В работе использовано оборудование центра коллективного пользования «Аналитический центр проблем глубокой переработки нефти и нефтепродуктов» ИИХС РАН.

Pt/nano ZSM-5/SiC - a new efficient catalyst for hydroconversion of rapeseed oil into "green" fuel components

Vagapova M.,^{*1,2} Loktev A.,^{1,2} Cherednichenko K.,² Sadovnikov A.,¹ Dedov A.^{1,2}

**Junior researcher*

¹*A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia*

E-mail: genchem@gubkin.ru

The hydroconversion of rapeseed oil on a platinum-modified nanoscale zeolite ZSM-5/SiC synthesized by the hydrothermal-microwave method has been studied for the first time. The catalyst showed a high yield of C₅₊ hydrocarbons - 69 wt. %, with an aliphatic hydrocarbon content of 59 wt. %, mainly kerosene fraction (C₈-C₁₅).

Keywords: rapeseed oil, biomass, nanosized zeolite, ZSM-5, platinum, silicon carbide, motor fuel, aviation kerosene, bio-jet, SAF.

Гидрирование CO₂ на FeK-катализаторе, нанесенном на углеродный носитель Сибунит

Васькова Д.В.,^{1*,2} Коклин А.Е.,^{1,2} Богдан Т.В.,^{1,2,3} Минаев Н.В.,^{1,2} Богдан В.И.^{1,2,3}

**Аспирант 2 г/о*

¹*Отделение Институт фотонных технологий, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

²*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: darinavaskova@mail.ru

Изучены закономерности гидрирования диоксида углерода на катализаторе 5Fe0.5K/C в диапазоне температур 300–400 °С при давлении 2.0 МПа. Увеличение температуры привело к уменьшению вероятности роста цепи (α) и селективности по углеводородам C₅₊. С изменением температуры с 300 до 400 °С конверсия возросла с 13 до 29 %. Наибольшее значение соотношения олефины/алканы в газообразных углеводородах C₂–C₄ составляло 4.1 при 300 °С и снизилось до 2.2 при 400 °С.

Ключевые слова: диоксид углерода, гидрирование, углеводороды, олефины, восстановление CO₂, железосодержащий катализатор, калий, синтез Фишера–Тропша.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-79-20057, <https://rscf.ru/project/25-79-20057/>.

Hydrogenation of CO₂ on a FeK catalyst supported on a Sibunit carbon carrier

Vaskova D.V.,^{1*,2} Koklin A.E.,^{1,2} Bogdan T.V.,^{1,2,3} Minaev N.V.,^{1,2} Bogdan V.I.^{1,2,3}

**Graduate student, 2nd year*

¹*Branch Institute of Photon Technologies, Kurchatov Complex of Crystallography and Photonics, NRC “Kurchatov Institute”, Moscow, Russia*

²*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: darinavaskova@mail.ru

The hydrogenation of carbon dioxide on a 5Fe0.5K/C catalyst was studied in the temperature range of 300–400 °C at a pressure of 2.0 MPa. An increase in temperature led to a decrease in the chain growth probability (α) and selectivity to C₅₊ hydrocarbons. With a change in temperature from 300 to 400 °C, conversion increased from 13 to 29 %. The highest olefin/alkanes ratio of C₂–C₄ hydrocarbons was 4.1 at 300 °C and decreased to 2.2 at 400 °C.

Keywords: carbon dioxide, hydrogenation, hydrocarbons, olefins, CO₂ reduction, iron-containing catalyst, potassium, Fischer–Tropsch synthesis.

Гидрирование CO₂ в метанол на катализаторах CuO-ZnO/SiO₂, CuO/CeO₂-SiO₂, CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂: влияние состава и метода синтеза

Васюта Е.А.^{1,*} Ашурбеков К.Т.¹, Фёдорова А.А.¹, Капустин Г.И.²,
Кустов А.Л.^{1,2}, Морозов И.В.¹

**Студент*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

E-mail: kvasyuta@gmail.com

*Исследовано влияние состава катализаторов CuO-ZnO/SiO₂, CuO/CeO₂-SiO₂, CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂ и условий их получения на каталитическую активность в реакции гидрирования CO₂ в метанол. Носители получали путём введения оксида церия (IV) на стадии гелеобразования кремниевой кислоты или на SiO₂*xH₂O пропиткой по влагоёмкости. В качестве темплата использован β-циклодекстрин. Катализаторы охарактеризованы методами РФА, низкотемпературной адсорбции-десорбции азота, испытаны в реакции гидрирования CO₂ в метанол. Образцы продемонстрировали высокую удельную площадь поверхности (320–470 м²/г). Наибольшая производительность по метанолу — 0.55 г/(г_{кат}*ч) при ~300 °С — достигнута на катализаторе CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂, полученном нанесением оксида церия(IV) пропиткой по влагоёмкости (m(CeO₂):m(SiO₂) = 1:9).*

Ключевые слова: переработка CO₂, синтез метанола, CuO, ZnO, CeO₂, силикагель, β-циклодекстрин

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова "Фундаментальные основы создания металлических и композиционных материалов", регистрационный номер АААА-А21-121011590083-9.

CO₂ Hydrogenation to methanol on CuO-ZnO/SiO₂, CuO/CeO₂-SiO₂, CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂ catalysts: influence of composition and synthesis method

Vasyuta E.A.,^{1,*} Ashurbekov K.T.,¹ Fedorova A.A.,¹ Kapustin G.I.,² Kustov A.L.,^{1,2} Morozov I.V.¹

**Student*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: kvasyuta@gmail.com

*The influence of synthesis conditions and composition of CuO-ZnO/SiO₂, CuO/CeO₂-SiO₂, CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂ catalysts on their catalytic properties was studied. The systems were synthesized by adding cerium at the gelation stage or by incipient wetness impregnation. Methylated β-cyclodextrin was used as a template. The catalysts were characterized by XRD, low-temperature nitrogen adsorption-desorption, H₂-TPR, and tested in the reaction of CO₂ hydrogenation to methanol. The samples demonstrated a high specific surface area (320–470 m²/g). The highest methanol productivity of 0.55 g/(g_{cat}*h) at ~300 °C was achieved on the CuO-ZnO/CeO₂-SiO₂ catalyst synthesized by adding cerium by incipient wetness impregnation (m(CeO₂):m(SiO₂) = 1:9).*

Keywords: CO₂ utilization, methanol synthesis, CuO, ZnO, CeO₂, silica gel, β-cyclodextrin

Медь-церий-оловянные катализаторы предпочтительного окисления СО в потоке водорода: влияние методики приготовления

Вахрушев А. Д.,* Каплин И.Ю., Локтева Е.С.

**Студент, 5 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: an.vahrusheff@yandex.ru*

В данной работе приготовили два катализатора 15.8% масс. Cu/CeSnOx с молярным соотношением Cu:Ce:Sn – 1:3:1 двумя методами: «совместным» (Cu/CeSnOx-c) и «последовательным» (Cu/CeSnOx-n). Cu/CeSnOx-c оказался более эффективным в реакции предпочтительного окисления СО в потоке водорода. Физико-химическими методами выявлены причины наблюдаемых различий.

Ключевые слова: PROX-CO, медь, оксид церия, оксид олова, катализаторы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственной программы АААА-А21-121011990019-4 «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ». Авторы выражают благодарность Программе развития МГУ.

Copper-cerium-tin catalysts for preferred oxidation of CO in the hydrogen stream: influence of the preparation method

Vakhrushev A.D.,* Kaplin I.Yu., Lokteva E.S.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: an.vahrusheff@yandex.ru*

In this work, two 15,8 wt.%Cu/CeSnOx catalysts were prepared with a molar ratio of Cu:Ce:Sn – 1:3:1 by two methods: "co-precipitation" (Cu/CeSnOx-c) and "impregnation" (Cu/CeSnOx-n). Cu/CeSnOx-c proved to be more effective in the preferred oxidation reaction of CO in the hydrogen stream. Physical-chemical methods revealed the causes of the observed differences.

Keywords: PROX-CO, copper, cerium oxide, tin oxide, catalysts.

Роль шероховатости поверхности электрода в реакции катодного восстановления нитрат-иона: моделирование и эксперимент

Вдовенков Ф.А.,* Козадеров О.А., Кузьменко Г.А., Тараканов П.П., Фомин П.В.

**Аспирант*

*Воронежский государственный университет,
химический факультет, Воронеж, Россия*

E-mail: f.vdovenkov@gmail.com

Методом конечных элементов проведено моделирование электрохимического процесса, протекающего на электроде с шероховатой поверхностью в условиях смешанного транспортно-кинетического контроля при потенциостатической поляризации. Установлено, что форма хроноамперограмм определяется как морфологическими (средний размер неровностей, фактор шероховатости поверхности), так и кинетическими параметрами (константа скорости стадии переноса заряда, коэффициент диффузии). На основе разработанной теоретической модели проведена оценка характеристик кинетической стадии электровосстановления нитрат-ионов на медных покрытиях различной шероховатости.

Ключевые слова: фактор шероховатости, смешанная кинетика, моделирование, метод конечных элементов, электровосстановление, нитрат-ионы, хроноамперометрия.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2025-0001.

The role of electrode surface roughness in the reaction of nitrate ion cathodic reduction: modeling and experiment

Vdovenkov F.A.,* Kozaderev O.A., Kuzmenko G.A., Tarakanov P.P., Fomin P.V.

**Graduate student*

*Voronezh State University,
Department of Chemistry, Voronezh, Russia*

E-mail: f.vdovenkov@gmail.com

The finite element method has been used to simulate an electrochemical process occurring on an electrode with a rough surface under conditions of mixed transport-kinetic control with potentiostatic polarization. It is established that the shape of chronoamperograms is determined by both morphological (average size of irregularities, surface roughness factor) and kinetic parameters (rate constant of the charge transfer stage, diffusion coefficient). Based on the developed theoretical model, the characteristics of the kinetic stage of electrical reduction of nitrate ions on copper coatings of various roughness have been evaluated.

Keywords: roughness factor, mixed kinetics, modeling, finite element method, electrical reduction, nitrate ions, chronoamperometry.

Исследование конформационных переходов K-Ras(G12D) и K-Ras(G12C) в комплексе с YK-8S – новым ковалентным ингибитором онкогенных форм K-RAS

Вдовина М.В.,* Хренова М.Г.

**Студент, 5 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: ma05ria@mail.ru*

Ковалентное ингибирование мутантных форм K-Ras, включая G12C и G12D, является перспективным направлением в разработке противоопухолевых препаратов. В данной работе исследуется механизм образования ковалентных аддуктов K-Ras(G12C) и K-Ras(G12D) с оксиран-содержащим лигандом YK-8S с использованием методов классической и КМ/ММ молекулярной динамики. Проведён анализ длительных молекулярно-динамических траекторий. Показано, что одного кластерного анализа недостаточно для выявления предреакционных состояний. Анализ геометрических параметров ориентации нуклеофила относительно возможных электрофилов показал принципиальную возможность атаки по обоим атомам кислорода в обеих рассматриваемых системах. Дальнейшее исследование требует более высокоуровневых расчетов с применением методов квантовой химии.

Ключевые слова: K-Ras, таргетные ковалентные ингибиторы, оксирановые электрофилы, молекулярная динамика, КМ/ММ, селективность реакции

Работа выполнена в рамках государственного задания Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова (регистрационный номер 121031300176-3).

Investigation of conformational transitions of K-Ras(G12D) and K-Ras(G12C) in complex with YK-8S, a novel covalent inhibitor of oncogenic K-RAS forms.

Vdovina M.V.,* Khrenova M.G.

**Student, 5th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: ma05ria@mail.ru*

Covalent inhibition of mutant forms of K-Ras, including G12C and G12D, is a promising direction in the development of anticancer therapeutics. In this work, the mechanism of covalent adduct formation between K-Ras(G12C) and K-Ras(G12D) and the oxirane-containing ligand YK-8S is investigated using classical molecular dynamics and QM/MM simulations. Long molecular dynamics trajectories were analyzed. It was shown that cluster analysis alone is insufficient to identify pre-reactive states. Analysis of geometric parameters describing the orientation of the nucleophile relative to potential electrophilic sites demonstrated the fundamental possibility of nucleophilic attack on both oxygen atoms in both systems considered. Further investigation requires higher-level calculations using quantum chemical methods.

Keywords: K-Ras, targeted covalent inhibitors, oxirane electrophiles, molecular dynamics, QM/MM, reaction selectivity

Исследование механизма инициации плазмон-индуцированной полимеризации на перфорированных нанопленках золота и серебра

Волосников М.И.,* Сопова Н.С., Боченков В.Е.

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: volmax05@mail.ru*

Гибридные наноструктуры металл-полимер представляют большой интерес для создания сенсоров с пределом обнаружения до одной молекулы. Перспективным подходом для их создания является плазмон-индуцированная полимеризация, в которой для инициирования полимеризации используется энергия плазмонного резонанса, что позволяет контролировать рост и локализацию полимера на наномасштабе. В данной работе был исследован механизм инициирования процесса плазмон-индуцированной полимеризации акриламида на перфорированных нанопленках из золота и серебра.

Ключевые слова: плазмон-индуцированная полимеризация, коллоидная литография, плазмонный резонанс, моделирование методом FDTD, перфорированные нанопленки

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова (тема № АААА-А21-121011590090-7).

Авторы выражают искреннюю благодарность С.В. Максимова за выполнение электронно-микроскопических исследований. Исследование проводилось при поддержке ЦКП МГУ «Нанохимия и наноматериалы».

Establishing the mechanism of plasmon-induced polymerization on perforated gold and silver nanofilms.

Volosnikov M.,* Sopova N., Bochenkov V.E.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: volmax05@mail.ru*

Metal-polymer hybrid nanostructures are highly perspective materials for the sensor creation with a detection limit of up to a single molecule. A promising approach for their creation is plasmon-induced polymerization, which uses plasmon resonance energy to initiate polymerization. This approach allows to control the polymer growth and polymer chain localization at the nanoscale. In this study, the initiation mechanism of plasmon-induced acrylamide polymerization on perforated gold and silver nanofilms was investigated.

Keywords: plasmon-induced polymerization, colloidal lithography, plasmon resonance, FDTD modeling, perforated nanofilms.

Синтез левулиновой кислоты из фруктозы с использованием полимерных твёрдых кислотных катализаторов

Гаврилова Е.П.,* Манаенков О.В., Кислица О.В., Матвеева В.Г.

**Студент магистратуры
Тверской государственной технической университет,
кафедра биотехнологии, химии и стандартизации Тверь, Россия
E-mail: ga.evgenya@yandex.ru*

В данной работе исследована возможность синтеза важного платформенного соединения – левулиновой кислоты – посредством дегидратации фруктозы в присутствии твёрдых кислотных катализаторов (сульфированных полимеров разного типа). Показано, что при использовании таких катализаторов выход левулиновой кислоты может превышать 60 % от теоретически возможного, а сами полимерные кислотные катализаторы являются перспективной альтернативой, традиционно используемым в данной реакции, минеральным кислотам.

Ключевые слова: левулиновая кислота, твёрдый кислотный катализатор, фруктоза, дегидратация, сверхсшитый полистирол

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 23-79-00009).

Synthesis of levulinic acid from fructose using polymeric solid acid catalysts **Gavrilova E.P.,* Manaenkov O.V., Kislitsa O.V., Matveeva V.G.**

**Masters's student,
Tver State Technical University, Department of Biotechnology, Chemistry and Standardization,
Tver, Russia
E-mail: ga.evgenya@yandex.ru*

This study explores the possibility of synthesizing an important platform compound, levulinic acid, via fructose dehydration in the presence of solid acid catalysts (various types of sulfonated polymers). It is shown that using such catalysts, the yield of levulinic acid can exceed 60% of the theoretical yield, and the polymeric acid catalysts themselves offer a promising alternative to the mineral acids traditionally used in this reaction.

Keywords: levulinic acid, solid acid catalyst, fructose, dehydration, hypercrosslinked polystyrene

Исследование фотофизических свойств флуоресцентных красителей на основе BODIPY

Галикберова М.Р.,* Клещина Н.Н., Боченкова А.В.

**Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: milana.galikberova@gmail.com*

Данное исследование направлено на установление механизмов конкурирующих излучательных и безызлучательных каналов релаксации электронно-возбужденного красителя BODIPY и его замещенного аналога мезо-CF₃-BODIPY. Эти соединения применяются в фотодинамической и фототермической терапии, где эффективность релаксационных каналов напрямую определяет функциональность красителя. В работе с помощью высокоуровневых методов квантовой химии проведен анализ поверхности потенциальной энергии состояния S₁ в области минимума и вблизи конического пересечения S₁/S₀. Показано, что введение заместителя приводит к стабилизации конического пересечения, снижая энергетический барьер канала внутренней конверсии и усиливая безызлучательную релаксацию замещенного красителя.

Ключевые слова: BODIPY-красители, флуоресценция, внутренняя конверсия, коническое пересечение, мезо-CF₃-группа.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300176-3, с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера RSC Tornado лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

Study of the photophysical properties of BODIPY-based fluorescent dyes

Galikberova M.R.,* Kleshchina N.N., Bochenkova A.V.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: milana.galikberova@gmail.com*

This study aims at elucidating the mechanisms of competing radiative and nonradiative relaxation channels in the electronically excited BODIPY dye and its substituted analogue, meso-CF₃-BODIPY. These compounds are used in photodynamic and photothermal therapy, where the efficiency of the relaxation pathways directly determines the functionality of these dyes. Using high-level quantum chemistry methods, we analyze the potential energy surface of the S₁ state in the Franck-Condon region, near its minimum, and in the vicinity of the S₁/S₀ conical intersection. The introduction of the substituent is shown to stabilize the conical intersection, lowering the energy barrier for internal conversion and thereby enhancing nonradiative relaxation in the substituted dye.

Keywords: BODIPY dyes, fluorescence, internal conversion, conical intersection, meso-CF₃ group.

Оценка структурных параметров и термохимических свойств 3-ацетил-4-аминофуросана с помощью квантово-химических расчётов

Галкин А.С.,* Степанова А.В., Лобанов Н.В.

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: jedrong@gmail.com*

Впервые проведена оценка равновесной структуры 3-ацетил-4-амино-1,2,5-оксадиазол-2-оксида посредством квантово-химических расчётов методами B3LYP и MP2 с использованием базисов 6-31G(d,p), cc-pVTZ и aug-cc-pVTZ. Полученные данные сопоставлены с экспериментальными результатами для ряда родственных соединений. Рассчитаны термохимические поправки к энтальпии и энергии Гиббса.

Ключевые слова: молекулярная структура, оксадиазолы, фуросаны, квантово-химические исследования

Авторы выражают благодарность и отмечают, что работа выполнена в рамках работ по теме № 121031300090-2 гос. задания «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов».

Evaluation of structural parameters and thermochemical properties of 3-acetyl-4-aminofuroxan using quantum chemical calculations

Galkin A.S.,* Stepanova A.V., Lobanov N.V.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: jedrong@gmail.com*

The equilibrium structure of 3-acetyl-4-amino-1,2,5-oxadiazole-2-oxide was evaluated for the first time using quantum chemical calculations with the B3LYP and MP2 methods using the 6-31G(d,p), cc-pVTZ, and aug-cc-pVTZ basis sets. The obtained data were compared with experimental results for a number of related compounds. Thermochemical corrections to enthalpy and Gibbs energy were calculated.

Keywords: molecular structure, oxadiazoles, furoxans, quantum chemical studies

Применение мембран российского производства для осушки природного газа

Горохова А.Н.,* Колдышев В.Р.

**Студент магистратуры*

Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

E-mail: vrkoldyshev@gmail.com

Исследование различных методов осушки газовых потоков при определённых условиях и требованиях к процессу позволяют выявить наиболее эффективный способ и пути его оптимизации. В работе рассмотрено сравнение существующих технологий осушки природного газа и возможность проведения осушки мембранным методом с использованием мембран. Проведено исследование транспортных и разделительных характеристик мембран российского производства с использованием модельных парогазовых смесей с учётом влияния температуры, содержания паров воды и давления.

Ключевые слова: мембранное разделение газов и паров, осушка газов, удаление влаги, природный газ.

Application of Russian-made membranes for natural gas dehumidification

Gorokhova A.N.,* Koldyshev V.R.

**Masters's student*

I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia

E-mail: vrkoldyshev@gmail.com

The study of gas flows dehumidification methods under certain conditions and requirements for the process allows us to identify the most effective method and ways to optimize it. The work considers a comparison of existing technologies for drying natural gas and the possibility of membrane dehydration. A study of the transport and separation characteristics of Russian-made membranes was conducted using model vapor-gas mixtures taking into account the influence of temperature, water vapor content and pressure.

Keywords: membrane gas and vapor separation, gas dehydration, moisture removal, natural gas.

Синтез магнитных биокатализаторов на основе ферментов класса оксидоредуктаз

Гребенникова О.В.,* Юсеф-Азуз Несрин, Сульман А.М., Матвеева В.Г.

**Доцент*

*Тверской государственной технической университет, кафедра Биотехнологии,
химии и стандартизации, Тверь, Россия*

E-mail: olechkamatveeva@mail.ru

Магнитные наночастицы являются успешным инструментом для иммобилизации ферментов, белков, лекарственных препаратов и других биологически активных молекул. В данной работе пероксидаза корня хрена была ковалентно иммобилизована на магнитные наночастицы, синтезированные полиольным способом. Изучено влияние температуры и рН на активность синтезированных биокатализаторов, а также их стабильность в нескольких рециклах.

Ключевые слова: оксидоредуктазы, пероксидаза, магнитные наночастицы, иммобилизация, биокатализатор.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 24-79-10042.

Synthesis of magnetic biocatalysts based on oxidoreductase enzymes

Grebennikova O.V.,* Yusef-Azuz Nesrin, Sulman A.M., Matveeva V.G.

**Associate Professor*

*Tver State Technical University, Department of Biotechnology, Chemistry and Standardization,
Tver, Russia*

E-mail: olechkamatveeva@mail.ru

Magnetic nanoparticles are a successful tool for the immobilization of enzymes, proteins, drugs, and other biologically active molecules. In this work, horseradish root peroxidase was covalently immobilized onto magnetic nanoparticles synthesized by the polyol method. The effect of temperature and pH on the activity of synthesized biocatalysts, as well as their stability in several cycles, has been studied.

Keywords: oxidoreductases, peroxidase, magnetic nanoparticles, immobilization, biocatalyst.

Новые порфирилаты индия(III) для фотокаталитических приложений

Гринева У.В.,^{1*} Опарина А.Д.,² Поливановская Д.А.,² Бирин К.П.,² Цивадзе А.Ю.²

Студент

¹ НИИ «Высшая школа экономики», Москва, Россия

² Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: grinevailiana698@gmail.com

Одним из уникальных свойств порфиринов является способность генерировать активные формы кислорода (АФК) при фотовозбуждении. Ранее было показано, что введение индия(III) увеличивает фотокаталитическую активность порфириновых фотосенсибилизаторов в реакции окисления органических сульфидов [Shremzer E.S., Polivanovskaia D.A., Birin K.P., Tsivadze A.Y., Journal of Catalysis. 2025.]. В настоящей работе было выявлено, что введение металлоцентра индия(III) значительно увеличивает стабильность полученных соединений в системе CCl₄/MeOH (1:2). Фотокаталитическая активность была исследована на модельной реакции фотоокисления тиоанизола. При облучении малоомощной светодиодной лампой за 16 ч была достигнута 65% конверсия и максимальное число каталитических циклов (TON) в 78 000.

Ключевые слова: порфирилаты индия(III), фотостабильность, фотокатализ, окисление органических сульфидов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Novel indium(III) porphyrinates for photocatalytic applications

Grineva U.V.,^{1*} Oparina A.D.,² Polivanovskaia D.A.,² Birin K.P.,² Tsivadze A.Y.²

**Student*

¹National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia

²A.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: grinevailiana698@gmail.com

One of the unique properties of porphyrins is their ability to generate reactive oxygen species (ROS) upon photoexcitation. It has previously been shown that the introduction of indium(III) enhances the photocatalytic activity of porphyrin photosensitizers in the reaction of organic sulfide oxidation [Shremzer E.S., Polivanovskaia D.A., Birin K.P., Tsivadze A.Y. //Journal of Catalysis. 2025. 1163271]. In the present work, it was found that the incorporation of an indium(III) metal center significantly increases the stability of the obtained compounds in a CCl₄/MeOH (1:2) system. The photocatalytic activity was investigated in a model reaction of thioanisole photooxidation. Upon irradiation with a low-power LED lamp for 16 hours, 65% conversion was achieved with a maximum turnover number (TON) of 78,000.

Keywords: indium(III) porphyrinates, photostability, photocatalysis, oxidation of organic sulfides.

Трансформация гидролизного лигнина в ацетонитриле

Деменин А.К.,^{1,*2} Мащенко Н.В.,² Богдан Т.В.,^{2,3} Коклин А.Е.,² Богдан В.И.^{2,3}

*Студент

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
биологический факультет, Москва, Россия

²Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

E-mail: demeninanton@yandex.ru

Деполимеризацию гидролизного лигнина в среде ацетонитрила осуществляли при 250, 274, 295 °С. Продукты анализировали методами ВЭЖХ, ГПХ, газовой хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, ИК спектроскопии и проводили элементный анализ. Степень деполимеризации составила 15–25 %, перешедшие в раствор в результате деполимеризации моно- и олигомерные фрагменты лигнина имеют размер от 0.5 до 8 нм. Суперкритические условия поднимают уровень деполимеризации на 67%.

Ключевые слова: лигнин, деполимеризация, ацетонитрил.

Transformation of hydrolyzed lignin in acetonitrile

Demenin A.K.,^{1,*2} Mashchenko N.V.,² Bogdan T.V.,^{2,3} Koklin A.E.,² Bogdan V.I.^{2,3}

*Student

¹ M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of of Biology, Moscow, Russia

² N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

³ M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: demeninanton@yandex.ru

Depolymerization of hydrolyzed lignin in an acetonitrile medium was carried out at 250, 274, 295 °C. The products were analyzed by HPLC, GPC, gas chromatography, chromato-mass spectrometry, IR spectroscopy, and elemental analysis. The degree of depolymerization was 15-25%, and mono- and oligomeric lignin fragments converted into solution as a result of depolymerization range in size from 0.5 to 8 nm. Supercritical conditions raise the level of depolymerization by 67%.

Keywords: lignin, depolymerization, acetonitrile.

Гель-полимерные электролитные системы для суперконденсаторов

Деянков Д.А.,* Архипова Е.А., Иванов А.С., Савилов С.В.

**Аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: gingerzealot@gmail.com*

Гель-полимерные электролиты на основе поливинилового спирта и пропиленгликоля с массовым соотношением 4:5 и содержанием LiTFSI 10-50 масс. % характеризуются пониженной кристалличностью и повышенной подвижностью полимерных цепей. Увеличение доли соли приводит к росту концентрации носителей заряда и существенному повышению ионной электропроводности, достигающей порядка 10^{-1} мСм/см при комнатной температуре. Повышение температуры дополнительно усиливает проводимость за счёт увеличения свободного объёма и облегчения ионного транспорта. Результаты работы подтверждают перспективность данных электролитов для применения в системах хранения энергии и суперконденсаторах.

Ключевые слова: гель-полимерные электролиты, поливиниловый спирт, пропиленгликоль, LiTFSI, ионная электропроводность, кристалличность полимера, системы хранения энергии, суперконденсаторы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-19-00263).

Gel Polymer Electrolyte Systems for Supercapacitors

Deyankov D.A.,* Arkhipova E.A., Ivanov A.S., Savilov S.V.

**Graduate student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: gingerzealot@gmail.com*

Gel polymer electrolytes based on polyvinyl alcohol and propylene glycol with a mass ratio of 4:5 and a LiTFSI content of 10–50 wt.% are characterized by reduced crystallinity and enhanced mobility of polymer chains. An increase in salt content leads to a higher concentration of charge carriers and a significant rise in ionic conductivity, reaching values on the order of 10^{-1} mS/cm at room temperature. An increase in temperature further enhances conductivity due to an increase in free volume and facilitation of ion transport. The results obtained confirm the high potential of these electrolytes for application in low-temperature energy storage systems and supercapacitors.

Keywords: gel polymer electrolytes, polyvinyl alcohol, propylene glycol, LiTFSI, ionic conductivity, polymer crystallinity, energy storage systems, supercapacitors.

Двухступенчатая модель LLM–GNN для ускорения дизайна неорганических кристаллов

Дудаков И.В.^{1,2,*} Королев В.В.¹, Митрофанов А.А.^{1,2}

**Студент*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Институт искусственного интеллекта, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

E-mail: dudakoviv@my.msu.ru

Разработка материалов с заданными характеристиками важна для энергетики, электроники и других технологий. Однако изучение свойств материалов и расчёты ab initio требуют больших вычислительных ресурсов, а прогнозирование свойств усложняется полиморфизмом кристаллов. Существующие методы обычно опираются на известную кристаллическую структуру или используют непрямые способы перехода от состава к структуре. В работе предлагается новый метод, обходящий ограничения подходов, основанных только на химическом составе.

Методика состоит из двух этапов: сначала языковая модель CrystaLLM генерирует кристаллическую структуру в виде CIF-файлов, затем графовые нейронные сети (CGCNN, MEGNet, CartNet) прогнозируют свойства по этим файлам. Метод показал высокую точность: он успешно предсказал все четыре свойства из датасета SNUMAT и 18 из 20 свойств из датасета JARVIS DFT (в рамках бенчмарка LLM4MatBench), что демонстрирует его преимущества перед прямыми методами предсказания на основе химического состава.

Ключевые слова: материаловедение, прогнозирование свойств, неорганические кристаллы, машинное обучение, большие языковые модели, графовые нейронные сети.

Two-stage LLM–GNN model for accelerating the design of inorganic crystals

Dudakov I.V.^{1,2,*} Korolev V.V.¹, Mitrofanov A.A.^{1,2}

**Student*

¹ M.V. Lomonosov Moscow State University, Institute for Artificial Intelligence, Moscow, Russia

² M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: dudakoviv@my.msu.ru

The development of materials with specified properties is important for energy, electronics, and other technologies. However, studying the properties of materials and performing ab initio calculations require significant computational resources, and predicting properties is further complicated by the polymorphism of crystals. Existing methods typically rely on known crystal structures or use indirect approaches to transition from composition to structure. This work proposes a new method that overcomes the limitations of approaches based solely on chemical composition.

The method consists of two steps: first, the CrystaLLM language model generates crystal structures in the form of CIF-files, and then graph neural networks (CGCNN, MEGNet, and CartNet) predict properties based on these files. The method demonstrated high accuracy, successfully predicting all four properties from the SNUMAT dataset and 18 out of 20 properties from the JARVIS-DFT dataset (as part of the LLM4MatBench benchmark), demonstrating its advantages over direct chemical composition-based prediction methods.

Keywords: materials science, property prediction, inorganic crystals, machine learning, large language models, graph neural networks.

Адсорбционные, каталитические и сенсорные свойства оксида графена и его производных

Евсеев Г.С.,^{1*} Шишов А.С.,^{1,2} Квашнин Д.Г.¹

**Аспирант*

¹*Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Московский физико-технический институт, Москва, Россия*

E-mail: georgii.s.evseev@gmail.com

Оксид графена (ОГ) и его производные обладают настраиваемыми адсорбционными, каталитическими и сенсорными свойствами, благодаря возможности модификации разнообразными функциональными группами и создания композитов. ОГ является перспективной основой для адсорбентов как органических, так и неорганических загрязняющих веществ. ОГ выступает в качестве гетерогенного катализатора во многих реакциях, в том числе, окисления, восстановления, этерификации и C-C связывания. Материалы на основе ОГ находят применение в различных областях науки и техники, в частности, в газовой сенсорике. Доработанный программный код автоматизирует генерацию модельных структур ОГ для дальнейшего предсказания их свойств с помощью методов квантовой химии.

Ключевые слова: оксид графена, двумерные материалы, функциональные группы, механические деформации, газовая сенсорика

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ №25-73-10250.

Adsorption, catalytic and sensor properties of graphene oxide and its derivatives

Evseev G.S.,^{1*} Shishov A.S.,² Kvashnin D.G.¹

**Graduate student*

¹*Emanuel Institute of Biochemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia*

E-mail: georgii.s.evseev@gmail.com

Graphene oxide (GO) and its derivatives exhibit tunable adsorption, catalytic, and sensor properties due to their ability to be modified with various functional groups and form composites. GO is a promising basis for adsorbents of both organic and inorganic pollutants. GO acts as a heterogeneous catalyst in many reactions, including oxidation, reduction, esterification, and C-C bonding. GO-based materials are used in various fields of science and technology, particularly in gas sensing. The modified software code automates the generation of GO model structures for subsequent prediction of their properties using quantum chemistry methods.

Keywords: graphene oxide, two-dimensional materials, functional groups, mechanical deformations, gas sensing

Планарные дефекты как фактор подвижности каркаса в кремнезёмах с топологией MFI

Енбаев З.С.,* Николаенко Я.И., Костюков И.А., Касьянов И.А., Никифоров А.И.

**Аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: zakhar.enbaev@chemistry.msu.ru*

В работе на серии кремнезёмов топологии MFI с контролируемым уровнем замещения гетероатомов ($Si/Me \approx 40$, $Me = Ti, Ga, Al$) и двумя морфологиями кристаллов показано, что подвижность каркаса и связанный с ней адсорбционно- и температурно-индуцированный фазовый переход ($P2_1/c \rightleftharpoons Pnma$) являются не только функцией состава, а в решающей степени определяются микроструктурой. На микроснимках ПЭМ обнаружены планарные малоугловые доменные границы, которые коррелируют с исчезновением перехода в случае сферической морфологии кристаллов. Тем самым, на примере MFI как модельной каркасной системы продемонстрировано, что плоскостные дефекты могут “выключать” согласованную перестройку каркаса, влияя на профиль изотерм адсорбции и корректность оценки микропор.

Ключевые слова: цеолиты, кремнезёмы, адсорбция, фазовые переходы, двумерные дефекты, порошковая рентгеновская дифракция, низкотемпературная адсорбция азота, просвечивающая электронная микроскопия.

Planar defects as a factor of framework flexibility in MFI-type silicas

Enbaev Z.S.,* Nikolaenko Y.I., Kostyukov I.A., Kasyanov I.A., Nikiforov A.I.

**Graduate student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: zakhar.enbaev@chemistry.msu.ru*

In this study, using a series of MFI silicas with controlled heteroatom substitution levels ($Si/Me \approx 40$, $Me = Ti, Ga, Al$) and two crystal morphologies, we demonstrated that framework mobility and the associated adsorption- and temperature-induced phase transition ($P2_1/c \rightleftharpoons Pnma$) are not solely a function of composition but are crucially determined by microstructure. TEM micrographs revealed planar low-angle domain boundaries, which correlate with the disappearance of the transition in the case of spherical crystal morphology. Thus, using MFI as a model framework system, we demonstrated that in-plane defects can “switch off” cooperative framework rearrangement, ensuring the correctness of micropore estimation in silicas based on adsorption data.

Keywords: zeolites, silicas, adsorption, phase transitions, two-dimensional defects, powder X-ray diffraction, low-temperature nitrogen adsorption, transmission electron microscopy.

Особенности структуры и каталитические свойства в углекислотной конверсии метана каталитического материала на основе никельсодержащего слоистого двойного гидроксида магния-алюминия

Ермаков Е.В.,^{1*} Локтев А.С.,^{1,2} Садовников А.А.,¹ Дедов А.Г.^{1,2}

**Аспирант*

¹*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева, Российская академия наук,
Москва, Россия*

²*Российский государственный университет нефти и газа (национальный
исследовательский университет) имени И.М. Губкина
Москва, Россия*

E-mail: ermakov_ev@ips.ac.ru

Синтезирован и исследован стабильный и устойчивый к зауглероживанию катализатор углекислотной конверсии метана в синтез-газ. Катализатор получен на основе никельсодержащего слоистого двойного гидроксида алюминия-магния. Катализатор показал выходы водорода и СО ~90% и в процессе катализа сохранил слоистую гидротальцитоподобную структуру.

Ключевые слова: углекислотная конверсия метана, катализ, никель, слоистый двойной гидроксид магния-алюминия, синтез-газ

Работа выполнена при поддержке РФФ (Соглашение № 23-13-00098), государственного задания ИНХС РАН, ЦКП ИНХС РАН и ИОНХ РАН.

Structural features and catalytic properties in carbon dioxide methane conversion of a catalytic material based on nickel-containing layered double magnesium-aluminum hydroxide

Ermakov E.,^{1*} Loktev A.,^{1,2} Sadovnikov A.,¹ Dedov A.^{1,2}

**Graduate student*

¹*A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University),
Moscow, Russia*

E-mail: ermakov_ev@ips.ac.ru

A stable and carburization-resistant catalyst for the carbon dioxide conversion of methane into synthesis gas has been synthesized and investigated. The catalyst is based on a nickel-containing layered double aluminum-magnesium hydroxide. The catalyst showed ~90% yields of hydrogen and CO and retained a layered hydrotalcite-like structure during the catalysis process.

Keywords: carbon dioxide conversion of methane, catalysis, nickel, layered double magnesium-aluminum hydroxide, synthesis gas.

Каталитические свойства $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ и $\text{MnO}_x/\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ в селективном окислении CO в избытке H_2

Ефименко Л.А.,* Каплин И.Ю., Локтева Е.С.

**Студент, 5 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: leofimlenko@gmail.com*

Выявлено влияние состава оксидного носителя на каталитические свойства систем $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ и $\text{MnO}_x/\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ в реакции предпочтительного окисления CO в избытке водорода (PROX-CO). Проведено сравнение характеристик катализаторов, полученных темплатным синтезом с последующим нанесением марганца методом пропитки и содержащих Ce/Si и Zr/Si (мол.) = 1/1, w(Mn) = 10 масс.%. Катализаторы охарактеризованы методами РФА, КР-спектроскопии, СЭМ-ЭДА, ТПВ- H_2 и РФЭС. Более высокая активность и селективность катализатора $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ в PROX-CO при 100–150 °C обусловлена усилением каталитического действия MnO_x за счет присутствия CeO_2 , обладающего высокой кислородной ёмкостью и способностью к лёгкому переходу $\text{Ce}^{4+} \leftrightarrow \text{Ce}^{3+}$. Совместное действие двух активных компонентов обеспечивает эффективное протекание реакции по механизму Марса-ван Крвелена.

Ключевые слова: предпочтительное окисление CO в присутствии водорода, диоксид церия, диоксид циркония, диоксид кремния, оксид марганца

Авторы благодарят Программу развития МГУ имени М.В. Ломоносова за предоставленное оборудование.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственной программы АААА-А21-121011990019-4 «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ».

Catalytic properties of $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ and $\text{MnO}_x/\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ in selective CO oxidation in H_2 -Rich Stream

Efimenko L.A.,* Kaplin I.Yu., Lokteva E.S.

**Student, 5th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: leofimlenko@gmail.com*

The influence of the oxide support composition on the catalytic properties of the $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ and $\text{MnO}_x/\text{ZrO}_2\text{-SiO}_2$ systems in the reaction of preferential oxidation of CO in excess hydrogen (PROX-CO) was revealed. The characteristics of catalysts obtained by template synthesis followed by manganese deposition by impregnation and containing Ce/Si and Zr/Si (mol) = 1/1, w(Mn) = 10 wt.% were compared. The catalysts were characterized by X-ray diffraction, Raman spectroscopy, SEM-EDA, TPR- H_2 , and XPS. The higher activity and selectivity of the $\text{MnO}_x/\text{CeO}_2\text{-SiO}_2$ catalyst in PROX-CO at 100–150 °C is due to the enhanced catalytic activity of MnO_x due to the presence of CeO_2 , which has a high oxygen storage capacity and is capable of easily undergoing the $\text{Ce}^{4+} \leftrightarrow \text{Ce}^{3+}$ transition. The combined action of the two active components ensures the efficient reaction via the Mars-van Krevelen mechanism.

Keywords: preferential CO oxidation, ceria, zirconia, silica, manganese oxide

Гидрирование CO₂ на бифункциональном катализаторе в зависимости от компонентного состава

Иванов Г.К.,^{1*} Маерле А.А.,¹ Иванова И.И.^{1,2}

**Студент*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Москва, Россия

E-mail: grigorii.ivanov@chemistry.msu.ru

В работе исследовали бифункциональные катализаторы гидрирования CO₂ в углеводороды. В качестве оксидного компонента использовали шпинели на основе металлов II и III групп ПСХЭ Д. И. Менделеева: ZnGa₂O₄ и CdIn₂O₄, а также CuO-ZnO-Al₂O₃ как образец сравнения, а в качестве кислотного – SAPO-34. Катализаторы были протестированы в реакции превращения углекислого газа в олефины при температуре 380 °C и давлении 2.7 МПа. Исследование физико-химических свойств катализаторов и их компонентов проводили следующими методами: низкотемпературная сорбция азота, РФА, РФЛА, СЭМ, ТПВ-H₂, ТПД-NH₃. Оптимальным по совокупности свойств – конверсия CO₂ 12 %, селективность образования олефинов 63 % – оказался катализатор на основе ZnGa₂O₄.

Ключевые слова: бифункциональный катализатор, CO₂, SAPO-34, метанол, шпинель.

Синтез образцов, изучение их пористых характеристик, окислительно-восстановительных, кислотных и каталитических свойств проводили в рамках государственного задания МГУ им. М. В. Ломоносова, регистрационный номер № АААА-А21-121011990019-4.

Работа выполнена с использованием оборудования, приобретенного за счёт средств национального проекта "Наука и университеты".

Hydrogenation of CO₂ on a tandem catalyst depending on the component composition

Ivanov G.,^{1*} Maerle A.,¹ Ivanova I.^{1,2}

**Student*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: grigorii.ivanov@chemistry.msu.ru

Tandem catalysts for the hydrogenation of CO₂ into hydrocarbons were studied. Spinel based on metals of groups II and III of the periodic table were used as the oxide component: ZnGa₂O₄ and CdIn₂O₄, as well as CuO-ZnO-Al₂O₃ as a reference sample, and SAPO-34 as an acid component. The catalysts were tested in the reaction of converting carbon dioxide into olefins at a temperature of 380 °C and a pressure of 2.7 MPa. The physico-chemical properties of the catalysts and their components were studied using low-temperature nitrogen sorption, X-ray diffraction, X-ray fluorescence spectrometry, scanning electron microscopy, temperature-programmed hydrogen reduction and temperature-programmed desorption of ammonia. The catalyst based on ZnGa₂O₄ proved to be optimal in terms of the combination of properties: CO₂ conversion of 12 %, olefin selectivity of 63 %.

Keywords: tandem catalyst, CO₂, SAPO-34, methanol, spinel.

Прогнозирование химических сдвигов ^{93}Nb , ^{95}Mo , ^{205}Tl ЯМР для комплексов редких и переходных металлов с помощью машинного обучения

Исаев Я.И.,* Ковалев А.Е., Ходов И.А.

*Студент, 2 курс магистратуры

Институт химии растворов имени Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия

E-mail: isaev.yaroslav.ivanovo@gmail.com

Представлен подход машинного обучения для прогнозирования химических сдвигов ЯМР ядер ^{93}Nb , ^{95}Mo и ^{205}Tl в комплексах переходных металлов. На обучающем наборе из 1490 экспериментальных значений показано, что модель CatBoost с подобранными 2D-дескрипторами (RDKit для Nb, Mold2 для Mo, ECFP для Tl) превосходит по точности бездескрипторные методы. Лучшие модели достигли RMSE 351.1 ppm (что составляет 10.6 % от диапазона) для ^{93}Nb , 394.0 ppm для ^{95}Mo (7.4 %) и 538.4 ppm для ^{205}Tl (6.1 %). Результаты подтверждают эффективность CatBoost и важность выбора дескрипторов для быстрого прогнозирования величин химических сдвигов сигналов в спектрах ЯМР для решения прикладных задач.

Ключевые слова: химический сдвиг ЯМР, переходные металлы, машинное обучение

Данная работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-13-00257-П) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2021-579).

Prediction of ^{93}Nb , ^{95}Mo , ^{205}Tl NMR chemical shifts for complexes of rare and transition metals using machine learning

Isaev Y.I.,* Kovalev A.E., Khodov I.A.

*Master's student

G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry, Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia

E-mail: isaev.yaroslav.ivanovo@gmail.com

A machine learning approach for predicting NMR chemical shifts of ^{93}Nb , ^{95}Mo , and ^{205}Tl nuclei in transition metal complexes is presented. Using a training set of 1490 experimental values, it is shown that a CatBoost model with selected 2D descriptors (RDKit for Nb, Mold2 for Mo, ECFP for Tl) outperforms descriptor-free methods in accuracy. The best models achieved an RMSE of 351.1 ppm (which constitutes 10.6% of the range) for ^{93}Nb , 394.0 ppm for ^{95}Mo (7.4%), and 538.4 ppm for ^{205}Tl (6.1%). The results confirm the efficiency of CatBoost and the importance of descriptor selection for the rapid prediction of chemical shift values in NMR spectra to solve applied problems.

Keywords: NMR chemical shift, transition metals, machine learning

Каталитический крекинг бионефти, стабилизированной различными растворителями

Калинина Н.А.,* Кузнецов П.С., Дементьев К.И.

**Младший научный сотрудник*

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: kalinina.na@ips.ac.ru

Бионефть (БН) – перспективное возобновляемое сырье, однако высокая кислотность и неустойчивость к нагреву препятствуют ее прямой каталитической переработке, что требует дополнительного этапа стабилизации БН. В работе исследовано разбавление БН органическими растворителями и вакуумным дистиллятом (ВД) с последующим вовлечением стабилизированных образцов в процесс каталитического крекинга. Было установлено, что использование метанола или толуола только совместно с ВД позволили увеличить термическую стабильность сырья. Лучшие показатели крекинга были получены при использовании толуола: выход бензиновой фракции - 51.9 %, общая конверсия - 76.4 %.

Ключевые слова: биомасса, бионефть, стабилизация бионефти, термическая стабильность, каталитический крекинг

Работа выполнена в рамках государственного задания ИНХС РАН.

Catalytic cracking of bio-oil upgraded with various solvents

Kalinina N.,* Kuznetsov P., Dement'ev K.

**Junior research*

A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: kalinina.na@ips.ac.ru

Bio-oil is a promising renewable feedstock. However, its high acidity and low thermal stability prevent direct catalytic processing, necessitating an upgrading step. This study investigates the stabilization of bio-oil via dilution with organic solvents and vacuum gas oil, followed by catalytic cracking of the stabilized blends. Only the combined use of methanol or toluene, with vacuum gas oil, improved the thermal stability of raw bio-oil. The use of toluene led to the highest yield of gasoline fraction 51.9 % and conversion 76.4 % in catalytic cracking.

Keywords: biomass, bio-oil, bio-oil stabilization, thermal stability, catalytic cracking

Оценка спектральных характеристик дериватов аминокислот с дабсилхлоридом на примере разработанной аналитической методики определения аминокислот в белковых препаратах

Калмыкова А.А.,^{1,*2} Кустова Т.П.,¹ Калмыков П.А.²

**Аспирант*

¹*Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

²*АО «Генериум», пос. Вольгинский, Россия*

E-mail: a.kalmykova@generium.ru

В работе представлены результаты оценки спектров поглощения аналитических сигналов, полученных в процессе разработки аналитической методики определения свободных аминокислот (гистидин, аргинин). Объектом исследования выступал лекарственный препарат, представляющий собой гуманизованное моноклональное антитело, полученное на основе рекомбинантной ДНК и имеющее в своем составе высокую концентрацию целевого белка (около 150 мг/мл), а также вспомогательные компоненты, способствующие стабилизации белка и препятствующие его деградированию – свободные аминокислоты гистидин и аргинин. Методика представляет собой предколоночную дериватизацию образца дабсилхлоридом с последующим разделением аналитов методом ОФ ВЭЖХ с УФ-ВИД детектированием дериватов аминокислот.

Ключевые слова: аминокислоты, дериватизация, ДАБС-Cl, ВЭЖХ, биопрепараты, спектры поглощения.

Evaluation of the Spectral Characteristics of Amino Acid Derivatives with Dabsyl Chloride Using a Developed Analytical Method for Determining Amino Acids in Protein Preparations

A.A. Kalmykova,^{1,*2} T.P. Kustova,¹ P.A. Kalmykov²

**Graduate student*

¹*Ivanovo State University, Ivanovo, Russia*

²*JCS "Generium", Volginsky, Russia*

E-mail: a.kalmykova@generium.ru

This paper presents the results of evaluating the absorption spectra of analytical signals obtained during the development of an analytical method for determining free amino acids (histidine, arginine). The subject of the study was a medicinal product, a humanized monoclonal antibody produced using recombinant DNA and containing a high concentration of the target protein (approximately 150 mg/ml), as well as auxiliary components that promote stabilization and prevent degradation—the free amino acids histidine and arginine. The method involves pre-column derivatization of the sample with DABS-Cl, followed by separation of the analytes using reversed-particle HPLC with UV-Vis detection of amino acid derivatives.

Keywords: amino acids, derivatization, DABS-Cl, HPLC, biopreparations, absorption spectra.

Исследование комплексов Ni с аминокислотами и их 4f-металлакриптитов методами ИК-спектроскопии

Карманов А.Д.,^{1*} Саварец А.Р.,² Новикова Е.А.,³ Долженко В.Д.^{1,3}

*Студент

¹Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Высший химический колледж Российской академии наук, Москва, Россия

²Институт органической химии имени Н.Д. Зелинского Российской Академии наук, Москва, Россия

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия

E-mail: alexkarma2006@gmail.com

Произведено исследование ИК-спектров поглощения комплексов Ni с аминокислотами (L-Ile, L-Val, L-Gly) и их металлоакриптитов состава $[LaNi_6(AA)_{12}](ClO_4)_3$ (AA – аминокислота) с лантаноидами с применением изотопного замещения атомов NH_2 -группы на атомы D и DFT-расчётов. Осуществлено точное отнесение полос поглощения ИК-спектров $Ni(AA)_2 \cdot 2H_2O$ и $[LaNi_6(Ile)_{12}](ClO_4)_3$. Для $Ni(Gly)_2$ обнаружено значительное расщепление колебаний карбоксильной группы, вызванное увеличением ковалентности связи Ni-O1 и мостиковой координации двумя атомами Ni. Предложена структура $Ni(Ile)_2$ на основании закономерностей изменения величины ΔCOO^- в обезвоженных комплексах. В ИК-спектрах металлоакриптитов $[LaNi_6(AA)_{12}](ClO_4)_3$ обнаружено раздвоение полосы асимметричного валентных колебаний COO^- -группы.

Ключевые слова: металлоакриптиты, лантаноиды, комплексы, редкоземельные элементы, спектроскопия, никель, инфракрасная спектроскопия, нормально-координатный анализ, изотопное замещение.

Study of Ni complexes with amino acids and their 4f-metalacryptates by IR spectroscopy methods

Karmanov A.D.,^{1*} Savarets A.R.,² Novikova E.A.,³ Doljenko V.D.^{1,3}

*Student

¹ D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology,

Higher Chemical College of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

³M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: alexkarma2006@gmail.com

A study of the IR absorption spectra of Ni complexes with amino acids (L-Ile, L-Val, L-Gly) and their metallacryptates $[LaNi_6(AA)_{12}](ClO_4)_3$ (AA – amino acid) with lanthanides was conducted using isotopic substitution of NH_2 -group atoms with D atoms and DFT calculations. Precise assignment of the absorption bands in the IR spectra of $Ni(AA)_2 \cdot 2H_2O$ and $[LaNi_6(Ile)_{12}](ClO_4)_3$ was carried out. For $Ni(Gly)_2$, significant splitting of the carboxyl group vibrations was discovered, caused by an increase in the covalency of the Ni-O1 bond and bridging coordination by two Ni atoms. The structure of $Ni(Ile)_2$ was proposed based on the patterns of change in the $\Delta(COO^-)$ value in dehydrated complexes. In the IR spectra of the metallacryptates $[LaNi_6(AA)_{12}](ClO_4)_3$, a doubling of the band corresponding to the asymmetric stretching vibration of the COO^- group was observed.

Keywords: metallacryptates, lanthanoids, complexes, rare-earth elements, spectroscopy, nickel, infrared spectroscopy, normal coordinate analysis, isotopic substitution.

Разработка модели с использованием машинного обучения для предсказания химических сдвигов ядер ^{55}Mn и ^{57}Fe

Ковалев А.Е.,* Исаев Я.И., Ходов И.А.

**Аспирант 1 года обучения*

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

E-mail: aleks-kovalev-2001@mail.ru

В настоящей работе была разработана модель, построенная с помощью метода машинного обучения Chemprop, а также с использованием алгоритмов CatBoost и Trans-CNNi для предсказания химических сдвигов сигналов ЯМР ядер переходных металлов ^{55}Mn и ^{57}Fe . Приведены графики распределения химических сдвигов и сравнения значений ошибки RMSE для каждой модели.

Ключевые слова: переходные металлы, ЯМР-спектроскопия, химический сдвиг, машинное обучение, CatBoost, RdKit, Trans-CNNi.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 22-13-00257-П.

Development of a machine learning model for predicting chemical shifts of ^{55}Mn and ^{57}Fe nuclei

Kovalev A.,* Isaev Y., Khodov I.

**Graduate student*

G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia

E-mail: aleks-kovalev-2001@mail.ru

In this study, a model was developed using the Chemprop machine learning method, as well as using the CatBoost and Trans-CNNi algorithms, to predict the NMR chemical shifts of the ^{55}Mn and ^{57}Fe transition metal nuclei. The graphs of the distribution of chemical shifts and the comparison of the RMSE error values for the models predicting the chemical shifts of the studied nuclei are presented.

Keywords: transition metals, NMR spectroscopy, chemical shift, machine learning, CatBoost, RdKit, Trans-CNNi.

Качественный и количественный состав органических кислот в вине как показатель идентификации такого вида фальсификации, как петиотизация

Ковалёва А. М.,* Липатова Л. П.

**Студент*

Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова, Высшая школа «Новые материалы и технологии» (факультет), Москва, Россия

E-mail: aleksa2507@bk.ru

В данной статье рассмотрено понятие петиотизации, а также рассмотрены различия химического состава вина, полученного обычным способом и способом петиотизации. В результате анализа сделаны выводы о том, как выявить данный способ фальсификации и меры предупреждения возникновения данного вида фальсификации на рынке. Составлена методика исследования для определения петиотизации вина.

Ключевые слова: петиотизация, вино, винный напиток, технический регламент, государственный стандарт, хроматография, химический состав, идентификация, фальсификация.

The qualitative and quantitative composition of organic acids in wine as an indicator of the identification of such a type of falsification as petiotization

Kovaleva A.M.,* Lipatova L. P.

**Student*

G.V. Plekhanov Russian University of Economics, Higher School of New Materials and Technologies (Faculty), Moscow, Russia

E-mail: aleksa2507@bk.ru

The concept of petiotization, as well as the differences in the chemical composition of wine produced using conventional methods and the petiotization method was discusses. The analysis concludes with recommendations on how to identify this type of adulteration and prevent its occurrence in the market. The article also provides a research methodology for determining the petiotization of wine.

Keywords: petiotization, wine, wine beverage, technical regulation, state standard, chromatography, chemical composition, identification, adulteration.

Свойства антистоксовых люминофоров и механизмы антистоксовой люминесценции

Кожаткин И.Д.,* Щербинин А.В.

**Студент, 4 курс специалитета
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: ivankozhatkin@gmail.com*

Работа представляет собой литературный обзор по явлению антистоксовой люминесценции. Рассматриваются некоторые механизмы процессов, приводящих к этому явлению. Обсуждаются примеры химических систем различной природы, в которых экспериментально наблюдалась антистоксова люминесценция, а также возможности её практического применения.

Ключевые слова: антистоксова люминесценция, апконверсия, перенос энергии, механизм Декстера, триплет – триплетная аннигиляция.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300176-3.

Properties of anti-Stokes phosphors and mechanisms of anti-Stokes luminescence

Kozhatkin I.D.,* Scherbinin A.V.

**Student, 4-th year
M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: ivankozhatkin@gmail.com*

This paper presents a literature review on the phenomenon of anti-Stokes luminescence. Some mechanisms of the processes leading to this phenomenon are examined. Examples of chemical systems of various natures in which anti-Stokes luminescence has been experimentally observed are discussed, as well as the possibilities of its practical application.

Keywords: anti-Stokes luminescence, upconversion, energy transfer, Dexter mechanism, triplet-triplet annihilation

Квантово-химическое моделирование адсорбции ацетилена и этилена на малых биметаллических кластерах InPd

Коляденков А.Р.,^{1*} Пичугина Д.А.,² Марков П.В.,¹ Машковский И.С.,¹
Стахеев А.Ю.¹

**Аспирант*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: kar@ioc.ac.ru

Методом теории функционала плотности (DFT) с функционалом LPBEVVV проведено моделирование адсорбционных комплексов ацетилена и этилена с 4-атомными кластерами In_nPd_{4-n} ($n = 0-4$). Рассмотрено влияние введения In на энергию и геометрию связывания C_2H_2 и C_2H_4 с исследуемыми кластерами. Показано, что увеличение содержания In в PdIn кластерах, в целом, приводит к ослаблению адсорбции как ацетилена, так и этилена.

Ключевые слова: ацетилен, этилен, адсорбция, биметаллические кластеры, палладий, индий, DFT

В работе использована методология, разработанная при выполнении проекта РНФ 23-13-00301.

Quantum-chemistry simulation of acetylene and ethylene adsorption on small bimetallic clusters InPd

Kolyadenkov A. R.,^{1*} Pichugina D.A.,² Markov P.V.,¹ Mashkovsky I.S.,¹ Stakheev A. Yu.¹

**Graduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: kar@ioc.ac.ru

The simulation of the adsorption complexes of acetylene and ethylene with In_nPd_{4-n} ($n = 0-4$) clusters was calculated at DFT LPBEVVV level. The influence of the introduction of In on energy and geometry of the binding of C_2H_2 and C_2H_4 with the clusters was considered. It has been shown that increasing the In content in PdIn clusters, in general, leads to a weakening of the adsorption of both acetylene and ethylene.

Keywords: acetylene, ethylene, adsorption, bimetallic clusters, palladium, indium, DFT.

Влияние условий сверхкритической флюидной экстракции диоксидом углерода на эффективность извлечения биоактивных соединений и витамина Е из коры осины (*Populus tremula L.*)

Корепанова Я.Ю.,* Яруллин Л.Ю., Коваленко С.А., Хайрутдинов В.Ф.

**Аспирант 1 год обучения*

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

E-mail: yaroslava2900@mail.ru

*На основе метода сверхкритической флюидной экстракции с использованием диоксида углерода были получены экстракты *Populus Tremula L.* при температуре 313.15 К и давлении 15, 20 и 30 МПа. Для сравнения количественных показателей содержания витамина Е и антиоксидантных свойств был получен экстракт *Populus Tremula L.* с использованием традиционного метода (петролейным эфиром). Количественное определение витамина Е проводилось методом газовой хроматографии (ГХ-МС). Анализ выявил присутствие витамина Е во всех трех экстрактах, полученных с помощью CO₂. Выход витамина Е был получен при максимальном давлении 30 МПа и температуре 313.15 К с выходом 8.5 %. Методом хромато-масс-спектрометрии был определен компонентный состав CO₂-экстракта *Populus tremula L.*, в котором выявлено значительное количество жирных кислот и их эфиров, составляющее 32.74 %.*

*Ключевые слова: *Populus tremula L.*, кора осины, сверхкритическая флюидная экстракция, диоксид углерода, компонентный состав.*

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-79-10129-П, <https://rscf.ru/project/22-79-10129-П/>.

The influence of carbon dioxide supercritical fluid extraction conditions on the efficiency of bioactive compound and vitamin E recovery from aspen bark (*Populus tremula L.*)

Korepanova Ya.Yu.,* Yarullin L.Yu., Kovalenko S.A., Khairutdinov V.F.

**Graduate student*

Kazan National Research Technological University, Kazan, Russia

E-mail: yaroslava2900@mail.ru

*Based on the supercritical fluid extraction method using carbon dioxide, *Populus Tremula L.* extracts were obtained at a temperature of 313,15 K and pressures of 15, 20, and 30 MPa. For comparison of the quantitative indicators of vitamin E content and antioxidant properties, a *Populus Tremula L.* extract was obtained using a traditional method (with petroleum ether). Quantitative determination of vitamin E was carried out by gas chromatography (GC-MS). The analysis revealed the presence of vitamin E in all three CO₂-derived extracts. The yield of vitamin E was obtained at the maximum pressure of 30 MPa and temperature of 313,15 K with an output of 8,5 %. The component composition of the CO₂ extract of *Populus tremula L.* was determined by chromatography-mass spectrometry, which revealed a significant amount of fatty acids and their esters, constituting 32,74 %.*

*Keywords: *Populus tremula L.*, aspen bark, supercritical fluid extraction, supercritical CO₂, chemical composition.*

Влияние соотношения Ce/La и введения оксида меди на активность CeO₂-La₂O₃ катализаторов в предпочтительном окислении CO в присутствии водорода

Коржова А. Н.,* Каплин И.Ю., Голубина Е.В.

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
E-mail: aminakorzhova@yandex.ru*

Исследовано влияние соотношения Ce/La и добавки оксида меди на свойства катализаторов состава CeO₂-La₂O₃, полученных методом совместного осаждения гидроксидом калия. Проведено сравнение активности в реакции селективного окисления CO кислородом в присутствии водорода. Реакцию проводили в проточной системе с неподвижным слоем катализатора при 50-400°C. Катализаторы охарактеризованы методами ТПВ-H₂, КР-спектроскопии, СЭМ-ЭДА и термического анализа.

Ключевые слова: CeO₂, PROX-CO, модифицирование CuO

Работа выполнена в рамках государственного задания (АААА-А21-121011990019-4).

Effect of the Ce/La ratio and copper oxide addition on the activity of CeO₂-La₂O₃ catalysts in the preferential oxidation of CO in the presence of hydrogen

Korzhova A.N.,* Kaplin I.Yu., Golubina E.V.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: aminakorzhova@yandex.ru*

This study investigated the effect of the Ce/La ratio and copper oxide addition on the properties of CeO₂-La₂O₃ catalysts obtained by coprecipitation with potassium hydroxide. Their activity in the selective oxidation of CO with oxygen in the presence of hydrogen was compared. The reaction was carried out in a fixed-bed flow system at 50-400°C. The catalysts were characterized using H₂-TPR, Raman spectroscopy, SEM-EDA, and thermal analysis.

Keywords: CeO₂, PROX-CO, modification of CuO

Нанопористый триазиновый каркас на основе молекулы F4-TCNQ: исследование физических свойств

Коровина А.В.,* Квашнин Д.Г.

**Аспирант*

*Институт Биохимической Физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: KorovinaNastya99@gmail.com

В данной работе с помощью теории функционала электронной плотности (DFT) исследованы возможные пути получения мономолекулярного (двумерного) слоя, состоящего из молекул F4-TCNQ. С помощью DFT и метода молекулярной динамики была оценена температурная стабильность полученных слоев, рассчитаны электронные и механические свойства. Полученные результаты свидетельствуют о перспективности использования молекул F4-TCNQ для получения новых стабильных двумерных материалов, пригодных для разделения нефтехимических газов.

Ключевые слова: наноматериалы, полимеры, триазиновые каркасы, двумерный каркас, мономолекулярный слой

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ (25-73-10250).

Nanoporous Triazine Framework Based on the F4-TCNQ Molecule: A Study of Physical Properties

Korovina A.,* Kvashnin D.

**Graduate student*

N.M. Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: KorovinaNastya99@gmail.com

In this work, possible pathways for obtaining a monomolecular (two-dimensional) layer consisting of F4-TCNQ molecules were investigated using density functional theory (DFT). Using DFT and molecular dynamics simulations, the thermal stability of the obtained layers was assessed, and their electronic and mechanical properties were calculated. The obtained results indicate the promise of using F4-TCNQ molecules for creating novel stable two-dimensional materials suitable for the separation of petrochemical gases.

Keywords: nanomaterials, polymers, triazine frameworks, two-dimensional framework, monomolecular layer

Разработка деэмульгатора на основе сложных эфиров растительного происхождения для разрушения нефтешламовых эмульсий

Космынина Т.А.,* Буров Е.А.

**Студент магистратуры*

Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

E-mail: t.tatkosma@yandex.ru

Нефтешламы являются одним из наиболее проблемных видов нефтесодержащих отходов, характеризующихся высокой агрегативной и эмульсионной устойчивостью, что существенно затрудняет их переработку и утилизацию. В работе обоснована актуальность разработки химических реагентов для разрушения нефтешламовых эмульсий и представлена разработка деэмульгатора на основе сложных эфиров растительного происхождения. Проведён анализ компонентного состава реальных образцов нефтешламов, включающий определение содержания асфальтенов, смол, масел и механических примесей. Синтезированы и испытаны лабораторные образцы деэмульгаторов, показавшие высокую эффективность фазового разделения и возможность возврата углеводородной фазы в переработку.

Ключевые слова: нефтешламы, нефтешламовые эмульсии, деэмульгатор, сложные эфиры, растительное сырьё, асфальтены, смолы, утилизация.

Development of a deemulsifier based on plant-derived esters for breaking down oil sludge emulsions

Kosminina T.A.,* Burov E.A.

**Master's student*

I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia

E-mail: t.tatkosma@yandex.ru

Oil sludge is one of the most problematic types of oil-containing waste, characterized by high aggregate and emulsion stability, which significantly complicates their processing and disposal. The paper substantiates the relevance of developing chemical reagents for breaking oil sludge emulsions and presents the development of a deemulsifier based on plant-derived esters. Laboratory samples of deemulsifiers were synthesized and tested, showing high efficiency of phase separation and the possibility of returning the hydrocarbon phase to processing.

Keywords: oil sludge, oil sludge emulsions, deemulsifier, esters, plant raw materials, asphaltenes, resins, recycling.

Моделирование восстановительного гидрирования $C_{70}[NCO_2Me]$

Кочеров С.А.,* Горюнков А.А.

*Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: slavka0706@gmail.com

Проведен анализ стабильности и ожидаемых трансформаций для семейства изомеров азиридинофуллеренов $C_{70}[NCO_2Me]$ в нейтральной и дианионной формах на уровне теории функционала плотности. Показано, что в зависимости от позиции адденда в дианионе $C_{70}[NCO_2Me]^{2-}$ соединение может находиться как в [6,6]-закрытой, так и в [6,6]-открытой конфигурациях. Показано, что последовательное протонирование дианионов $C_{70}[NCO_2Me]^{2-}$ может протекать региоселективно в случае кинетического контроля реакции с образованием продуктов гидрирования мостиконесущих атомов углерода.

Ключевые слова: фуллерены, восстановительное гидрирование, теория функционала плотности, азиридинофуллерены, кинетический контроль, гидриды фуллеренов.

Работа выполнена в рамках работ по теме государственного задания «Химическая термодинамика и теоретическое материаловедение» (№ 121031300039-1).

Simulation of reductive hydrogenation of $C_{70}[NCO_2Me]$

Kocherov S.A.,* Goryunkov A.A.

*Student

M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: slavka0706@gmail.com

The relative energies and cage transformations for the family of aziridinofullerenes $C_{70}[NCO_2Me]$ in neutral and dianionic states are analyzed at the level of the density functional theory. It has been shown that, depending on the addend position in dianion $C_{70}[NCO_2Me]^{2-}$, the compound can be in the [6,6]-closed or [6,6]-open configurations. We found that the sequential protonation of $C_{70}[NCO_2Me]^{2-}$ dianions will regioselectively proceeds at the bridging carbon atoms under the kinetic control yielding $C_{70}[NCO_2Me]H_2$.

Keywords: fullerenes, reductive hydrogenation, density functional theory, aziridinofullerenes, kinetic control, fullerene hydrides.

OLED на основе комплексов Yb³⁺: статистический анализ и машинное обучение

Кошелев Д.С.,^{1*} Емельянов Д.Ю.,² Уточникова В.В.¹

**Младший научный сотрудник*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
механико-математический факультет, Москва, Россия

E-mail: koshelevds@my.msu.ru

Координационные соединения иттербия демонстрируют высокую эффективность инфракрасного (ИК) излучения на 1000 нм и активно тестируются в качестве эмиссионного слоя органических светоизлучающих диодов (OLED). В данной работе проводится комплексный анализ зависимости электролюминесцентных (EL) свойств ИК OLED от их гетероструктуры и свойств эмиттера на основе всех опубликованных на 2025 год устройств. Собранный датасет из более чем 90 записей был подвергнут статистическому анализу и использован для тренировки моделей машинного обучения. Показано, что для данной выборки устройств зависимость EL от квантового выхода имеет место быть, а от времени жизни скорее отсутствует в виду и так низких времен излучения, что выводит на первый план важность подбора гетероструктуры OLED.

Ключевые слова: OLED, иттербий, комплексы, машинное обучение, электролюминесценция

Проект поддержан грантом РФФ 25-73-00157.

Yb³⁺ based OLED: statistic analysis and machine learning

Koshelev D.S.,^{1*} Emelyanov D. Yu.,² Utochnikova V.V.¹

**Junior Researcher*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Mechanics and Mathematics,
Moscow, Russia

E-mail: koshelevds@my.msu.ru

Ytterbium coordination compounds exhibit high-efficiency near-infrared (NIR) emission at 1000 nm and are actively investigated as an emissive layer in organic light-emitting diodes (OLEDs). This work presents a comprehensive analysis of the electroluminescent (EL) properties dependence of the NIR OLEDs on their heterostructure and emitter characteristics, based on all devices reported up to 2025. A collected dataset of over 90 entries was subjected to statistical analysis and used to train machine learning models. It was demonstrated that for this set of devices, EL performance correlates with the emitter's quantum yield, whereas no significant correlation with excited-state lifetime is observed, likely due to the inherently low radiative lifetimes. This finding highlights the critical importance of optimizing the OLED heterostructure.

Keywords: OLED, ytterbium, complexes, machine learning, electroluminescence.

Иммобилизация как метод повышения устойчивости целлюлолитических ферментных препаратов в процессах получения биоэтанола

**Кравцова О.А., Соколова А.В., Панькова Д.А., Сульман М.Г., Ожимкова Е.В.,
Сульман А.М., Матвеева В.Г.**

студент

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: alena.svet.00@yandex.ru

В работе рассмотрено создание магнитоотделяемого гетерогенного биокатализатора для гидролиза целлюлозы путем адсорбции коммерчески доступного ферментного препарата «Целлюлаза» на магнитных наночастицах сверхсшитого полистирола (марка MN100). Описаны методики синтеза магнитных наночастиц и процедура адсорбции фермента на носителе. Исследованы основные факторы, влияющие на каталитическую активность фермента, включая кислотность среды и температурный режим. Показано, что иммобилизованная форма ферментного препарата обладает увеличенной стабильностью в более широком диапазоне pH и температур по сравнению со свободным энзимом. что открывает перспективы для повторного использования дорогостоящих гидролитических ферментов в технологических процессах переработки лигноцеллюлозной биомассы в промышленном масштабе.

Ключевые слова: фермент, целлюлаза, лигноцеллюлоза, иммобилизация, биоконверсия

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 24-79-10042.

Immobilization as a method for increasing the stability of cellulolytic enzyme preparations in bioethanol production

**Kravtsova O.A., Sokolova A.V., Pankova D.A., Sulman M.G., Ozhimkova E.V.,
Sulman A.M., Matveeva V.G.**

**Student*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: alena.svet.00@yandex.ru

This paper discusses the creation of a magnetically separable heterogeneous biocatalyst for cellulose hydrolysis by adsorption of the commercially available enzyme preparation "Cellulase" onto magnetic nanoparticles of hypercrosslinked polystyrene (grade MN100). The methods for synthesizing the magnetic nanoparticles and the procedure for adsorbing the enzyme onto the support are described. The main factors influencing the catalytic activity of the enzyme, including the acidity of the medium and the temperature regime, are investigated. The immobilized form of the enzyme preparation was shown to have increased stability over a wider range of pH and temperatures compared to the free enzyme, opening up prospects for the reuse of expensive hydrolytic enzymes in industrial-scale lignocellulosic biomass processing processes.

Keywords: enzyme, cellulase, lignocellulose, immobilization, bioconversion

Влияние способа введения W-содержащей промотирующей добавки на свойства VPO катализаторов парциального окисления n-бутана

Кравченко В.Д.,* Зорина А.А., Воробкало В.А., Никифоров А.И.

**Студент, 5 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: valerkrav04@mail.ru*

Работа посвящена изучению влияния W-содержащего промотора на каталитические и физико-химические свойства пирофосфата ванадила (VPO) в реакции парциального окисления n-бутана в проточной системе с неподвижным слоем катализатора. Была синтезирована серия образцов VPO-катализаторов с варьированием способа введения промотора (соосаждение и пропитка), а также источника вольфрама. Проведён анализ свойств катализаторов методами РФА, РФЭС, РФЛА, низкотемпературной адсорбции-десорбции азота, а также исследованы их каталитические свойства в вышеуказанной реакции. Показано, что способ промотирования влияет на фазовый состав катализаторов, что, в свою очередь, влияет на каталитические свойства.

Ключевые слова: гетерогенный катализ, парциальное окисление, малеиновый ангидрид, окисление бутана, пирофосфат ванадила, промотор, вольфрам.

Исследование выполнено в рамках государственного задания по теме «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ», номер № АААА-А21-121011990019-4.

Анализ элементного состава образцов выполнен при финансовой поддержке национального проекта "Наука и университеты"

Effect of the method for introducing a W-containing promoting additive on the properties of VPO catalysts for partial oxidation of n-butane

Kravchenko V.D.,* Zorina A.A., Vorobkalo V.A., Nikiforov A.I.

**Student, 5th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: valerkrav04@mail.ru*

The aim of this study is to elucidate the effect of the W-containing promoter on the catalytic and physico-chemical properties of vanadyl pyrophosphate (VPO) in the partial oxidation of n-butane in a flow system with a fixed catalyst layer. A series of VPO catalysts were synthesized using different methods of the promoter addition (coprecipitation and impregnation) and sources of tungsten (ammonia paratungstate and metatungstate). Detailed studies using XRD, XPS, XRF, low-temperature adsorption-desorption of nitrogen revealed the influence of the method for a W-containing promoting additive on the phase composition of the catalysts, which in turn affects the catalytic properties in the partial oxidation of n-butane to maleic anhydride.

Keywords: heterogeneous catalysis, partial oxidation, maleic anhydride, butane oxidation, vanadyl pyrophosphate, promoter, tungsten.

Структура и водородсорбционные свойства ряда многокомпонентных редкоземельных сплавов

Крот П.А.,* Вербецкий В.Н.

**Аспирант*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
pavelakrot@gmail.com*

Редкоземельные элементы, как известно, демонстрируют значительный магнитокалорический эффект, кроме того, они легко образуют друг с другом твердые растворы. В 2017 году Yuan с коллегами сообщили о т.н. «гигантском» магнитокалорическом эффекте в высокоэнтропийных (многокомпонентных) редкоземельных сплавах. Внедрение водорода в решетку сплава может служить способом управлять магнитными свойствами сплава. В работе проведен синтез многокомпонентных редкоземельных сплавов YGdTbDy, YGdTbDyHo и GdTbDyLaCe, проанализирована их структура, структура их гидридов и термодинамика взаимодействия сплавов с водородом.

Ключевые слова: Редкоземельные элементы, гидриды, многокомпонентные сплавы, высокоэнтропийные сплавы, водородсорбционные свойства

Structure and hydrogen sorption properties of a number of rare-earth multi-principal element alloy

Krot P.,* Verbetskiy V.

**Graduate student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
pavelakrot@gmail.com*

It is well known that rare-earth elements demonstrate a significant magnetocaloric effect, they also readily form solid solutions with each other. In 2017 Yuan et al. reported of a giant magnetocaloric effect in rare-earth high-entropy (multi-principal element) alloys. Introduction of hydrogen into the lattice of an alloy may provide a tuning method for the alloy's magnetic properties. In this work synthesis of YGdTbDy, YGdTbDyHo, and GdTbDyLaCe rare-earth multi-principal element alloys was carried out, the structure of alloys in question as well of their hydrides was analyzed, thermodynamics of alloy-hydrogen interactions was studied.

Keywords: rare-earth metals, hydrides, multi-principal element alloys, high-entropy alloys, hydrogen sorption properties

Аморфные ароматические полимеры как носители наночастиц палладия – катализаторов селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола

Кунарева А.А.,* Бахвалова Е.С., Матвеева В.Г., Никошвили Л.Ж.

**Студент 2-го курса магистратуры*

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: ankunareva@mail.ru

В рамках данной работы была синтезирована серия палладиевых катализаторов (с содержанием палладия 1 масс.%), нанесенных на аморфные пористые ароматические полимеры. Полимеры были получены путем одностадийной сшивки мономеров по реакции Фриделя-Крафтса с применением метилаля (сшивающего агента) и безводного FeCl₃ (катализатора полимеризации). Каталитические свойства синтезированных образцов изучали в реакции селективного гидрирования 2-метил-3-бутин-2-ола при атмосферном давлении и температуре 90 °С в среде бутанола-1. Показано, что синтезированные катализаторы позволяют достичь 95-98 % селективности по отношению к 2-метил-3-бутен-2-олу при практически полной конверсии субстрата. Наиболее высокую каталитическую активность проявил Pd⁰/КРБ (КРБ – карбазол), предварительно восстановленный борогидридом натрия.

Ключевые слова: палладий, селективное гидрирование, 2-метил-3-бутин-2-ол, пористые аморфные ароматические полимеры

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №25-73-20071).

Amorphous aromatic polymers as supports for palladium nanoparticles – catalysts of selective hydrogenation of 2-methyl-3-butyn-2-ol

Kunareva A.A.,* Bakhvalova E.S., Sidorov A.I., Nikoshvili L. Zh.

**Masters's student*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: ankunareva@mail.ru

In the framework of this study, a series of palladium catalysts (with a palladium content of 1 wt.%) supported on amorphous porous aromatic polymers was synthesized. The polymers were obtained by the one-step crosslinking of monomers via the Friedel-Crafts reaction using methylal (crosslinking agent) and anhydrous FeCl₃ (polymerization catalyst). The catalytic properties of the synthesized catalyst samples were studied in the reaction of selective hydrogenation of 2-methyl-3-butyn-2-ol at ambient pressure and temperature of 90 °C in butanol-1 medium. It was shown that the synthesized catalysts allow achieving 95-98 % selectivity with respect to 2-methyl-3-buten-2-ol with almost complete conversion of the substrate. Pd⁰/CRB (CRB – carbazole), preliminarily reduced with sodium borohydride, showed the highest catalytic activity.

Keywords: palladium, selective hydrogenation, 2-methyl-3-butyn-2-ol, porous amorphous aromatic polymers

Особенности образования формальдегида и его производных в процессе гидрирования диоксида углерода на поверхности катализатора Pt-Ni-Cu/SiO₂

Курагин А.А.,* Цветков Д.Ю., Петрова А.И., Лакина Н.В., Долуда В.Ю.

**Аспирант*

*Тверской государственной технической университет,
химико-технологический факультет, Тверь, Россия
E-mail: doludav@yandex.ru*

Исследование вопросов трансформации диоксида углерода в ценные химические соединения являются актуальным в рамках увеличивающегося антропогенного воздействия человека на окружающую среду. При этом получение формальдегида и его производных с использованием диоксида углерода в качестве исходного реагента является привлекательной альтернативой используемым в настоящее время методам его синтеза. В представленном исследовании представлены результаты изучения особенностей образования формальдегида и его производным на поверхности триметаллического катализатора Pt-Ni-Cu/SiO₂. Получены зависимости накопления формальдегида, метилформаль, диметил формаль и триоксана в зависимости от температуры, и парциального давления реагирующих веществ.

Ключевые слова: трансформация диоксида углерода, катализ, Pt, Ni, Cu

Проведенные исследования выполнены в рамках проекта РНФ № 25-23-00333.

Formaldehyde and its derivatives formation particularities for carbon dioxide hydrogenation process over Pt-Ni-Cu/SiO₂ catalysts

Kuragin A.A.,* Tsvetkov D.Yu., Petrova A.I., Lakina N.V., Doluda V.Yu.

**Graduate student*

*Tver State Technical University, Department of chemical technology, Tver, Russia
E-mail: doludav@yandex.ru*

The study of the carbon dioxide transformation into valuable chemical compounds is relevant in the context of the increasing anthropogenic human impact on the environment. At the same time, the production of formaldehyde and its derivatives using carbon dioxide as a feedstock is an attractive alternative to the currently used methods of its synthesis. The presented work shows the results of formaldehyde and its derivatives formation study on the surface of a Pt-Ni-Cu/SiO₂ trimetallic catalyst. Formaldehyde, methyl formal, dimethyl formal and trioxane accumulation curves were obtained under different reaction temperatures, and reagents partial pressures.

Keywords: transformation, carbon dioxide, catalysis, Pt, Ni, Cu.

The scientific study was provided in frame of RSCF project number 25-23-00333.

Разработка мобильного приложения для статистической обработки результатов эксперимента на базе ОС Android

Лобанов М.В.,^{1*} Лобанов В.Н.,² Лобанов Н.В.³

**Студент*

¹*Национальный исследовательский университет «Московский авиационный институт», Москва, Россия*

²*АО Межотраслевой институт переработки пластмасс - НПО «Пластик», Москва, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: MikkerGo@yandex.ru

В статье рассматривается разработка мобильного приложения TrueStat на базе ОС Android, осуществляющего статистическую обработку результатов эксперимента, проводимого пользователем. Отличительной особенностью разработанного продукта является возможность выбора заданного параметра надёжности и точности прибора.

Ключевые слова: статистическая обработка, Android приложение, результаты эксперимента.

Development of Android-based mobile application for statistical processing of experimental results

Lobanov M.V.,^{1*} Lobanov V.N.,² Lobanov N.V.³

**Student*

¹*Moscow Aviation Institute, Moscow, Russia*

²*JSC Intersectoral Institute of Plastics Processing – SPA «Plastic», Moscow, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: MikkerGo@yandex.ru

This article discusses the development of an Android-based mobile application that statistically processes the results of a user-conducted experiment. A distinctive feature of the developed product is the ability to select a preset device reliability and accuracy parameter.

Keywords: statistical processing, Android application, experimental results.

Допированные хромом силикаты лантана как катализаторы паровой конверсии этанола

Лопатин М.Ю.,^{1*} Фёдорова А.А.,¹ Морозов И.В.,¹ Казаков С.М.,¹ Фёдорова Ю.Е.,²
Кнотько А.В.,¹ Ларина Т.В.,² Маслаков К.И.,¹ Беззубов С.И.,³ Садыков В.А.²

**Аспирант*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт катализа имени Г.К. Борескова СО Российской академии наук,
Новосибирск, Россия

³Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии
наук, Москва, Россия

E-mail: maksim.lopatin@chemistry.msu.ru

В работе описаны синтез и свойства впервые полученного хромсодержащего силиката лантана номинального состава $La_9NaSi_{5.5}Cr_{0.5}O_{26.5}$ с развитой поверхностью, что подтверждено методами РФА, РСМА, РФЭС, ИК- и УФ-спектроскопии. Полученные образцы были исследованы в качестве катализаторов паровой конверсии этанола.

Ключевые слова: силикат лантана, паровая конверсия этанола, допирование, золь-гель метод, β -циклодекстрин.

Авторы работы благодарят Колесник И.В., Тедееву М.А. и Капустина Г.И. за проведение исследований. Работа выполнена при поддержке Программы развития МГУ.

Cr-doped lanthanum silicates as ethanol steam reforming catalysts

Lopatin M.Y.,^{1*} Fedorova A.A.,¹ Morozov I.V.,¹ Kazakov S.M.,¹ Fedorova Y.E.,² Knotko A.V.,¹
Larina T.V.,² Maslakov K.I.,¹ Bezzubov S.I.,³ Sadykov V.A.²

**Graduate student*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²Boriskov Institute of Catalysis SB RAS, Novosibirsk, Russia

³Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Moscow, Russia

E-mail: maksim.lopatin@chemistry.msu.ru

The article deals with synthesis and properties of firstly obtained Cr-containing apatite type lanthanum silicate $La_9NaSi_{5.5}Cr_{0.5}O_{26.5}$ with developed surface. Samples were characterized with XRD, EDX, XPS, IR and UV spectroscopy. Catalytic properties of samples in the ethanol steam reforming reaction were also studied.

Keywords: apatite type lanthanum silicate, ethanol steam reforming, doping, sol-gel method, β -cyclodextrin.

Совместный пиролиз отходов полимеров и древесной биомассы

Луговой Ю.В., Чалов К.В., Монжаренко М.А.,* Косивцов Ю.Ю., Сульман М.Г.

**Молодой ученый*

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: pn-just@yandex.ru

Настоящее исследование посвящено изучению процесса совместного пиролиза и направлено на разработку технологии термокаталитической переработки сложных органических отходов антропогенного происхождения. В состав модельных смесей входили отходы биомассы (опилки сосновой древесины) и образцы полимеров (РЕХ-А, ПЭТФ) в различном массовом соотношении. Как показали данные термогравиметрического анализа, в случае пиролиза модельных смесей, содержащих опилки сосновой древесины и ПЭТФ наблюдалось существенное снижение температуры деструкции основных компонентов, составляющих модельную смесь, что может быть связано с взаимным влиянием исходных компонентов в процессе термической деструкции.

Ключевые слова: сопиролиз, модельные смеси, биомасса, полимеры, опилки сосны, РЕХ-А, ПЭТФ.

Исследования проведены при финансовой поддержке РНФ (25-29-01494).

Co-pyrolysis of polymer waste and wood biomass

Lugovoy Yu.V., Chalov K.V., Monzharenko M.A.,* Kosivtsov Yu.Yu., Sulman M.G.

**Young scientist*

*Tver State Technical University, Department of Biotechnology, Chemistry and Standardization,
Tver, Russia*

E-mail: pn-just@yandex.ru

This study examines the process of co-pyrolysis and aims to develop a technology for the thermal-catalytic processing of complex organic waste of anthropogenic origin. Model mixtures included biomass waste (pine sawdust) and polymer samples (PEX-A, PET) in various mass ratios. Thermogravimetric analysis data showed that pyrolysis of model mixtures containing pine sawdust and PET resulted in a significant decrease in the degradation temperature of the main components, which may be due to the mutual influence of the original components during thermal degradation.

Keywords: pyrolysis, model mixtures, biomass, polymers, pine sawdust, PEX-A, PET.

Каталитические свойства феррита кобальта в реакции конденсации ацетона в сверхкритических условиях

Лукьянов П.С.,^{1*,2} Богдан Т.В.,^{1,2} Машенко Н.В.,² Купреенко С.Ю.,¹ Богдан В.И.^{1,2}

**Студент*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва,
Россия

E-mail: sir.kotok@yandex.ru

*Исследована каталитическая конверсия ацетона на феррите кобальта, синтезированном методом совместного осаждения солей. Каталитические испытания проводили в проточном трубчатом реакторе при температуре 350 °С и давлениях 30 и 110 атм. Установлено, что проведение реакции в сверхкритической среде эффективно подавляет процесс коксообразования на поверхности феррита кобальта. В докритических условиях (30 атм) наблюдается быстрое падение активности из-за зауглероживания. В сверхкритических условиях (110 атм) катализатор сохраняет стабильную активность (~35% конверсии) в течение 4 часов, основными продуктами являются оксид мезитила и мезитилен. При этом наблюдается *in situ* кристаллизация катализатора.*

Ключевые слова: феррит кобальта, гетерогенный катализ, альдольная конденсация, ацетон, сверхкритические условия,

Catalytic properties of cobalt ferrite in the acetone condensation reaction under supercritical conditions

Lukyanov P.S.,^{1*,2} Bogdan T.V.,^{1,2} Mashchenko N.V.,² Kupreenko S.Y.,¹ Bogdan V.I.^{1,2}

**Student*

¹Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: sir.kotok@yandex.ru

The catalytic conversion of acetone over cobalt ferrite synthesized by co-precipitation was studied. Catalytic tests were carried out in a flow tubular reactor at 350 °C and pressures of 30 and 110 atm. It was found that conducting the reaction in a supercritical medium effectively suppresses the coking process on the cobalt ferrite surface. Under subcritical conditions (30 atm), a rapid decline in activity due to carbonization is observed. Under supercritical conditions (110 atm), the catalyst maintains stable activity (~35% conversion) for 4 hours, with the main products being mesityl oxide and mesitylene. In situ catalyst crystallization is observed under these conditions.

Keywords: cobalt ferrite, heterogeneous catalysis, aldol condensation, acetone, supercritical conditions

Экстракция эфиров жирных кислот в сверхкритических флюидных условиях

Мазанов С.В.,* Аетов А.У., Монахов И.И., Соловьева А.О., Исаев А.Д.

**Доцент кафедры Теоретические основы теплотехники
Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Институт химического и нефтяного машиностроения, Казань, Россия
E-mail: serg989@yandex.ru*

Осуществлено экстракционное извлечение смеси этилолеата и этилпальмитата, взятых равными по массе, с диоксидом углерода при $T=313,15$ К, $\tau=24-32$ мин, в диапазоне $P=12,5 - 20$ МПа, при расходе CO_2 1 мл/мин и 50 % заполнении экстрактора. По результатам хроматографии заметен существенный выход этилпальмитата как целевого продукта.

Ключевые слова: экстракция, этилолеат, этилпальмитат, диоксид углерода, сверхкритические условия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №23-79-10304, <https://rscf.ru/project/23-79-10304/>).

Extraction of Fatty Acid Esters under Supercritical Fluid Media

Mazanov S.V., Aetov A.U., Monakhov I.I., Solovyova A.O., Isaev A.D.

*Kazan National Research Technological University,
Institute of Chemical and Petroleum Engineering, Kazan, Russia
E-mail: serg989@yandex.ru*

An extraction of a mixture of ethyl oleate and ethyl palmitate, taken in equal mass proportions, with carbon dioxide was carried out at $T=313.15$ K, $\tau=24-32$ min, in the pressure range of $P = 12.5 - 20$ MPa, with a CO_2 flow rate of 1 ml/min and 50 % extractor fill. According to chromatography results, a significant yield of ethyl palmitate as the target product was observed.

Keywords: extraction, ethyl oleate, ethyl palmitate, carbon dioxide, supercritical conditions.

Фазовое равновесие бинарной смеси «СО₂-ацетон» в СКФ области состояния за пределами бинодали

Мазанов С.В.,* Накипов Р.Р, Зарипов З. И., Гумеров Ф.М.

**Доцент кафедры Теоретические основы теплотехники
Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Институт химического и нефтяного машиностроения, Казань, Россия
E-mail: serg989@yandex.ru*

Исследованиями фазового равновесия и состояния систем "СО₂-ацетон", проведенными на оптической установке высокого давления в асимптотической близости к термодинамической критической точке ($T_{кр} = 313.7$ К и $P_{кр} = 8.048$ МПа) установлены области безграничного смешивания компонентов в газофазной области СКФ состояния за пределами бинодали.

Ключевые слова: фазовое равновесие, бинарная система, оптическая ячейка, диоксид углерода, ацетон.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00117-П).

Phase equilibrium of the binary mixture "CO₂-acetone" in the SCF region of state beyond the binodal

Mazanov S.V.,* Nakipov R.R, Zaripov Z.I., Gumerov F.M.
*Kazan National Research Technological University,
Institute of Chemical and Petroleum Engineering, Kazan, Russia
E-mail: serg989@yandex.ru*

Studies of the phase equilibrium and state of the "CO₂-acetone" systems, carried out on a high-pressure optical setup in asymptotic proximity to the thermodynamic critical point ($T_{cr} = 313.7$ K and $P_{cr} = 8.048$ MPa), have established regions of unlimited miscibility of the components in the gas-phase SCF region of state beyond the binodal.

Keywords: phase equilibrium, binary system, optical cell, carbon dioxide, acetone.

Влияние различных осадителей на морфологию пористых половолоконных мембран из полифениленсульфона

Макжанова Д.Т.,* Сторчун А.В., Матвеев Д.Н.

**Студент*

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: dinariya.mak@mail.ru

Свойства полимерных мембран напрямую связаны с их морфологией. Поэтому для понимания процессов, происходящих при формировании мембран, необходимо рассмотрение влияния ряда факторов, которые определяют структуру и, следовательно, свойства получаемых мембран. В данной работе было исследовано влияние скорости осаждения полимерных растворов на основе полифениленсульфона (ПФСФ) на морфологию получаемых мембран. В качестве осадителей были выбраны вода, этанол, изопропанол и бутанол. Была изготовлена половолоконная мембрана из ПФСФ, и с использованием метода сканирующей электронной микроскопии исследована ее морфология.

Ключевые слова: половолоконные мембраны, полифениленсульфон, формирование мембран, пористая структура, инверсия фаз

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-79-00231,
<https://rscf.ru/project/25-79-00231/>.*

Selection of the composition of dope solutions and spinning conditions for obtaining porous hollow fiber membranes from polyphenylene sulfone

Makzhanova D.T.,* Storchun A.V., Matveev D.N.

**Student*

A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: dinariya.mak@mail.ru

The properties of polymer membranes are directly related to their morphology. Therefore, in order to understand the processes occurring during the formation of membranes, it is necessary to consider the influence of a number of factors that determine the structure and, consequently, the properties of the resulting membranes. In this work, the effect of the rate of coagulation of polymer solutions based on polyphenylene sulfone (PPSU) on the morphology of the resulting membranes was investigated. Water, ethanol, isopropanol and butanol were selected as coagulants. A hollow fiber membrane made of PPSU was made, and its morphology was studied using scanning electron microscopy.

Keywords: hollow fiber membranes, polyphenylene sulfone, membrane spinning, porous structure, phase inversion

Объёмно-упругие свойства тройных растворов вода–ацетонитрил–диметилформамид

Малышева А.Е.,* Абрамович А.И.

**Студентка, 4 курс специалитета*

*¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: annamaly04@mail.ru*

Измерены скорость ультразвука и плотность тройных растворов вода–ацетонитрил–диметилформамид при фиксированной концентрации 0.055 м.д. ацетонитрила в температурном интервале 20–40 °С. Рассчитаны молярный объем, адиабатическая сжимаемость, коэффициент объемного теплового расширения. Проведено сравнение указанных свойств с аналогичными свойствами родительских систем вода–ацетонитрил и вода–диметилформамид. На основе анализа концентрационных зависимостей изученных параметров сделаны выводы об изменении структуры растворов при добавлении третьего компонента.

Ключевые слова: водные растворы неэлектролитов, тернарные водные растворы, растворы вода–ацетонитрил–диметилформамид, межмолекулярные взаимодействия, структура растворов, скорость ультразвука, плотность, адиабатическая сжимаемость, коэффициент объемного теплового расширения.

Работа выполнена в рамках темы «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов» (121031300090-2).

Volumetric elastic properties of water–acetonitrile–dimethylformamide ternary solutions

Malysheva A.E.,* Abramovich A.I.

**Student, 4th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: annamaly04@mail.ru*

The ultrasound velocity and density of ternary solutions of water–acetonitrile–dimethylformamide were measured at a fixed concentration of 0.055 mole fractions of acetonitrile in the temperature range of 20–40 °C. The molar volume, adiabatic compressibility, and coefficient of volumetric thermal expansion are calculated. These properties are compared with similar properties of the parent systems water–acetonitrile and water–dimethylformamide. Based on the analysis of the concentration dependences of the studied parameters, conclusions are drawn about the change in the structure of solutions with the addition of a third component.

Keywords: aqueous solutions of non-electrolytes, aqueous ternary solutions, water–acetonitrile–dimethylformamide solutions, intermolecular interactions, solution structure, ultrasound velocity, density, adiabatic compressibility, coefficient of volumetric thermal expansion.

Синтез и исследование электрокаталитических свойств Mo_2C

Мартынова Н.А.,* Кузнецова Н.Н.

**Младший научный сотрудник*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: martynovana@my.msu.ru

Актуальной задачей на данный момент является получение дешёвых электрокатализаторов, не содержащих драгоценных металлов, например, для получения водорода. В работе синтезированы и охарактеризованы образцы $\text{Mo}_2\text{C}@C$ методами высокотемпературного отжига и искрового плазменного спекания. Апробирована методика исследования кинетики электрохимических реакции методом вращающегося дискового электрода на полученных образцах. Синтезированные материалы карбида молибдена представляют интерес для дальнейшего изучения электрокаталитических процессов: при плотности тока 10 mA/cm^2 тафелевские наклоны кривых катодного выделения водорода составили 50 mV/дек , сравнимые с литературными данными.

Ключевые слова: карбид молибдена, катодное выделение водорода, метод вращающегося дискового электрода.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ им. М.В. Ломоносова (регистрационный номер АААА-А21-121011990019-4) с использованием оборудования, приобретенного за счет средств Программы развития Московского университета.

Synthesis and study of electrocatalytic properties of Mo_2C

Martynova N.A.,* Kuznetsova N.N.

**Junior Researcher*

M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: martynovana@my.msu.ru

Current challenge is the production of low-cost, precious metal-free electrocatalysts, for hydrogen production. In this study, $\text{Mo}_2\text{C}@C$ samples were synthesized using high-temperature annealing and spark plasma sintering and characterized. A rotating disk electrode technique was used to study kinetics of the electrochemical reaction onto obtained samples. The synthesized molybdenum carbide materials are perspective for further study of electrocatalytic processes: at a current density of 10 mA/cm^2 , the Tafel slope of curve of hydrogen evolution reaction was 50 mV/dec , comparable to published data.

Keywords: molybdenum carbide, hydrogen evolution reaction, rotating disk electrode method.

Применение диизононилфталата в пластизолях

Мартынова Т.А.,* Чалов К.В., Луговой Ю.В., Долуда В.Ю.

**Студент, 2 курс магистратуры
Тверской государственной технической университет,
химико-технологический факультет, Тверь, Россия
E-mail: tschalov_k@mail.ru*

В данной работе исследовались пигментные пасты на основе диизононилфталата и их возможность использования для приготовления пластизоля. Исследовалось влияние состава пигментной пасты на качественные показатели. Была проведена оценка следующих важных показателей: вязкость, плотность, степень перетирания, а также цветовые характеристики. Приготовленные пасты сравнивались с эталонными образцами, выпускаемыми в промышленности.

Ключевые слова: диизононилфталат, пигментная паста, полимеры, пластизол, реологические свойства

Use of diisononyl phthalate in plastisols

Martynova T.A.,* Chalov K.V., Lugovoy Yu.V., Doluda V.Yu.

**Masters's student, 2th year
Tver State Technical University, Department of Chemical Engineering, Tver, Russia
E-mail: tschalov_k@mail.ru*

This study examined diisononyl phthalate-based pigment pastes and their potential for use in plastisol production. The influence of pigment paste composition on quality parameters was examined. Key parameters such as viscosity, density, grinding degree, and color characteristics were assessed. The resulting pastes were compared with industrially produced reference samples.

Keywords: diisononyl phthalate, pigment paste, polymers, plastisol, rheological properties.

Оптимизация метода синтеза перовскитного катализатора на основе $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ (M = Mn, Fe, Ni)

Матвиевич Д. В.^{1*}, Баева Г. Н.², Парамошин И. В.², Машковский И. С.²,
Стахеев А. Ю.²

*Студент

¹Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия

²Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

E-mail: dmatvievich@edu.hse.ru

Оптимальным методом синтеза перовскитных катализаторов на основе кобальтита лантана (LaCoO_3) является метод Печини, который отличается лёгкостью в применении, не требует высоких температур и даёт возможность точно регулировать итоговую стехиометрию катализатора. Основная цель данной работы заключалась в оптимизации метода Печини для получения серии перовскитных катализаторов с общей формулой $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ (M = Mn, Fe, Ni), где $x = 0.3, 0.7$ и 1 . Полученные образцы были охарактеризованы методами РФА, ПЭМ ЭДС и H_2 -ТПВ. Анализ полученных результатов позволил определить оптимальную температуру проведения синтеза Печини в зависимости от природы металла-модификатора.

Ключевые слова: Печини, перовскит, катализатор, золь-гель, структура, синтез

Optimization of the Synthesis Method for Perovskite Catalysts Based on $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ (M = Mn, Fe, Ni)

D. V. Matvievich^{1*}, G. N. Baeva², I. V. Paramoshin², I. S. Mashkovsky²,
A. Yu. Stakheev²

*Student

¹National Research University "Higher School of Economics", Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: dmatvievich@edu.hse.ru

The optimal method for synthesizing perovskite catalysts based on lanthanum cobaltite (LaCoO_3) is the Pechini method, which is easy to apply, does not require high temperatures, and allows precise control of the catalyst's stoichiometry. The main objective of this work was to optimize the Pechini method for obtaining a series of perovskite catalysts with the general formula $\text{LaCo}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_3$ (M = Mn, Fe, Ni), where $x = 0.3, 0.7$, and 1 . The obtained samples were characterized using XRD, SEM-EDS, and H_2 -TPR methods. Analysis of the obtained results allowed determining the optimal temperature for conducting the Pechini synthesis depending on the nature of the metal modifier.

Keywords: Pechini, perovskite, catalyst, sol-gel, structure, synthesis

Структура кластеров [(MeCN)·(PhCl)]_n (n=1–4) (расчеты методом теории функционала плотности)

Мисатюк Ф.С.,* Богдан Т.В., Фирсов Д.А., Абрамович А.И.

**Студент, 5 курс специалитета
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: cod.000@yandex.ru*

В настоящей работе с целью определения вероятной структуры агломератов в растворах MeCN–PhCl рассчитаны геометрия и энергии образования кластеров и (MeCN)_n·(PhCl)_n (n=1-4) – методом теории функционала плотности с функционалом B3LYP в базисе cc-pvdz, с использованием дисперсионной поправки Grimme D3. Для расчетов пользовались программным пакетом Firefly. Для модели молекул MeCN и PhCl использовали стандартные параметры программы Chemcraft.

Обнаружены тенденции к образованию смешанных кластеров, к повышению абсолютного значения удельной энергии с увеличением числа молекул в кластере, Наблюдается предпочтение взаимодействия PhCl-PhCl по сравнению с PhCl-MeCN.

Полученные данные о взаимном расположении молекул MeCN и PhCl в кластерах использованы для интерпретации концентрационных зависимостей физико-химических свойств растворов MeCN–PhCl.

Ключевые слова: кластеры, ацетонитрил, хлорбензол, DFT

Работа выполнена в рамках темы «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов» (121031300090-2).

Structure of the clusters [(MeCN)·(PhCl)]_n (n=1-4) (Density Functional Theory Calculations)

F.S. Misatyuk,* T.V. Bogdan, D.A. Firsov, A.I. Abramovich

**Student, 5th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: cod.000@yandex.ru*

In this work, to determine the probable structure of agglomerates in MeCN–PhCl solutions, the geometry and formation energies of (MeCN)_n·(PhCl)_n clusters, n=1-4, were calculated using density functional theory with the B3LYP functional and the cc-pVDZ basis set, employing Grimme's D3 dispersion correction. The Firefly software package was used for the calculations. Standard Chemcraft program parameters were used for modeling MeCN and PhCl molecules.

Trends towards the formation of mixed clusters, an increase in the absolute value of the specific energy with an increasing number of molecules in the cluster, as well as a preference for PhCl–PhCl interaction over PhCl–MeCN interaction were observed.

The obtained data on the mutual arrangement of MeCN and PhCl molecules in the clusters were used to interpret the concentration dependences of the physicochemical properties of MeCN–PhCl solutions.

Keywords: clusters, acetonitrile, chlorobenzene, DFT

Pt-ZnO/SiO₂ для неокислительного дегидрирования пропана: влияние метода синтеза на каталитические свойства

Михайлюк Я. Б.,* Каплин И. Ю.

**Студент, 3 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: mikhaylyuk.yab@gmail.com*

Исследованы катализаторы Pt-ZnO/SiO₂, синтезированные на коммерческом и биоморфном кремнезёме, полученном из рисовой шелухи. Проведены структурные, текстурные и поверхностные исследования (СЭМ-ЭДА, БЭТ, РФЭС) и каталитические испытания в реакции дегидрирования пропана при 500 °С. Катализаторы показали высокую селективность. Падение активности связано с закоксовыванием. Модификация состава может повысить устойчивость систем при сохранении высокой селективности.

Ключевые слова: дегидрирование пропана, платиновые катализаторы, метод пропитки, оксид цинка, диоксид кремния, платина.

Авторы благодарят Программу развития Московского университета за возможность анализа систем методом РФЭС. Работа выполнена в рамках государственного задания № АААА-А21-121011990019-4.

Pt-ZnO/SiO₂ for non-oxidative dehydrogenation of propane: the effect of the synthesis method on catalytic properties.

Mikhaylyuk Ya.,* Kaplin I.

**Student, 3rd year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: mikhaylyuk.yab@gmail.com*

Pt-ZnO/SiO₂ catalysts synthesized on commercial and biomorphic silica derived from rice husk were investigated. Structural, textural, and surface analyses (SEM, EDS, BET, XPS, TPR-H₂), as well as catalytic tests in propane dehydrogenation at 500 °C, were performed. The catalysts exhibited high selectivity, while the decrease in activity was attributed to coke formation. Modification of the catalyst composition may enhance stability while maintaining high selectivity.

Keywords: propane dehydrogenation, platinum catalysts, impregnation method, zinc oxide, silica, platinum.

Прямое дегидрирование этана на катализаторе Pt-CaSnO_x/γ-Al₂O₃

Мишанин И.И.,^{1*} Богдан Т.В.,^{2,1} Федосеев Т.В.,¹ Азаров К.В.,¹ Богдан В.И.¹

**Старший научный сотрудник*

¹Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: mishanin@ioc.ac.ru

Ранее исследования в области прямого дегидрирования этана показали, что катализатор на основе объемного станната кальция (CaSnO₃) при проведении реакции дезактивируется вследствие зауглероживания поверхности и потери олова (восстановлением Sn⁴⁺ до Sn⁰), что ограничивает его стабильность. Если же проводить процесс в окислительных условиях, то происходит глубокое окисление этана до оксидов углерода. Для решения этих проблем в данной работе предложена стратегия оптимизации состава и структуры катализатора путем многоступенчатого нанесения активных компонентов на носитель γ-Al₂O₃. Целью является стабилизация активных центров и подавление нежелательных процессов, что позволит повысить как конверсию этана, так и селективность получения целевого этилена.

Ключевые слова: прямое дегидрирование этана, этилен, платина, станнат кальция.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00196, <https://rscf.ru/project/24-73-00196/>.

Direct dehydrogenation of ethane over Pt-CaSnO_x/γ-Al₂O₃ catalyst

Mishanin I.I.,^{1*} Bogdan T.V.,^{2,1} Fedoseev T.V.,¹ Azarov K.V.,¹ Bogdan V.I.¹

**Senior researcher*

¹N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

²M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: mishanin@ioc.ac.ru

Previous studies of direct ethane dehydrogenation have shown that a catalyst based on bulk calcium stannate (CaSnO₃) is deactivated during the reaction due to surface carbonization and tin loss (reduction of Sn⁴⁺ to Sn⁰), which limits its stability. If the process is carried out under oxidizing conditions, ethane undergoes deep oxidation to carbon oxides. To address these issues, this study proposes a strategy for optimizing the catalyst composition and structure through multi-stage deposition of active components on a γ-Al₂O₃ support. The goal is to stabilize the active sites and suppress undesirable processes, thereby increasing both ethane conversion and selectivity for the target ethylene.

Keywords: direct ethane dehydrogenation, ethylene, platinum, calcium stannate.

Сравнение $\text{CaSnO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\text{CaSnO}_x/\text{SiO}_2$ катализаторов в прямом дегидрировании этана

Мишанин И.И.,^{1*} Богдан Т.В.,^{2,1} Федосеев Т.В.,¹ Азаров К.В.,¹ Богдан В.И.¹

**Старший научный сотрудник*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: mishanin@ioc.ac.ru

Для решения проблемы дезактивации станната кальция (CaSnO_3), в процессе прямого дегидрирования этана, в предыдущей работе была предложена стратегия нанесения активной фазы на термостабильный носитель. В настоящем исследовании проведена экспериментальная проверка данной стратегии путём сравнительного изучения каталитических свойств систем на основе двух различных носителей – $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ и SiO_2 . Результаты демонстрируют существенное влияние природы носителя на фазовый состав, морфологию и, как следствие, на каталитическое поведение модифицированного CaSnO_3 , что позволяет определить наиболее перспективный материал для дальнейшей оптимизации.

Ключевые слова: прямое дегидрирование этана, этилен, платина, станнат кальция.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-73-00196,
<https://rscf.ru/project/24-73-00196/>.*

Comparison of $\text{CaSnO}_x/\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ and $\text{CaSnO}_x/\text{SiO}_2$ catalysts in direct ethane dehydrogenation

Mishanin I.I.,^{1*} Bogdan T.V.,^{2,1} Fedoseev T.V.,¹ Azarov K.V.,¹ Bogdan V.I.¹

**Senior researcher*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: mishanin@ioc.ac.ru

To solve the problem of calcium stannate (CaSnO_3) deactivation during direct ethane dehydrogenation, a strategy of depositing the active phase on a thermally stable support was proposed in a previous work. This study experimentally validated this strategy by comparatively examining the catalytic properties of systems based on two different supports — $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ and SiO_2 . The results demonstrate a significant influence of the support nature on the phase composition, morphology, and, consequently, the catalytic behavior of modified CaSnO_3 , enabling the identification of the most promising material for further optimization.

Keywords: direct ethane dehydrogenation, ethylene, platinum, calcium stannate.

Идентификация структуры продукта присоединения диоксида углерода к флуфенамовой кислоте на основе данных спектроскопии ядерного магнитного резонанса

**Мололина А.А.,^{1*} Опарин Р.Д.¹, Белов К.В.¹, Дышин А.А.¹,
Крестьянинов М.А.¹, Киселев М.Г.¹, Ходов И.А.^{1,2}**

**Студент, 5 курс специалитет*

¹ *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

² *Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: maa@isc-ras.ru

При взаимодействии флуфенамовой кислоты (ФФК) со сверхкритическим диоксидом углерода (scCO₂), было обнаружено новое соединение, отличающееся по своим спектральным характеристикам от исходного. Что бы подтвердить и установить структуру получившегося соединения была проведена серия экспериментов в дейтерированном диметилсульфоксиде. Основываясь на полученных одно- (¹H, ¹³C) и двумерных (¹H-¹³C HSQC, ¹H-¹³C HMBC, ¹H-¹H TOCSY, ¹H-¹H NOESY) спектральных ЯМР данных, получилось установить, что в результате взаимодействия флуфенамовой кислоты и диоксида углерода на антраниловом фрагменте ФФК образуется сложный эфирный фрагмент C–O–C. Таким образом, в ходе исследования была проведена характеристика химической структуры нового соединения.

Ключевые слова: Флуфенамвая кислота, сверхкритический диоксид углерода, квантово- химические расчеты, ЯМР – спектроскопия, ИК – спектроскопия

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 22-13-00257-П.

Identification of the Structure of the Carbon Dioxide Addition Product to Flufenamic Acid Based on Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy

**Mololina A.A.,^{1*} Oparin R.D.¹, Belov K.V.¹, Dyshin A.A.¹,
Krestyaninov M.A.¹, Kiselev M.G.¹, Khodov I.A.^{1,2}**

**Student, 5th-year*

¹ *G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia*

² *N.N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics, RAS, Moscow, Russia*

E-mail: maa@isc-ras.ru

When flufenamic acid (FFA) interacted with supercritical carbon dioxide (scCO₂), a new compound was discovered that differed in its spectral characteristics from the original compound. To confirm and establish the structure of the resulting compound, a series of experiments were conducted in deuterated dimethyl sulfoxide. Based on the obtained one-dimensional (¹H, ¹³C) and two-dimensional (¹H-¹³C HSQC, ¹H-¹³C HMBC, ¹H-¹H TOCSY, ¹H-¹H NOESY) NMR spectral data, it was established that the interaction of flufenamic acid and carbon dioxide results in the formation of a C–O–C ester fragment at the anthranilate moiety of FFA. Thus, the chemical structure of the new compound was characterized during the study.

Keywords: Flufenamic acid, supercritical carbon dioxide, quantum chemical calculations, NMR spectroscopy, IR spectroscopy

Влияние условий синтеза на активность PtCo/ZSM в селективном окислении CO в присутствии водорода

Монина Т.С.,^{1*} Гараева А.Т.¹, Кротова И.Н.¹, Удалова О.В.²,
Дворяк С.В.¹, Шилина М.И.¹

**Студент*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н. Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: monina.ts.@mail.ru

В работе получены высокоэффективные катализаторы PtCo/ZSM с низким содержанием Pt для селективного окисления CO в избытке водорода (CO-PROX). Катализаторы синтезировали с использованием цеолитов разной морфологии и разных прекурсоров платины - $(\text{NH}_4)_2\text{PtCl}_6$ и полиядерного комплекса ацетата платины $\text{Pt}_9(\text{CH}_3\text{COO})_{23}$. Порядок введения металлов варьировали. По данным РФЭС, СЭМ и ИКС ДО адсорбированного CO наблюдаемый синергизм каталитического действия Co и Pt обусловлен взаимодействием металлов на поверхности и в каналах цеолита. Наибольшую эффективность в реакции CO-PROX проявляет катализатор, синтезированный на основе ацетатного комплекса платины, обеспечивающий 100% конверсию CO в температурном интервале 70–110 °C, что сравнимо с известными Pt катализаторами с большим содержанием платины.

Авторы выражают благодарность Столярову И.П., Черкашиной Н.В. за синтез ацетатного комплекса платины.

Работа выполнена при поддержке Программы развития МГУ, в рамках государственного задания МГУ (№ АААА-А21-121011590090-7)

Influence of synthesis conditions on the activity of PtCo/ZSM in the Preferential CO Oxidation in H₂-Rich Mixture

Monina T.S.,^{1*} Garaeva A.T.¹, Krotova I.N.¹, Udalova O.V.², Dvoryak S.V.¹, Shilina M.I.¹

**Student*

¹ M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

² Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia

E-mail: monina.ts.@mail.ru

This work presents highly efficient PtCo/ZSM catalysts with a low Pt content for the preferential oxidation of CO in excess hydrogen (CO-PROX). The catalysts were synthesized using zeolites of varying morphologies from different platinum precursors: $(\text{NH}_4)_2\text{PtCl}_6$ and polynuclear platinum acetate complex $\text{Pt}_9(\text{CH}_3\text{COO})_{23}$. The order of metal introduction was varied. According to the data of the XPS, SEM and DRIFT of adsorbed CO, the observed synergy of the catalytic action of Co and Pt is due to the interaction of metals on the surface and in the zeolite channels. Due to this, the 100% CO conversion in the wide temperature range from 70 to 110 °C is achieved for bimetallic catalysts from platinum acetate complex, which is comparable to the known Pt catalysts with a high platinum content.

Получение оксидов ванадия и никеля (II) для накопления энергии

Мороз Ю.Д.,^{1*} Осипов Н.И.,² Столбов Д.Н.²

**Аспирант*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
факультет наук о материалах, Москва, Россия

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

E-mail: juliya_moroz@mail.ru

В опорной статье был синтезирован только $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$ для электрохимических приложений, полученный при температурах 120 °С, 140 °С и 160 °С, мы же решили опробовать эту методику для соли никеля и сравнить электрохимические параметры. По рентгенофазовому анализу в обоих случаях были получены как искомые фазы состава $\text{M}_3\text{V}_2\text{O}_8$, так и ванадаты вида $\text{M}_2\text{V}_2\text{O}_7$, оксиды MO , а также ванадат CoV_2O_6 в случае кобальта. При использовании соли никеля было меньше примесей, рефлексии на рентгенограммах были четче, чем в случае с кобальтом. Электрохимические характеристики определяли для образцов, синтезированных при 160 °С; также были получены смешанные ванадаты никеля и кобальта. Удельная емкость ванадата никеля, измеренная по циклу заряда-разряда в трехэлектродной ячейке, составила 28 Ф/г.

Ключевые слова: ванадаты, никель, суперконденсаторы, псевдоемкость, электрохимические характеристики, удельная емкость.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер № АААА-А21-121011990019-4.

Synthesis of vanadium and nickel oxides for energy storage

Moroz Y.,^{1*} Osipov N.,² Stolbov D.²

**Graduate student*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Materials Science, Moscow, Russia

²M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: juliya_moroz@mail.ru

Only $\text{Co}_3\text{V}_2\text{O}_8$ was synthesized for electrochemical applications at temperatures of 120 °C, 140 °C, and 160 °C. We decided to apply this method to a nickel salt and compare the electrochemical parameters of the resulting samples. According to X-ray phase analysis, in both cases, along with the target $\text{M}_3\text{V}_2\text{O}_8$ phases, vanadates of the $\text{M}_2\text{V}_2\text{O}_7$ type, MO oxides, and in the case of cobalt, CoV_2O_6 vanadate were also formed. When using the nickel salt, the amount of impurities was lower, and the reflections on the X-ray diffractograms were sharper than in the case of cobalt. Electrochemical characteristics were determined for samples synthesized at 160 °C; mixed nickel-cobalt vanadates were also obtained. The specific capacitance of the nickel vanadate, measured by charge-discharge cycling in a three-electrode cell, was 28 F/g.

Keywords: vanadates, nickel, supercapacitors, pseudocapacitance, electrochemical characteristics, specific capacitance.

Порошкообразный композиционный материал на основе полиэфиркетонкетона и молотого углеродного волокна для СЛС-печати

Морозова В.С.,* Павлюкович Н.Г.

**Аспирант*

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» –
Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, Москва,
Россия*

E-mail: sector-aifm@viam.ru

Угленаполненные композиционные материалы на основе полиэфиркетонкетона обладают исключительными механическими и термическими свойствами. Сочетание кетонных и эфирных групп в полимерной матрице позволяет варьировать кристаллизацию данных композитов, что делает эти материалы идеальными кандидатами для применения в аддитивных технологиях. В работе получены порошкообразные термопластичные композиты на основе ПЭКК (серии 2 и серии 3 производства Сибур) и молотого углеродного волокна и исследованы их свойства. Полученные результаты подтверждают высокую перспективность применения угленаполненных полиэфиркетонкетонатов в качестве материалов для СЛС-печати.

Ключевые слова: композиционный материал, термопластичный материал, полиэфиркетонкетон, углеродное волокно.

Работа выполнена в рамках Соглашения № 075-11-2025-054 от «5» июня 2025 г. с Минобрнауки о предоставлении из федерального бюджета гранта в форме субсидии.

Powdered composite material based on polyetherketoneketone and milled carbon fiber for SLS printing

Morozova V.,* Pavlukovich N.

**Graduate student*

*All-Russian Scientific-Research Institute of Aviation Materials of National Research Center
«Kurchatov Institute», Moscow, Russia*

E-mail: sector-aifm@viam.ru

Carbon-filled composite materials based on polyetherketoneketone possess exceptional mechanical and thermal properties. The combination of ketone and ether groups in the polymer matrix allows for the adjustment of the crystallization of these composites, making them ideal candidates for use in additive manufacturing. This work produced powdered thermoplastic composites based on PEKK (Series 2 and Series 3 from Sibur) and milled carbon fiber and investigated their properties. The obtained results confirm the high potential of using carbon-filled polyetherketoneketones as materials for 3D printing.

Keywords: composite material, thermoplastic material, polyetherketoneketone, carbon fiber.

Карбоксилирование фенилацетилена с участием CO₂ на гетерогенных Cu, Ni – содержащих катализаторах

Мякота В.Е.,^{1,2*} Стрекалова А.А.¹

**Студент, 2 курс магистратуры*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*«МИРЭА – Российский технологический университет» РТУ МИРЭА, Москва, Россия
E-mail: leram01@list.ru*

В работе были исследованы нанесенные гетерогенные медь- и никельсодержащие катализаторы, модифицированные небольшими добавками серебра (0,3–1%), в реакции карбоксилирования фенилацетилена с участием CO₂ до фенилпропиоловой кислоты. Синтезированные образцы были проанализированы методом ИК-спектроскопией с Фурье-преобразованием. Реакцию проводили в течение 18 часов в присутствии растворителя ДМСО и основания Cs₂CO₃ при 80 °С и 4 МПа. Было обнаружено, что полученные образцы демонстрируют 100%-ю селективность образования целевой фенилпропиоловой кислоты. Также установлено, что реакция может протекать и в отсутствие катализатора.

Ключевые слова: гетерогенные катализаторы, карбоксилирование, концевые алкины, фенилацетилен, углекислый газ, фенилпропиоловая кислота

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ, проект № 24–73-00219.

Carboxylation of phenylacetylene with CO₂ on heterogeneous Cu, Ni-containing catalysts

Myakota V.,^{1,2*} Strekalova A.¹

** Master's student, 2nd year*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*MIREA – Russian Technological University, RTU MIREA, Prospekt Vernadskogo 86, Moscow, 119571, Russia*

E-mail: leram01@list.ru

Heterogeneous copper and nickel-containing catalysts modified with small silver additives (0.3 – 1%) in the carboxylation of phenylacetylene with CO₂ to phenylpropionic acid were investigated. The synthesized samples were analyzed by Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). The reaction was carried out for 18 hours in the presence of DMSO as a solvent and Cs₂CO₃ as a base at 80 °C and 4 MPa. It was found that the obtained samples demonstrate 100% selectivity for main product. It has also been established that the reaction can occur in the absence of a catalyst.

Keywords: Heterogeneous catalysts, carboxylation, terminal alkynes, phenylacetylene, carbon dioxide, phenylpropionic acid.

Применимость TD-DFT для расчета спектральных характеристик нейтральной формы хромофора зеленого флуоресцентного белка

Никитин К.Ю.,* Щербинин А.В.

**Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: kirill.iu.nikitin@chemistry.msu.ru*

В работе проведено сравнительное исследование характеристик одно- и двухфотонного поглощения $S_0 \rightarrow S_1$ нейтральной формы хромофора зеленого флуоресцентного белка в газовой фазе методами нестационарной теории функционала плотности (TD-DFT) с использованием семейства функционалов LC-BLYP(μ) с коррекцией на дальних расстояниях и двухэкспонентного базисного набора с добавлением диффузных функций на некоторых атомах. Показано, что не существует единого значения параметра смешивания μ , при котором удавалось бы добиться совпадения сразу нескольких спектральных характеристик (энергии возбуждения и силы одно- и двухфотонного поглощения) с эталонными литературными данными.

Ключевые слова: однофотонное поглощение, двухфотонное поглощение, нейтральная форма хромофора зеленого флуоресцентного белка, нестационарная теория функционала плотности.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300176-3, с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова, а также вычислительного кластера RSC Tornado лаборатории квантовой фотодинамики, закупленного по программе развития МГУ имени М.В. Ломоносова.

Applicability of TD-DFT to the calculation of spectral characteristics of the neutral form of the green fluorescent protein chromophore

Nikitin K.Yu.,* Scherbinin A.V.

**Student, 4-th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: kirill.iu.nikitin@chemistry.msu.ru*

This paper presents a comparative study of the characteristics of one- and two-photon absorption $S_0 \rightarrow S_1$ of the neutral form of the green fluorescent protein chromophore in the gas phase using time-dependent density functional theory (TD-DFT) methods. The LC-BLYP(μ) family of functionals with long-range correction and a double-zeta basis set with the addition of diffuse functions on some atoms is used. It is shown that there is no single value of the mixing parameter μ that would allow several spectral characteristics (excitation energy and strength of one- and two-photon absorption) to coincide with the reference literature data.

Keywords: one-photon absorption, two-photon absorption, neutral form of the green fluorescent protein chromophore, time-dependent density functional theory.

Получение и теоретическая оценка биологической активности сложных эфиров 3,5-динитробензойной кислоты

Норкина Д.Д.,* Путис С.М.

**Студент*

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), инженерно-технологический факультет, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: sergey_mi79@mail.ru*

На основании 3,5-динитробензойной кислоты были получены сложные эфиры методом кислотно-катализируемой этерификации с выходом от 32 до 90 %. Для полученных эфиров была выполнена оценка биологической активности с помощью программы PASS Online, а также молекулярное моделирование методом «молекулярного докинга» с использованием программы «SwissDock». Было выявлено, что синтезированные эфиры обладают выраженной противогрибковой активностью.

Ключевые слова: 3,5-динитробензойная кислота, сложные эфиры 3,5-динитробензойной кислоты, биологическая активность, этерификация.

The preparation and theoretical evaluation of the biological activity of 3,5-dinitrobenzoic acid esters

Norkina D.D.,* Putis S. M.

**Student*

*Saint-Petersburg State Institute of Technology, department of Engineering and Technology, Saint-Petersburg, Russia
E-mail: sergey_mi79@mail.ru*

Abstract: Based on 3,5-dinitrobenzoic acid, esters were obtained by acid-catalyzed esterification with yields from 32 to 90 %. The resulting esters were evaluated for biological activity using the PASS Online program, and molecular modeling using molecular docking was performed using the SwissDock program. The synthesized esters were found to possess pronounced antifungal activity.

Keywords: 3,5-dinitrobenzoic acid, c esters of 3,5-dinitrobenzoic acid, biological activity, etherification.

Пиразинопорфирины с электроноакцепторными группами как фотокатализаторы реакции окисления сульфидов

Овчинников Г.А.,^{1*} Шремзер Е.С.², Бирин К.П.², Цивадзе А.Ю.²

**Студент*

¹*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия*

²*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук,
E-mail: glalovchinnikov@edu.hse.ru*

Фотокатализ – одна из интенсивно развивающихся и актуальных областей химии. Порфирины представляют собой перспективную платформу для создания фотокатализаторов, ввиду их способности генерировать активные формы кислорода. В работе был синтезирован свободный пиразинопорфирин с пентафторфенильными заместителями, а также соответствующий комплекс палладия(II) с высокими выходами. Фотокатализаторы показали высокую активность и селективность до 99% в реакции окисления тиоанизола при облучении лампой синего света малой мощности (3 Вт). Реакция проводилась в уксусной кислоте, экологически безопасном растворителе, при этом минимальная загрузка катализатора составила $2,5 \cdot 10^{-4}$ мол.%, а наибольший TON = 280 000.

Ключевые слова: фотокатализаторы, фотоокисление сульфидов, порфирины, пиразинопорфирины, зеленая химия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Pyrazinoporphyrins with electron-withdrawing groups as photocatalysts for sulfide oxidation

Ovchinnikov G.^{1*} Shremzer E.², Birin K.², Tsivadze A.²

**Student*

¹*National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia*

²*Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*

E-mail: glalovchinnikov@edu.hse.ru

Photocatalysis is one of the intensively developing and relevant fields of chemistry. Porphyrins represent a promising platform for developing photocatalysts, due to their ability to generate reactive oxygen species. In this work, a free pyrazoporphyrin with pentafluorophenyl substituents, as well as the corresponding palladium(II) complex were synthesized with high yields. The photocatalysts demonstrated high activity and selectivity up to 99% in the oxidation of thioanisole under irradiation with a low-power (3 W) blue light lamp. The reaction was carried out in acetic acid, an environmentally friendly solvent, with a minimum catalyst loading of $2.5 \cdot 10^{-4}$ mol.%, and the maximum TON of 280,000.

Keywords: photocatalysts, photooxidation sulfides, porphyrins, pyrazinoporphyrins, green chemistry.

Фотоиндуцированный перенос электрона снижает яркость флуоресцентной РНК

Одинцов К.В.,* Домрачева Т.М.

**Аспирант 3 г.о.*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: konstantin.odintsov@chemistry.msu.ru*

Для кластерной модели флуоресцентной РНК Pepper с набором флуорогенов HBC530, HBC508 и HBC485 с различным квантовым выходом флуоресценции рассчитан спектр состояний и определены потенциальные доноры электрона в составе РНК. Гуанин G41 выделен, как наиболее вероятный донор электрона. Для набора моделей HBC-G41 оценены скорости фотоиндуцированного переноса электрона и радиационного распада. Сравнение расчётных констант скоростей с экспериментами данными подтверждает, что перенос электрона с гуанина G41 на HBC является каналом безызлучательного распада, снижающим яркость флуоресценции.

Ключевые слова: флуоресцентная РНК, флуороген, перенос электрона, теория Маркуса, радиационный распад

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер 121031300176-3.

Photoinduced Electron Transfer Reduces Brightness of Fluorescent RNA

Odintsov K.V.,* Domratcheva T.M.

**Graduate student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: konstantin.odintsov@chemistry.msu.ru*

For cluster models of fluorescent RNA Pepper with fluorogens HBC530, HBC508, and HBC485 with different fluorescence quantum yields, the spectrum of excited states is calculated and potential electron donors within the RNA fragment are identified. Guanine G41 is determined as the most potent electron donor. For a set of HBC-G41 models, the rates of photoinduced electron transfer and radiation decay are estimated. A comparison of the calculated rate constants with experimental data confirms that electron transfer from guanine G41 to HBC is a nonradiative decay channel that reduces the fluorescence brightness.

Keywords: fluorescent RNA, fluorogen, electron transfer, Marcus theory, radiative decay.

Получение контрастирующих агентов для энергочувствительной компьютерной томографии на основе оксидов лантанидов

Осипов Н.И.,* Сулова Е.В., Шелков Г.А

**Инженер*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: tgbhu@mail.ru*

В ходе данной работы были получены композитные наночастицы оксидов лантана и гадолиния со структурой типа ядро-оболочка. Композиты получали путем послойного нанесения оболочки из оксида кремния и/или полиэтиленгликоля на частицы оксидов лантана и гадолиния, выступавших в качестве ядер. Полученные материалы были охарактеризованы методами СЭМ, ПЭМ, ИК-спектроскопии. Для наночастиц на основе оксида гадолиния провели исследование их цитотоксичности.

Ключевые слова: наночастицы, контрастирующие агенты, лантаниды, цитотоксичность

Работа поддержана Российским научным фондом (проект 22-15-00072-П)

Preparation of contrast agents based on lanthanides oxides for photon counting computed tomography

Osipov N.I.,* Suslova E.V., Chelkov G.A.

**Engineer*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: tgbhu@mail.ru*

In this study, composite nanoparticles of lanthanum and gadolinium oxides with a core-shell structure were obtained. The composite materials were assembled layer-by-layer using lanthanum and gadolinium oxide particles as core and silicon oxide and/or polyethylene glycol as outer layers. The resulting materials were characterized using scanning electron microscopy, TEM, and IR spectroscopy. A cytotoxicity study was conducted on the gadolinium oxide-based nanoparticles.

Keywords: nanoparticles, contrast agent, lanthanides, cytotoxicity

Гидролиз растительных полисахаридов с использованием сульфированного сверхсшитого полистирола

Панскова Л.Д.,* Гаврилова Е.П., Манаенков О.В., Кислица О.В., Сильман М.Г.

*Студент, 1 курс магистратуры
Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия
E-mail: panskoval@gmail.com*

В данном исследовании для гидролиза растительных полисахаридов (инулина, ксилана, целлюлозы) в качестве твёрдого кислотного катализатора был предложен сульфированный сверхсшитый полистирол (SMN270). После оптимизации условий гидролиза полисахаридов были получены выходы соответствующих моносахаридов: фруктозы 82.8 %; ксилозы 60.1 %; глюкозы 14.9 %. Показано, что катализатор SMN270 может стать эффективной заменой традиционных катализаторов гидролиза (минеральных кислот) компонентов растительной биомассы.

Ключевые слова: целлюлоза, инулин, ксилан, гидролиз, сверхсшитый полистирол, твёрдый кислотный катализатор.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (25-79-20018).

Hydrolysis of plant polysaccharides using sulfonated hypercrosslinked polystyrene

Panskova L.D.,* Gavrilova E.P., Manaenkov O.V., Kislitsa O.V., Sulman M.G.

**Masters's student
Tver State Technical University, Department of Biotechnology, Chemistry and Standardization
Tver, Russia
E-mail: panskoval@gmail.com*

In this study, sulfonated hypercrosslinked polystyrene (SMN270) was proposed as a solid acid catalyst for the hydrolysis of plant polysaccharides (inulin, xylan, and cellulose). After optimization of the polysaccharide hydrolysis conditions, the following yields of the corresponding monosaccharides were obtained: 82.8 % fructose; 60.1 % xylose; and 14.9 % glucose. It was demonstrated that the SMN270 catalyst can effectively replace traditional catalysts for the hydrolysis (mineral acids) of plant biomass components.

Keywords: cellulose, inulin, xylan, hydrolysis, hypercrosslinked polystyrene, solid acid catalyst.

Адсорбционно-каталитическое удаление ЛОС в присутствии озона на ионообменном Co-Beta

Парамошин И.В.,^{1,2*} Бокарев Д.А.,¹ Баева Г.Н.,¹ Стахеев А.Ю.¹

**Студент, 4 курс*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

E-mail: Paramochin@mail.ru

Изучена возможность проведения комбинированного процесса адсорбция/окисление на Co-содержащем цеолите типа BEA (0.6%CoBeta) при низких температурах (30-50°C) в присутствии озона. На примере о-ксилола показано, что такая система обладает значительной адсорбционной емкостью (290-300 мкмоль/г), а адсорбированный экотоксикант может быть эффективно окислен озоном в уже при комнатной температуре без его десорбции.

Ключевые слова: адсорбционно-каталитическое окисление, озон, кобальт, цеолитные катализаторы.

Adsorption-catalytic removal of VOCs in the presence of ozone on ion-exchange Co-Beta

Paramoshin I.V.,^{1,2*} Bokarev D.A.,¹ Baeva G.N.,¹ Stakheev A.Yu.¹

**Student 4th year*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia*

E-mail: Paramochin@mail.ru

The feasibility of a combined adsorption/oxidation process on a Co-containing BEA zeolite (0.6% CoBeta) at low temperatures (30-50°C) in the presence of ozone was studied. As it was demonstrated for o-xylene this catalytic system possesses significant adsorption capacity (290-300 μmol/g), and the adsorbed ecotoxicant can be effectively oxidized by ozone at room temperature without desorption.

Keywords: adsorption-catalytic oxidation, ozone, cobalt, zeolite catalysts.

Получение высокоактивных цеолитов для глубокой переработки сырья различного типа

Перепечаева В.Б.,* Кузнецов П.С., Дементьев К.И.

**Старший лаборант (студент, 2 курс магистратуры)*

*Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: vperepechaeva@ips.ac.ru

Исследовано влияние комбинированной обработки цеолита типа Бета, включающей механический размол и последующую кислотную или щелочную обработку, на его каталитическую активность в реакциях крекинга. Наибольшую активность в крекинге вакуумного дистиллята проявил цеолит после размола. В случае конверсии рапсового масла наилучшие показатели активности были достигнуты на цеолите после размола и обработки кислотой: выход газовых продуктов составил 30.0 %; образование кокса было наименьшим – 3.9 %. Щелочная обработка была не эффективна.

Ключевые слова: цеолиты, механический размол, наноцеолит, каталитический крекинг, каталитическая активность, постобработка

Работа выполнена в рамках государственного задания ИНХС РАН.

Production of Highly Active Zeolites for Catalytic Cracking of Hydrocarbon Feedstock and Rapeseed Oil

Perepechaeva V.,* Kuznetsov P., Dement'ev K.

**Senior laboratory assistant (*Masters's student, 2nd year)*

A. V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: vperepechaeva@ips.ac.ru

The influence of a combined upgrade for Beta-type zeolites through ball milling and subsequent acid or alkaline treatment on their catalytic activity was investigated. The zeolite showed the highest catalytic activity after milling in cracking of vacuum gas oil. Zeolite after milling and acid treatment: a gas yield of 30.0 %; coke formation at 3.9 %. Alkaline treatment of zeolite was ineffective.

Keywords: zeolites, ball milling, nanozeolite, catalytic cracking, catalytic activity, zeolites upgrading

Адсорбционно-каталитическая очистка воды от диклофенака: влияние природы углеродного материала

Песоцкий М.Д.,* Локтева Е.С., Харланов А.Н.

**Студент, 5 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: mpesotskiy2003@gmail.com*

Три углеродных материала, углеродные нанотрубки (УНТ), наночешуйки (УНЧ) и активированный уголь из фурфурола (ФАС), тестировали при 30 °С в качестве адсорбентов для очистки воды от диклофенака (ДКФ). Проверены также каталитические свойства материалов в гидродеchlorировании ДКФ в присутствии H₂ в реакторе периодического действия при 30 °С. Адсорбционная эффективность снижается в ряду ФАС>УНЧ>УНТ, но УНТ за счет присутствия кобальта проявляет каталитические свойства, которые не характерны для других углеродных материалов.

Ключевые слова: диклофенак, гидродеchlorирование, адсорбция, углеродные нанотрубки, кобальт, углеродные наночешуйки, активированный уголь.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственной программы АААА-А21-121011990019-4 «Физикохимия поверхности, адсорбция и катализ». Авторы выражают благодарность Программе развития МГУ.

Adsorption-catalytic water purification from diclofenac: The influence of the nature of the carbon material

Pesotskiy M.D.,* Lokteva E.S., Kharlanov A.N.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: mpesotskiy2003@gmail.com*

Three carbon materials, carbon nanotubes (CNT), nanoflakes (CNF), and activated carbon from furfural (ACF), were tested as adsorbents for water purification from diclofenac (DCF) at 30°C. The catalytic properties of the materials in the hydrodechlorination of DCF at 30 °C in the presence of H₂ in a batch reactor were also examined. The adsorption efficiency decreases in the order ACF > CNF > CNT, but CNT, due to the presence of cobalt, exhibits catalytic properties that are not characteristic of other carbon materials.

Keywords: diclofenac, hydrodechlorination, adsorption, carbon nanotubes, cobalt, carbon nanoflakes, activated carbon.

Исследование эффективных условий каталитического окисления D-глюкозы

Петрова А.И.,* Цветков Д.Ю., Лакина Н.В., Долуда В.Ю., Сульман М.Г.

**Студент*

Тверской государственной технической университет, Тверь, Россия

E-mail: arinapetrova989@gmail.com

Проведено исследование процесса гетерогенного окисления D-глюкозы до глюконовой кислоты в присутствии нанесенных платиновых катализаторов 3 % Pt/Al₂O₃ и 3 % Pt/SiO₂. Рассмотрено влияние варьирования температуры на каталитическую активность, проведен сравнительный анализ показателей конверсии субстрата и селективности по глюконовой кислоте в зависимости от природы носителя. В ходе экспериментов осуществлена оценка изменения pH реакционной среды, что позволило выявить ключевые закономерности протекания реакции в условиях постепенного накопления органической кислоты. Полученные результаты позволяют определить оптимальные технологические параметры и выбрать наиболее эффективную каталитическую систему для получения производных глюкозы.

Ключевые слова: D-глюкоза, окисление, гетерогенный катализ, глюконовая кислота, платиновые катализаторы, селективность, конверсия.

Study of the effective conditions for catalytic oxidation of D-glucose

A.I. Petrova,* D.Yu. Tsvetkov, N.V. Lakina, V.Yu. Doluda, M.G. Sulman

**Student*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: arinapetrova989@gmail.com

The process of heterogeneous oxidation of D-glucose to gluconic acid in the presence of 3 % Pt/Al₂O₃ and 3 % Pt/SiO₂ deposited platinum catalysts was studied. The effect of temperature variation on the catalytic activity was considered, a comparative analysis of the substrate conversion rates and selectivity for gluconic acid depending on the nature of the carrier was carried out. During the experiments, the pH change of the reaction medium was estimated, which allowed to identify the key patterns of the reaction course under conditions of gradual accumulation of organic acid. The obtained results allow us to determine the optimal technological parameters and select the most effective catalytic system for producing glucose derivatives.

Keywords: D-glucose, oxidation, heterogeneous catalysis, gluconic acid, platinum catalysts, selectivity, conversion.

Синергизм церия и платины в окислении СО на Pt-Ce-модифицированных цеолитах ZSM-5

Петрова С.А.,^{1*} Кротова И.Н.¹, Удалова О.В.², Шилина М.И.¹

**Студент*

¹*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

²*Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н. Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия*

E-mail: spoykk@mail.ru

В работе разработан биметаллический катализатор окисления СО с малым содержанием Pt 0.2 % масс. на основе цеолита ZSM-5, модифицированного церием и платиной. Катализатор синтезировали методом последовательной пропитки, в ходе синтеза варьировали порядок введения металлов и температуру восстановления в водород. В зависимости от условий синтеза изменяется электронное состояние и дисперсность платины, что влияет на каталитическую активность.

Ключевые слова: катализ, окисление, монооксид углерода, цеолит ZSM-5, платина, церий.

Работа выполнена при поддержке Программы развития МГУ

Synergistic effect of the catalytic action of platina and cerium in oxidation of carbon monoxide on modified Pt-Ce/ZSM-5 zeolites

Petrova S.A.,^{1*} Krotova I.N.¹, Udalova O.V.², Shilina M.I.¹

**Student*

¹*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

²*Semenov Federal Research Center for Chemical Physics, Russian Academy of Sciences,
Moscow, Russia*

E-mail: spoykk@mail.ru

A bimetallic CO oxidation catalyst with a low content of 0.2 % Pt by weight has been developed based on ZSM-5 zeolite modified with cerium and platinum. The catalyst was synthesized by impregnation, during the synthesis the order of introduction of metals and the reduction temperature were varied. Depending on the synthesis conditions, the electronic state of platinum changes, which affects the catalytic activity.

Keywords: catalysis, CO oxidation, zeolites, ZSM-5, platinum, cerium.

Моделирование и анализ физико-химических и электронных свойств заполненных углеродных нанотрубок на основе системы Te@УНТ

Петрова С.С.,* Квашнин Д.Г.

**Младший научный сотрудник, аспирант*

Институт биохимической физики имени Н.М. Эмануэля Российской академии наук,

Москва, Россия

E-mail: sofi.belim@gmail.com

В работе был проведен анализ развития исследований в области заполненных углеродных нанотрубок, выполнено моделирование и оценка стабильности структур, состоящих из одностенных углеродных нанотрубок разных диаметров (8 - 11 Å) и хиральностей с размещенными внутри стержнями теллура. Расчеты проводились с использованием метода DFT в программном комплексе SIESTA. В ходе работы проведена оптимизация гибридной структуры и отдельных компонентов (УНТ и стержней Te), для которых были рассчитаны зависимости энергии от волнового вектора. На основе анализа зонной структуры была проведена оценка влияния стержней Te на электронную структуру УНТ. Результаты показали изменение плотности электронного состояния, при включении стержней теллура внутрь одностенных УНТ.

Ключевые слова: наноматериалы, одностенные углеродные нанотрубки, теллур, атомное моделирование, электронные свойства, DFT.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (грант № 25-73-20094, <https://rscf.ru/project/25-73-20094/>)

Modeling and analysis of the physical-chemical and electronic properties of filled carbon nanotubes based on the Te@CNT system

Petrova S.,* Kvashnin D.

**Junior researcher, Graduate student*

N.M. Emanuel Institute of Biochemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: sofi.belim@gmail.com

The work analyzed the development of research in the field of filled carbon nanotubes, performed modeling and stability assessment of structures consisting of single-walled carbon nanotubes of different diameters (8 – 11 Å) and chiralities with placed inside the rods of tellurium. The calculations were performed using the DFT method in the SIESTA software package. During the work, the hybrid structure and individual components (CNTs and Te rods) were optimized, and the energy dependence on the wave vector was calculated. Based on the analysis of the band structure, the influence of the Te rods on the electronic structure of the CNTs was evaluated. The results showed a change in the density of the electronic state when the Te rods were included.

Keywords: nanomaterials, single-walled carbon nanotubes, tellurium, atomic modeling, electronic properties, DFT.

Возникновение двойного электрического слоя в системе NaCl-CaSO₄-H₂O и его влияние на результаты аналитического контроля процесса кристаллизации гипса кондуктометрическим методом

Поликуров П.И.,* Почиталкина И.А.

**Студент*

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
факультет ТНВиВМ, Москва, Россия
E-mail: p.polikurov@mail.ru*

Исследован процесс кристаллизации гипса в системе NaCl-CaSO₄-H₂O различной концентрацией хлорида натрия в изотермических условиях при постоянном перемешивании. Аналитический контроль осуществлялся с помощью методов комплексонометрии и кондуктометрии. Получены кинетические кривые с концентрацией NaCl 0 и 300 г/л при параллельном измерении электропроводности и концентрации ионов Ca²⁺ и кривые с концентрацией NaCl 5,85; 20 и 40 г/л с измерением только электропроводности. Показано влияние концентрации хлорида натрия на характер кинетических зависимостей и условия возникновения двойного электрического слоя.

Ключевые слова: двойной электрический слой, кристаллизация, гипс, кинетика, кондуктометрия, титриметрия.

The appearance of a double electric layer in the NaCl-CaSO₄-H₂O system and its effect on the results of analytical control of the gypsum crystallization process by the conductometric method

Polikurov P.I.,* Pochitalkina I.A.

**Student*

*D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Faculty of Inorganic Substances and High-Temperature Materials, Moscow, Russia
E-mail: p.polikurov@mail.ru*

The process of gypsum crystallization in the NaCl-CaSO₄-H₂O system with different concentrations of sodium chloride under isothermal conditions with constant stirring is investigated. Analytical control was carried out using the methods of complexometry and conductometry. Kinetic curves with NaCl concentrations of 0 and 300 g/l were obtained with parallel measurements of electrical conductivity and Ca²⁺ ion concentrations, and curves with NaCl concentrations of 5.85; 20 and 40 g/l with measurements of electrical conductivity only. The effect of the concentration of sodium chloride on the nature of kinetic dependences and the conditions for the formation of a double electric layer is shown.

Keywords: double electric layer, crystallization, gypsum, kinetics, conductometry, titrimetry.

Каталитическое гидрирование гидропероксида кумола с получением α -кумилового спирта при комнатной температуре и атмосферном давлении

Попова Д.Д.,^{1*} Редина Е.А.²

**Студент, I курс магистратуры*

¹ РТУ МИРЭА, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия

E-mail: d-d-popova@mail.ru

В работе предложен способ получения α -кумилового спирта путем каталитического гидрирования гидропероксида кумола при комнатной температуре и атмосферном давлении, используя доступный низкопроцентный катализатор 0,25% Pt/SiO₂. Этот катализатор характеризуется исключительно высокой активностью (TOF = 6,52 с⁻¹) и селективностью (> 99%). Достигнутый показатель активности катализатора 0,25% Pt/SiO₂ почти в пять раз превышает значение TOF, зафиксированное для коммерческого катализатора 1% Pd/AC, и является самым высоким показателем, зарегистрированным в патентах и публикациях на сегодняшний день. Разработанный метод синтеза α -кумилового спирта продемонстрировал превосходную масштабируемость, что позволяет получать α -кумилловый спирт высокой чистоты, как минимум, в граммовых количествах при комнатной температуре и атмосферном давлении.

Ключевые слова: гетерогенные катализаторы, каталитическое гидрирование, гидропероксид кумола, кумилловый спирт.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, грант РНФ № 24-73-10149

Catalytic hydrogenation of cumene hydroperoxide to α -cumyl alcohol at room temperature and atmospheric pressure

Popova D.D.,^{1*} Redina E.A.¹

**Masters's student*

¹Russian Technological University MIREA, M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies, Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: d-d-popova@mail.ru

In this work we propose an efficient method for producing α -cumyl alcohol via catalytic hydrogenation of cumene hydroperoxide at room temperature and atmospheric pressure using an available low-loaded 0.25% Pt/SiO₂ catalyst. This catalyst is characterized by exceptionally high activity (TOF = 6.52 s⁻¹) and selectivity (> 99%). The achieved activity of 0.25% Pt/SiO₂ catalyst is almost five times higher than the TOF value obtained for the commercial 1% Pd/AC catalyst and is the highest one reported in patents and publications to date. The developed method for the synthesis of α -cumyl alcohol has demonstrated excellent scalability, enabling the production of high-purity α -cumyl alcohol in at least gram quantities at room temperature and atmospheric pressure.

Keywords: heterogeneous catalysts, catalytic hydrogenation, cumyl hydroperoxide, α -cumyl alcohol

Исследование ассоциации молекул N,N-диметилформаида в водных растворах методом молекулярной динамики

Пронкевич С.А.,* Фирсов Д.А., Богдан Т.В., Абрамович А.И.

**Студент, 1 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: sofia40542@rambler.ru

Проведено моделирование водных растворов ДМФА в области концентраций ДМФА 5 – 50 мол %. с шагом 5 мол % методом молекулярной динамики. Для моделирования использовался пакет программ GROMACS. Размер модельной ячейки 5×5×5 нм с периодическими граничными условиями. Был использован потенциал OPLSAA для ДМФА и TIP4P для воды, давление 1 атм и температура 298К. Протокол расчёта включал: 1) этап уравнивания системы продолжительностью 5 нс с шагом интегрирования 1 фс, 2) этап записи траектории продолжительностью 5 нс с шагом интегрирования 1 фс, 3) этап записи траектории продолжительностью 10 нс с шагом интегрирования 2 фс. В ходе анализа траекторий нами были построены радиальные функции распределения для расстояний N···N, N···O, O···O и др., из которых видно, что ассоциация ДМФА протекает несколькими способами, причём, в зависимости от концентрации ДМФА меняется соотношение различных типов ассоциатов. Нами охарактеризованы геометрические конфигурации получившихся димеров ДМФА.

Ключевые слова: водные растворы, ДМФА, молекулярная динамика.

Работа выполнена в рамках темы «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов» (121031300090-2).

A study of the association of N,N-dimethylformamide molecules in aqueous solutions using molecular dynamics

Pronkevich S.A.,* Firsov D.A., Bogdan T.V., Abramovich A.I.

**Student*

M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

E-mail: sofia40542@rambler.ru

Aqueous DMF solutions were simulated in the DMF concentration range of 5–50 mol % with a step size of 5 mol % using the molecular dynamics method. The GROMACS software package was used for the simulation. The model cell size was 5×5×5 nm with periodic boundary conditions. The OPLSAA potential for DMF and TIP4P for water, a pressure of 1 atm, and a temperature of 298 K were used. The calculation protocol included: 1) 5 ns equilibration step with an integration step of 1 fs, 2) 5 ns trajectory recording step with an integration step of 1 fs, and 3) 10 ns trajectory recording step with an integration step of 2 fs. During the trajectory analysis, we constructed radial distribution functions for the N···N, N···O, O···O, and other distances, revealing that DMF association occurs in several ways, with the ratio of different types of associates changing depending on the DMF concentration. We characterized the geometric configurations of the resulting DMF dimers.

Keywords: aqueous solutions, DMFA, molecular dynamics

Тандемный синтез замещенных олефинов в присутствии PdCu биметаллического катализатора

Рассолов А.В.,* Патиль Е.Д., Баева Г.Н., Стахеев А.Ю.

**Старший научный сотрудник*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия
E-mail: rav@ioc.ac.ru*

Показана принципиальная возможность селективного синтеза цис- и транс-стильбена в условиях тандемного процесса, включающего в себя последовательное проведение кросс-сочетания Соногаширы и жидкофазного гидрирования полученного интернального алкина в присутствии биметаллического PdCu катализатора. Установлено, что ключевое влияние на ход каждой стадии процесса оказывает природа растворителя и соотношение исходных реагентов. Оптимальные каталитические характеристики получены при использовании N,N-диметилацетамида в качестве растворителя и при соотношении PhI:PhA = 1:1.

Ключевые слова: тандемный катализ, кросс-сочетание Соногаширы, селективное гидрирование, синтез олефинов, PdCu.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-73-00079).

Substituted olefins tandem synthesis in the presence of PdCu bimetallic catalyst

Rassolov A.V.,* Patil E.D., Baeva G.N., Stakheev A.Yu.

**Senior researcher*

*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
E-mail: rav@ioc.ac.ru*

The fundamental feasibility of selective cis- and trans-stilbene synthesis using a tandem process involving the sequential Sonogashira cross-coupling and liquid-phase hydrogenation of the resulting internal alkyne in the presence of a bimetallic PdCu catalyst is demonstrated. The nature of the solvent and the ratio of the starting reactants are found to have a key influence on the course of each step of the process. Optimal catalytic performance was achieved using N,N-dimethylacetamide as the solvent and a PhI:PhA ratio of 1:1.

Keywords: tandem catalysis, Sonogashira cross-coupling, selective hydrogenation, olefin synthesis, PdCu.

Сорбционные свойства наноцеллюлозы, модифицированной функциональными группами

Репина Н.Д.*

**Аспирант*

*Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия
E-mail: natali218059@gmail.com*

Содержание лития в пластовых водах отечественных месторождений достигает 40–380 мг/дм³, что делает актуальной разработку сорбентов, работоспособных в условиях высокой солёности и конкурирующих катионов. В работе экспериментально показано, что эффективность извлечения ионов лития определяется совместным вкладом химической природы сорбционно-активных центров на поверхности наноцеллюлозы и их транспортной доступности. При одинаковых условиях сорбции фосфорилированная целлюлоза сорбирует до 96,0%, тогда как целлюлозы, модифицированные карбоксильными и сульфатными группами, проявляют умеренную сорбцию (44,44% и 38,65% соответственно). Также показана работоспособность сорбентов при циклическом использовании и сохранение значительной доли ёмкости после нескольких регенераций.

Ключевые слова: биосорбция металлов, наноцеллюлоза, функциональные группы, пластовая вода, литий

Adsorption properties of nanocellulose modified with functional groups

Repina N.*

**Graduate student*

*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia
E-mail: natali218059@gmail.com*

The lithium content in produced waters from domestic fields reaches 40–380 mg/dm³, making it essential to develop sorbents that remain effective under high salinity and in the presence of competing cations. This study experimentally demonstrates that the efficiency of lithium-ion recovery is governed by the combined contribution of the chemical nature of sorption-active sites on the nanocellulose surface and their transport accessibility. Under identical sorption conditions, phosphorylated cellulose achieves up to 96.0% uptake, whereas celluloses modified with carboxyl and sulfate groups exhibit only moderate sorption (44.44% and 38.65%, respectively). The sorbents also show viable performance under cyclic operation, retaining a substantial fraction of their capacity after several regeneration cycles.

Keywords: biosorption of metals, nanocellulose, functional groups, produced water, lithium

Прогнозирование распределения размеров металлических и фармакологических субмикронных частиц на основе нейросетей

**Ровенко В.В.,* Семенов Т.А., Епифанов Е.О., Мишаков Г.В., Минаев Н.В.,
Гарматина А.А., Мареев Е.И.**

**Младший научный сотрудник*

*Институт Фотонных Технологий, Курчатовский Комплекс Кристаллография и Фотоника, Национальный исследовательский центр «Курчатовский Институт»,
Москва, Россия*

E-mail: rovenko.vladimir@physics.msu.ru

Предложен и реализован метод определения распределения субмикронных частиц по размерам на основе обучения сверточной нейронной сети на данных о светорассеивающих индикатрисах и экстинкции. Обучение проводилось на синтезированных матрицах оптического отклика для монодисперсных частиц золота и ибупрофена размером от 1 до 4000 нм, рассчитанных в рамках теории Ми. Нейросетевая модель учитывает нелинейные зависимости между оптическими характеристиками и параметрами распределения, что обеспечивает точное (погрешность <30%) и быстрое (~1 с) определение характеристик частиц, превосходя по точности (приблизительно на 10%) традиционные методы ручной обработки.

Ключевые слова: теория Ми, субмикронные частицы, светорассеяние, экстинкция, индикатриса рассеяния, машинное обучение

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 23-79-10188.

Prediction of the size distribution of metal and pharmaceutical submicron particles based on neural networks

**Rovenko V.V.,* Semenov T.A., Epifanov E.O., Mishakov G.V., Minaev N.V.,
Garmatina A.A., Mareev E.I.**

**Junior researcher*

Institute of Photonic Technologies, Kurchatov Complex of Crystallography and Photonics, National Research Center Kurchatov Institute, Moscow, Russia

E-mail: rovenko.vladimir@physics.msu.ru

A method has been developed and used to determine the distribution of submicron particles by A method for determining the size distribution of submicron particles based on training a convolutional neural network on light-scattering indicatrix and extinction data has been proposed and implemented. The training was performed on synthesized optical response matrices for monodisperse gold and ibuprofen particles ranging in size from 1 to 4000 nm, calculated using Mie theory. The neural network model accounts for the nonlinear relationships between optical characteristics and distribution parameters, enabling accurate (error <30%) and rapid (~1 s) determination of particle characteristics, surpassing traditional manual processing methods in accuracy by approximately 10%.

Keywords: Mi theory, submicron particles, light scattering, extinction, scattering indicatrix, machine learning.

Физико-химическое превращение станната кальция при конверсии 1,4-диоксана в сверхкритических условиях

Саварец А.Р.^{1*}, Богдан Т.В.^{1,2}, Коклин А.Е.¹, Мащенко Н.В.¹, Богдан В. И.^{1,2}

**Младший научный сотрудник, аспирант*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия
E-mail: alekesander.savaretz@yandex.ru*

В настоящей работе проведена конверсия диоксана на аморфном станнате кальция при 400 и 350 °С, 120 атм в водной и безводной среде. Основной путь конверсии – изомеризация в 2-метил-1,3-диоксолан, термическое разложение до этанала и продукты его превращения в ходе альдольно-кетоновой конденсации, восстановления и изомеризации. Изменение среды с безводной на водную повышает конверсию по этилацетату, аллиловому спирту и метилэтиловому эфиру, в безводных условиях основным продуктом является 2-метил-1,3-диоксолан. В ходе конверсии смеси 1,4-диоксана и H₂O наблюдается превращение аморфного станната кальция в CaCO₃ и SnO₂, в безводной среде также наблюдаются продукты восстановления SnO₂: белое олово и SnO.

Ключевые слова: 1,4-диоксан, сверхкритические условия, станнат кальция CaSnO₃, катализатор, кристаллизация

Physico-chemical transformation of calcium stannate during conversion of 1,4-dioxane under supercritical conditions

Savarets A.R.^{1*}, Bogdan T.V.^{1,2}, Koklin A.E.¹, Mashchenko N.V.¹, Bogdan V.I.^{1,2}

**Junior researcher, Graduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: alekesander.savaretz@yandex.ru

In this work, the conversion of dioxane over amorphous calcium stannate at 400 and 350 °C, 120 atm in aqueous and anhydrous media was carried out. The main conversion pathway is isomerization to 2-methyl-1,3-dioxolane, thermal decomposition to acetaldehyde and products of its transformations via aldol-crotonic condensation, reduction and isomerization. Changing the medium from anhydrous to aqueous increases the conversion to ethyl acetate, allyl alcohol and methylethyl ether, while under anhydrous conditions the main product is 2-methyl-1,3-dioxolane. During the conversion of a 1,4-dioxane and H₂O mixture, transformation of amorphous calcium stannate into CaCO₃ and SnO₂ is observed; in an anhydrous medium, reduction products of SnO₂ are also observed: white tin and SnO.

Keywords: catalyst crystallization, calcium stannate CaSnO₃, solid-state mobility, ethanol, 1,4-dioxane, supercritical conditions

Полиморфизм β -аланината Cu(II)

Саварец А.Р.,^{1*} Карманов А.Д.,^{1,2} Новикова Е.А.,³ Долженко В.Д.^{1,3}

**Младший научный сотрудник, аспирант*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Российский химико-технологический университет, ВХК Российской академии наук,
Москва, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: alekesander.savaretz@yandex.ru

В рамках исследования бинарной системы, содержащей ионы меди(II), анионы β -аланина и воду, была установлена способность к образованию целого ряда различных координационных соединений. В работе осуществлён синтез и физико-химическое исследование следующих соединений: гексагидрата бис(β -аланинато)меди(II) (1), его моногидрата (2), дигидрата (3) и безводной формы (4). Установлено, что соединение 1, формирующееся в условиях комнатной температуры, подвержено спонтанной дегидратации на воздухе с образованием комплекса 2. Выделение дигидратной формы (3) требует проведения кристаллизации при повышенной температуре (50 °C). Для установления строения соединения 1 применён метод РСА.

Ключевые слова: бета-аланин, полиморфизм, ИК-спектроскопия, комплексы Cu(II), ТПЛ

Polymorphism of Cu(II) β -Alaninate

Savarets A.R.,^{1*} Karmanov A.D.,^{1,2} Novikova E.A.,³ Dolzhenko V.D.^{1,3}

**Junior researcher, Graduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Higher Chemical College of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: alekesander.savaretz@yandex.ru

Within the study of the binary system containing copper(II) ions, β -alanine anions, and water, the ability to form a whole series of different coordination compounds was established. This work reports the synthesis and physicochemical investigation of the following compounds: bis(β -alaninato)copper(II) hexahydrate (1), its monohydrate (2), dihydrate (3), and anhydrous form (4).. It was found that compound 1, formed at room temperature, undergoes spontaneous dehydration in air to yield complex 2. The isolation of the dihydrate form (3) requires crystallization at an elevated temperature (50 °C). The method of single-crystal X-ray diffraction (XRD) was used to determine the structure of compound 1.

Keywords: beta-alanine, polymorphism, IR spectroscopy, Cu(II) complexes, TLF

Исследование влияния люминофора на процесс и механизм кристаллизации CaSO₄

Самохин Н. А.,* Почиталкина И. А.

**Студент*

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, факультет технологий неорганических веществ и высокотемпературных материалов, Москва, Россия

E-mail: k_samokhin@list.ru

Благодаря серии модельных водных растворов сульфата кальция со степенью пересыщения равной 4X относительно $C^ = 0,01495$ моль/л было исследовано влияние люминофора на процесс кристаллизации. С помощью кинетических кривых процесса осаждения твердой фазы и варьирования концентрации люминофора, присутствующего в модельных растворах, исследовано его влияние на кинетику процесса, которое заключается в увеличении длительности всех стадий. Помимо этого, благодаря методу РФА произведена идентификация полученных осадков. И с помощью метода микроскопии было исследовано влияние концентрации ингибитора на морфологию полученного осадка, а также благодаря визуальному наблюдению удалось установить преимущественный характер и механизм процесса кристаллизации.*

Ключевые слова: кристаллизация, люминофор, сульфат кальция, кинетика, механизм кристаллизации.

Study of the effect of the phosphor on the process and mechanism of CaSO₄ crystallization

Samokhin N. A.,* Pochitalkina I. A.

**Student*

D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Faculty of Inorganic Substances and High-Temperature Materials, Moscow, Russia

E-mail: k_samokhin@list.ru

Using a series of model aqueous calcium sulfate solutions with a supersaturation of 4X relative to $C^ = 0.01495$ mol/L, the effect of a phosphor on the crystallization process was studied. Using kinetic curves of the solid phase precipitation process and varying the phosphor concentration present in the model solutions, its effect on the process kinetics was investigated, resulting in an increase in the duration of all stages. Furthermore, X-ray diffraction analysis was used to identify the resulting precipitates. Microscopy was used to study the effect of inhibitor concentration on the morphology of the resulting precipitates, and visual observation was used to determine the predominant nature and mechanism of the crystallization process.*

Keywords: crystallization, phosphor, calcium sulfate, kinetics, crystallization mechanism.

Энтальпия сублимации бис(2-гидрокси)этил терефталата

Семавин К.Д.,* Чилингаров Н.С., Скокан Е.В.

**младший научный сотрудник*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: kirillsemavin55@yandex.ru*

Полиэтилентерефталат (ПЭТ) – полимер, широко использующийся в промышленности, объем производства которого составляет свыше 65 млн т в год. бис(2-гидрокси)этил терефталат (БГЭТ) является одним из низкомолекулярных интермедиатов синтеза и продуктов деполимеризации ПЭТ. Информация о термодинамических параметрах испарения (энтальпия сублимации, давление насыщенного пара) и термической стабильности подобных соединений необходима для оптимизации процессов переработки и утилизации ПЭТ. В настоящей работе методом высокотемпературной масс-спектрометрии определена энтальпия сублимации БГЭТ и оценены давление насыщенного пара и температура начала разложения БГЭТ.

Ключевые слова: *полиэтилентерефталат, бис(2-гидрокси)этил терефталат, сублимация, термоллиз, эффузионная ячейка.*

Работа выполнена в рамках научно-исследовательских работ Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова по теме «Химическая термодинамика и теоретическое материаловедение» (№ 121031300039-1).

Enthalpy of the sublimation of bis(2-hydroxy)ethyl terephthalate

Semavin K.D.,* Chilingarov N.S., Skokan E.V.

**Junior researcher*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: kirillsemavin55@yandex.ru*

Polyethylene terephthalate (PET) is a polymer widely used in industry, with a production volume of over 65 million tons per year. bis(2-hydroxy)ethyl terephthalate (BHET) is one of the low-molecular-weight intermediates of PET synthesis and depolymerization products. Information on the thermodynamic parameters of sublimation (sublimation enthalpy, saturated vapor pressure) and thermal stability of such compounds is necessary for optimizing the processing and recycling of PET. In this work, the enthalpy of sublimation of BHET was determined using high-temperature mass spectrometry, and the saturated vapor pressure and decomposition onset temperature were estimated.

Keywords: *polyethylene terephthalate, bis(2-hydroxy)ethyl terephthalate, sublimation, thermolysis, effusion cell.*

Смачиваемость смесевых мембран из полиэфиров и альбумина, полученные методом электроспиннинга

Сидорова А.Е.,* Рамонова А.А., Бонарцев А.П., Войнова В.В., Багров Д.В.

**Студент 2 курса магистратуры*

*³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
биологический факультет, Москва, Россия
E-mail: sidorova.anastasiya.2003@mail.ru*

Биосовместимые полиэфиры позволяют создавать конструкции для взаимодействия с биологическими системами. В работе изучено влияние гидрофильного бычьего сывороточного альбумина (БСА) на смачиваемость мембран из трёх полиэфиров (ПГБВ, ПЛА, ПКЛ), изготовленных методом электроспиннинга. Вопреки ожиданиям, добавление БСА повышало гидрофильность только мембран на основе ПГБВ и ПКЛ, для ПЛА наблюдался обратный эффект — рост гидрофобности. Это выявило нетривиальное влияние белка на свойства полиэфиров. Результаты спектроскопия комбинационного рассеяния показали, что электроформованные волокна смесевых мембран совмещают в себе как полиэфир, так и альбумин. Полученные результаты важны для разработки новых биосовместимых материалов и фундаментального изучения взаимодействий полимер-белок.

Wettability of electrospun mixed membranes made of polyesters and albumin

Sidorova A.,* Ramonova A., Bonartsev A., Voinova V., Parshina E., Bagrov D.

**Masters's student, 2nd year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of biology, Moscow, Russia
E-mail: sidorova.anastasiya.2003@mail.ru*

Biocompatible polyesters allow the creation of structures for interaction with biological systems. The effect of hydrophilic bovine serum albumin (BSA) on the wettability of membranes made of three polyesters (PHBV, PLA, PCL) formed by electrospinning was studied. Contrary to expectations, the addition of BSA increased the hydrophilicity of only PHBV and PCL - based membranes, while the opposite effect was observed for PLA - an increase in hydrophobicity. This revealed a non-trivial effect of protein on the properties of polyesters. The results of RAMAN spectroscopy have shown that the electroformed fibers of the blended membranes combine both polyester and albumin. The results obtained are important for the development of new biocompatible materials and the fundamental study of polymer-protein interactions.

Элементный и фазовый состав магнитного песка Халактырского пляжа и его применение в гидрировании CO₂

Скиба М.А.,^{1,2*} Коклин А.Е.,¹ Богдан Т.В.,^{1,3} Чернавский П.А.,³ Богдан В.И.^{1,3}

**Студент*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, Москва, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: skibamaria21@yandex.ru

Изучены элементный и фазовый состав магнитного песка Халактырского пляжа (Камчатский край, Россия) методами РФА и ICP–MS. Установлено, что наибольшим является содержание элементов Fe и Al, состав характеризуется преобладанием алюмосиликатных фаз и магнетита. Проведено гидрирование диоксида углерода с использованием в качестве катализатора магнитного песка при 400 °С и давлении 8.0 МПа. Конверсия CO₂ составила 4% при селективности по углеводородам около 50%.

Ключевые слова: магнитный песок, железо, магнетит, гидрирование, диоксид углерода, углеводороды, олефины, восстановление CO₂

Elemental and phase composition of magnetic sand from Khalaktyrsky Beach and its application in CO₂ hydrogenation

Skiba M.A.,^{1,2*} Koklin A.E.,¹ Bogdan T.V.,^{1,3} Chernavsky P.A.,³ Bogdan V.I.^{1,3}

**Student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: skibamaria21@yandex.ru

The elemental and phase composition of magnetic sand from Khalaktyrsky Beach (Kamchatka Krai, Russia) was studied using XRF and ICP–MS methods. It was found that the content of Fe and Al elements is the highest, and the composition is characterized by a predominance of aluminosilicate phases and magnetite. Carbon dioxide was hydrogenated using magnetic sand as a catalyst at 400 °C and a pressure of 8.0 MPa. The CO₂ conversion was 4% with a hydrocarbon selectivity of about 50%.

Keywords: magnetic sand, iron, magnetite, hydrogenation, carbon dioxide, hydrocarbons, olefins, CO₂ reduction

Исследование «корочковых» PdAu_x/Al₂O₃ катализаторов в условиях фронтального гидрирования ацетилена в этилен

Смирнова Н.С.,^{1*} Машковский И.С.,¹ Ваулина А.Е.,¹ Мельников Д.П.,²
Марков П.В.,¹ Баева Г.Н.,¹ Стахеев А.Ю.¹

**Старший научный сотрудник*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

²*Российский государственный университет нефти и газа (национальный
исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

E-mail: ns-smirnova@ioc.ac.ru

В работе получены новые сплавные биметаллические Pd-Au катализаторы с ультрамалым содержанием палладия и «корочковым» распределением компонентов. Методом DRIFT-CO спектроскопии показано изменение структуры активных центров Pd/Al₂O₃ при введении различных количеств золота. Полученные Pd-Au катализаторы проявляют высокую селективность по этилену и могут рассматриваться как перспективные для реакции селективного гидрирования ацетилена во фронтальном режиме.

Ключевые слова: селективное гидрирование ацетилена, DRIFT спектроскопия адсорбированного CO, Pd-Au сплавные катализаторы;

Study of egg-shell PdAu_x/Al₂O₃ catalysts in the front-end hydrogenation of acetylene to ethylene

Smirnova N.S.,^{1*} Mashkovsky I.S.,¹ Vaulina A.E.,¹ Melnikov D.P.,² Markov P.V.,¹ Baeva G.N.,¹
Stakheev A.Yu.¹

**Senior Research*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia*

E-mail: ns-smirnova@ioc.ac.ru

In this study, new alloyed bimetallic Pd-Au catalysts with ultra-low palladium content and egg-shell distribution of components were synthesized. DRIFT-CO spectroscopy showed that the structure of the Pd/Al₂O₃ active sites altered when different amounts of gold were introduced. The obtained Pd-Au catalysts exhibit high selectivity for ethylene and can be considered as promising for the front-end selective hydrogenation of acetylene.

Keywords: selective hydrogenation of acetylene, DRIFT spectroscopy of adsorbed CO, Pd-Au alloy catalysts

Пути модернизации технологии окисления циклогексана до циклогексанола и циклогексанона

Смурова А.А.,* Косицына А.В., Фролов А.С., Курганова Е.А.

**Аспирант, 2 год обучения*

Ярославский государственный технический университет, Ярославль, Россия

E-mail: smurovaaa@mail.ru

В работе предложены и экспериментально апробированы способы модернизации технологии получения циклогексанола и циклогексанона, изучено влияние основных технологических параметров на содержание целевых продуктов. Получен эпоксид циклогексана совместно с циклогексанола и циклогексанона реакцией эпоксидирования циклогексана гидропероксидом циклогексана. Циклогексанол и циклогексанон синтезированы окислением циклогексана в присутствии каталитических систем на основе N-гидроксифталимида и солей металлов переменной валентности с селективностью 95 %, конверсия циклогексана составляет 10 %. Циклогексанол превращен в циклогексанон с содержанием 52 мас.% реакцией жидкофазного окисления.

Ключевые слова: каталитическое окисление, циклогексан, циклогексанол, циклогексанол, N-гидроксифталимид, эпоксидирование, эпоксид циклогексана.

Ways to modernize the technology of cyclohexane oxidation to cyclohexanol and cyclohexanone

Smurova A.A.,* Kositsyna A.V., Frolov A.S., Kurganova E.A.

**Graduate student, 2nd year*

Yaroslavl State Technical University, Yaroslavl, Russia

E-mail: smurovaaa@mail.ru

In this work, methods for modernizing the technology for producing cyclohexanol and cyclohexanone are proposed and experimentally tested, and the influence of the main process parameters on the content of the target products is studied. Cyclohexane epoxide was obtained jointly with cyclohexanol and cyclohexanone by the epoxidation of cyclohexene with cyclohexane hydroperoxide. Cyclohexanol and cyclohexanone were synthesized by oxidation of cyclohexane in the presence of catalytic systems based on N-hydroxyphthalimide and salts of transition metals with a selectivity of 95%, the conversion of cyclohexane is 10%. Cyclohexanol was converted into cyclohexanone with a content of 52 wt.% by a liquid-phase oxidation reaction.

Keywords: catalytic oxidation, cyclohexane, cyclohexanol, cyclohexanol, N-hydroxyphthalimide, epoxidation, cyclohexane epoxide.

**Установление сорбционных и структурных характеристик
композитных материалов на основе аэрогеля НКЦ,
импрегнированного фенаматами, на основе данных спектроскопии
ЯМР**

**Соборнова В.В.^{1*}, Белов К.В.¹, Дышин А.А.¹, Толстой П.М.², Муллоярова В.В.²,
Киселев М.Г.¹, Ходов И.А.¹**

**Аспирант*

¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук,
Иваново, Россия*

²*Институт химии, Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: vvs@isc-ras.ru*

Методами ЯМР высокого давления и MAS ЯМР проведено исследование структурных и сорбционных характеристик композитных материалов на основе аэрогелей нанокристаллической целлюлозы. Анализ ¹³C ЯМР позволил определить кинетические параметры сорбции, а ¹⁹F MAS ЯМР – впервые выявить два стабильных фазовых состояния флуфенамовой кислоты в пористой структуре. Показано, что уникальная архитектура целлюлозных аэрогелей стабилизирует метастабильные аморфные фазы активных фармацевтических ингредиентов, что, в дальнейшем, может быть применено для доставки лекарственных соединений.

Ключевые слова: ЯМР спектроскопия, композитные материалы, сверхкритический флюид, пространственная структура, сорбция, конформация

Работа выполнена при помощи гранта РФФИ № 22-13-00257-П.

**Establishment of sorption and structural characteristics of composite
materials based on NCC aerogel impregnated with fenamates, based on
NMR spectroscopy data**

**Sobornova V.V.^{1*}, Belov K.V.¹, Dyshin A.A.¹, Tolstoy P.M.², Mulloyarova V.V.², Kiselev M.G.¹,
Khodov I.A.¹**

**Graduate student*

¹*G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry, Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia*

²*Institute of Chemistry, Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia
E-mail: vvs@isc-ras.ru*

High-pressure NMR and MAS NMR were used to study the structural and sorption characteristics of composite materials based on nanocrystalline cellulose aerogels. ¹³C NMR analysis allowed us to determine the kinetic parameters of sorption, while ¹⁹F MAS NMR revealed for the first time two stable phase states of flufenamic acid in the porous structure. It was shown that the unique architecture of cellulose aerogels stabilizes the metastable amorphous phases of active pharmaceutical ingredients, which can be used for drug delivery.

Keywords: NMR spectroscopy, composite materials, supercritical fluid, spatial structure, sorption, conformation.

Окисление гваякола пероксидом водорода в мягких условиях

Соколова А.В.,* Бородкина П.М., Акинчиц М.В., Маркова М.Е., Степачёва А.А.

**Аспирант*

*Тверской государственной технической университет,
химико-технологический факультет, Тверь, Россия*

E-mail: a.a.stepacheva@mail.ru

Окисление гваякола представляет собой важный процесс, имеющий значительное значение в химической и биохимической промышленности. Существует несколько подходов к окислению гваякола, среди которых можно выделить каталитическое, микробиологическое и электрокаталитическое окисление.

Каталитическое окисление, использующее различные катализаторы, такие как металлы переходной группы или их оксиды, позволяет достигать высокой селективности и скорости реакции. Этот подход часто применяется в промышленности для получения ценных продуктов, таких как ванилин и другие ароматические соединения.

В данной работе изучалось окисление гваякола пероксидом водорода в хиноны в присутствии шунгитовой пыли в качестве катализатора. Процесс проводился в диапазоне температур 40-80 °С при атмосферном давлении.

Ключевые слова: гваякол, пероксид водорода, шунгит, окисление, хиноны

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 22-79-10096-П).

Guaiacol oxidation with hydrogen peroxide at mild conditions

Sokolova A.V.,* Borodkina P.M., Akinchits M.V., Markova M.E., Stepacheva A.A.

**Graduate student*

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: a.a.stepacheva@mail.ru

The oxidation of guaiacol is an important process in chemical and biochemical industries. There are several approaches to guaiacol oxidation, including catalytic, microbiological, and electrocatalytic oxidation.

Catalytic oxidation using various catalysts, such as transition metals or their oxides, allows achieving high selectivity and reaction rate. This approach is often used in industry to produce valuable products such as vanillin and other aromatic compounds.

In this work, the oxidation of guaiacol by hydrogen peroxide to quinones in the presence of shungite dust as a catalyst was studied. The process was carried out in the temperature range of 40-80 °C at atmospheric pressure.

Keywords: guaiacol, hydrogen peroxide, shungite, oxidation, quinones

The work was carried out with the financial support of the Russian Science Foundation (project 22-79-10096-P).

Влияние содержания оксидов меди(II) и церия(IV) на эффективность реакции гидрирования фурфурола до фурфурилового спирта на кремниевых носителях

**Солнцева А.В.,^{1*,2} Фёдорова А.А.,¹ Кнотько А.В.,¹ Сорокина Н.М.,¹
Шестеркина А.А.¹**

**Студент*

¹*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

²*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: alinasolntceva@yandex.ru

Изучено влияние содержания оксидов меди(II) и церия(IV) в катализаторах на кремниевых носителях на эффективность гидрирования фурфурола в фурфуриловый спирт. Носители SiO₂ и CeO₂/SiO₂ синтезированы золь-гель методом с использованием β-циклодекстрина и его метилированного производного. Оксиды CeO₂, CuO нанесены на носители методом пропитки по влажёмкости. Полученные катализаторы CuO/SiO₂ и CuO/CeO₂/SiO₂ охарактеризованы методами рентгенофазового анализа, низкотемпературной адсорбции-десорбции N₂, рентгеноструктурного микроанализа и атомно-эмиссионного анализа с индуктивно связанной плазмой. Показано, что системы на смешанном носителе CeO₂/SiO₂ проявляют более высокую активность. Максимальную конверсию фурфурола при 150 °С показал образец CuO/CeO₂/SiO₂ 5 масс.% CuO.

Ключевые слова: фурфурол, фурфуриловый спирт, гидрирование, медные катализаторы, церийсодержащие носители

The effect of copper(II) and cerium(IV) oxide content on the efficiency of furfural hydrogenation to furfuryl alcohol over silica-based supports

Solntseva A.V.^{1*,2}, Fedorova A.A.¹, Knotko A.V.¹, Sorokina N.M.¹, Shesterkina A.A.¹

**Student*

¹*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

²*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

E-mail: alinasolntceva@yandex.ru

The effect of copper(II) and cerium(IV) oxides in silica-based catalysts on the efficiency of furfural hydrogenation into furfuryl alcohol has been studied. The SiO₂ and CeO₂/SiO₂ supports were synthesized by the sol-gel method using β-cyclodextrin and its methylated derivative. The oxides CeO₂ and CuO are deposited by the moisture capacity impregnation method. Catalysts CuO/SiO₂ and CuO/CeO₂/SiO₂ are characterized by methods of X-ray phase analysis, low-temperature adsorption-desorption of N₂, X-ray diffraction microanalysis and atomic emission analysis with inductively coupled plasma. Systems based on a CeO₂/SiO₂ mixed support exhibit higher activity. The maximum conversion of furfural at 150 °C was shown by the sample — CuO/CeO₂/SiO₂ with 5 mass.% CuO.

Keywords: furfural, furfuryl alcohol, hydrogenation, copper catalysts, cerium-containing carriers

Влияние дефектов и легирующих атомов в структуре наночастиц никеля полимерстабилизированных каталитических систем на адсорбцию водорода и непредельных субстратов реакций гидрирования

Спиридонова Ю.В., Быков А.В.

Тверской государственный технический университет, Тверь, Россия

E-mail: julia.v.spiridonova@mail.ru

Методом теории функционала плотности выполнено моделирование никелевого нанокластера, состоящего из 58 атомов. В исходную структуру были введены четыре атома углерода, размещённые в подповерхностной области кластера, после чего проведена геометрическая оптимизация, а также построены и оптимизированы адсорбционные комплексы «кластер–субстрат» для молекул водорода, ацетилена, этилена и бензола. Для всех систем рассчитаны энергии хемосорбции соответствующих субстратов, а также энергия когезии кластера для оценки влияния легирующего углерода на устойчивость структуры, геометрическую структуру кластера и характер адсорбции молекул субстратов. Структурный анализ показал, что внедрение четырёх атомов углерода приводит к выраженной реконструкции приповерхностной области кластера и формированию локально активной грани, на которой преимущественно закрепляются молекулы субстратов. Установлено, что допирование углеродом селективно изменяет прочность адсорбции, тогда как присутствие адсорбированного водорода существенно усиливает хемосорбцию всех рассмотренных субстратов и сопровождается характерной миграцией водорода по поверхности кластера.

Ключевые слова: DFT, наночастица никеля, легирование углеродом, хемосорбция, дефекты поверхности.

Influence of Defects and Dopant Atoms in the Structure of Nickel Nanoparticles in Polymer-Stabilized Catalytic Systems on the Adsorption of Hydrogen and Unsaturated Hydrogenation Substrates

Spiridonova Yu.V., Bykov A.V.

Tver State Technical University, Tver, Russia

E-mail: julia.v.spiridonova@mail.ru

Density functional theory calculations were performed to model a nickel nanocluster consisting of 58 atoms. Four carbon atoms were introduced into the initial structure and placed in the subsurface region of the cluster, followed by full geometric optimization. Adsorption complexes “cluster–substrate” were then constructed and optimized for hydrogen, acetylene, ethylene, and benzene molecules. For all systems, the chemisorption energies of the corresponding substrates were calculated, as well as the cluster cohesive energy to assess the effect of carbon doping on structural stability, the geometric structure of the cluster, and the nature of substrate adsorption. Structural analysis showed that incorporation of four carbon atoms leads to pronounced reconstruction of the near-surface region of the cluster and the formation of a locally active facet, on which substrate molecules are preferentially anchored. It was found that carbon doping selectively alters adsorption strength, whereas the presence of adsorbed hydrogen significantly enhances the chemisorption of all considered substrates and is accompanied by characteristic hydrogen migration across the cluster surface.

Keywords: DFT, nickel nanoparticle, carbon doping, chemisorption, surface defects.

Исследование влияния эфиров жирных кислот на физико-химические характеристики дизельного топлива

Степанов Е.Д.,* Буров Е.А.

**Студент*

Российский государственный университет нефти и газа (национальный исследовательский университет) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

E-mail: stepanov.elisey.dm@yandex.ru

Проведена оценка влияния добавок эфиров жирных кислот талловых масел на физико-химические свойства дизельного топлива. Синтез эфиров выполняли путем каталитической этерификации жирных кислот в присутствии гетерогенного кислотного катализатора на основе ионообменной смолы (H⁺-форма). Качество полученного биодизельного топлива оценивали по ключевым показателям согласно действующим стандартам.

Ключевые слова: утилизация отходов, биодизель, биотопливо, сложные эфиры жирных кислот; вторичное сырье.

Studies of the effect of fatty acid esters on physicochemical characteristics of diesel fuel

Stepanov E.D.,* Burov E.A.

**Student*

I.M. Gubkin Russian State University of Oil and Gas (National Research University), Moscow, Russia

E-mail: stepanov.elisey.dm@yandex.ru

The effect of additives of fatty acid esters of tall oil (FAE) on physicochemical properties of diesel fuel was investigated. Synthesis of target esters was carried out by the method of catalytic esterification of fatty acids in the presence of heterogeneous acid catalyst, / as which ion exchange resin (H⁺ form) was used. The key parameters for biodiesel (BDT) were determined in accordance with the current standard.

Keywords: waste utilisation, biodiesel, biofuel, fatty acid esters, secondary raw materials.

Электрохимическое исследование антикоррозионных покрытий, модифицированных углеродными наноматериалами

Столбов Д.Н.,^{1*} Яковлев С.В.,² Сулова Е.В.,¹ Иванов А.С.¹

**Научный сотрудник*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии
наук, Москва, Россия

E-mail: stolbovdn@gmail.com

В работе исследовано влияние углеродных наноматериалов на антикоррозионные свойства полимерных покрытий. В качестве модифицирующих добавок использованы окисленные углеродные нанотрубки (О-УНТ), окисленные малослойные графеновые фрагменты (О-МГФ), а также азот- и фосфордопированные производные МГФ (N-МГФ, P-МГФ). Наноматериалы вводили в эмаль на основе винилхлоридного сополимера и наносили на стальные подложки. Коррозионную устойчивость покрытий оценивали электрохимическими методами в растворе хлорида натрия, имитирующем морскую воду. Установлено влияние природы и химического состава углеродных наноматериалов на электрохимические характеристики покрытий и их защитную эффективность.

Ключевые слова: углеродные наноматериалы, антикоррозионные покрытия, углеродные нанотрубки, малослойные графитовые фрагменты, электрохимические методы, морская среда.

Работа выполнена в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова, регистрационный номер № АААА-А21-121011990019-4.

Electrochemical study of anti-corrosion coatings modified with carbon nanomaterials

Stolbov D.,^{1*} Yakovlev S.,² Suslova E.,¹ Ivanov A.¹

**Researcher*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry,
Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: stolbovdn@gmail.com

The effect of carbon nanomaterials on the anticorrosion properties of polymer coatings was investigated. Oxidized carbon nanotubes (O-CNT), oxidized graphene nanoflakes (O-GNF), as well as nitrogen- and phosphorus-doped derivatives of graphene nanoflakes (N-GNF, P-GNF) were used as modifying additives. The nanomaterials were incorporated into a vinyl chloride copolymer-based enamel and applied onto steel substrates. The corrosion resistance of the coatings was evaluated by electrochemical methods in a sodium chloride solution simulating seawater. The influence of the nature and chemical composition of carbon nanomaterials on the electrochemical characteristics of the coatings and their protective efficiency was established.

Keywords: carbon nanomaterials, anticorrosion coatings, carbon nanotubes, graphene nanoflakes, electrochemical methods, marine environment.

Получение компонентов экологически чистых топлив прямым и двухстадийным ожижением биоуглей

Сулейманов Х.А.,* Куликова М.В.

**Младший научный сотрудник, аспирант 1 з/о*

*Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева Российской академии наук,
Москва, Россия*

E-mail: suleimanov@ips.ac.ru

В работе представлены результаты комплексного исследования процессов получения компонентов экологически чистых топлив из биоуглей, полученных низкотемпературной обработкой биомассы при 250 °С. Проведено сравнение использования прямого термического растворения биоуглей в тетралине при 400 °С и двухстадийного процесса, включающего паровую газификацию с последующим синтезом Фишера-Тропша. Установлено, что природа исходной биомассы и метод низкотемпературной обработки оказывают существенное влияние на реакционную способность биоуглей. Результаты демонстрируют перспективность комплексного подхода к использованию различных типов биоуглей: торрефиката для получения жидких топлив прямым ожижением и карбонизата для производства синтез-газа, «зеленого» водорода и компонентов экологически чистых топлив.

Ключевые слова: биоуголь, газификация, ожижение (термическое растворение), гидротермальная карбонизация, торрефакция, биомасса, гидротальцит, SAF, зеленый водород.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИИХС РАН.

Production of Sustainable Fuel Components via Direct and Two-Stage Liquefaction of Biochars

Suleimanov Kh.A.,* Kulikova M.V.

**Junior Research Assistant, Graduate student*

A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: suleimanov@ips.ac.ru

This paper presents the results of a comprehensive study on the production of Sustainable Fuel Components from Biochars obtained via Low-Temperature Biomass Processing at 250 °C. A comparison is made between the Direct Thermal Dissolution of biochars in tetralin at 400 °C and a two-stage process involving Steam Gasification followed by Fischer-Tropsch synthesis. It has been established that the nature of the initial biomass and the method of low-temperature treatment significantly influence the reactivity of the biochars. The results demonstrate the promise of an integrated approach for utilizing different types of biochars: torreficate for liquid fuel production via direct liquefaction and carbonizate for the production of syngas, “green” hydrogen and sustainable fuel components.

Keywords: biochar, gasification, liquefaction (thermal dissolution), hydrothermal carbonization, torrefaction, biomass, hydrotalcite, SAF, green hydrogen.

Кинетика образования оксидных плёнок на поверхности сплавов вентильных металлов

Сюрин А.О.,* Фишгойт Л.А.

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: aleksei.siurin@chemistry.msu.ru*

В эпоху бурного развития науки и технология неотъемлемой частью материального мира являются металлические материалы и сплавы. Сплавы на основе кобальта с редкоземельными элементами, являются перспективными материалами для аэрокосмической отрасли и медицины. Однако в специфических условиях и агрессивных средах они подвержены коррозии. В настоящем докладе рассматривается влияние предварительно сформированных анодных оксидных плёнок (АОП) на поверхности сплавов кобальта с рением и добавками вентильных металлов – титана и тантала, на коррозионные свойства, а также предлагается механизм кинетики образования АОП, разработанный на основе анализа данных электрохимического импеданса поверхности образцов.

Ключевые слова: сплавы кобальта, вентильные металлы, анодные оксидные плёнки (АОП), коррозия сплавов, электрохимический импеданс, кинетика образования

Kinetics of oxide film formation on valve metal alloy surfaces

Siurin A.,* Fishgoit L.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: aleksei.siurin@chemistry.msu.ru*

In the contemporary era of accelerated scientific and technological advancement, metallic materials and alloys constitute foundational elements of modern engineering. Valve metal alloys, exemplified by cobalt-based systems incorporating rare earth elements, hold substantial promise for applications in aerospace and biomedical sectors. Nevertheless, these alloys exhibit vulnerability to corrosion under specific conditions and aggressive environments. This study investigates the influence of preformed anodic oxide films (AOF) on the surfaces of cobalt-titanium, rhenium, and tantalum alloys on their corrosion resistance. Furthermore, we propose a mechanistic model for AOF formation kinetics, derived from electrochemical impedance spectroscopy (EIS) analysis of sample surfaces.

Keywords: cobalt-based alloys, valve metals, anodic oxide films (AOF), alloy corrosion mechanisms, electrochemical impedance spectroscopy (EIS), oxide film formation kinetics.

Цеолит 13X: Влияние структуры поверхности на адсорбцию малых органических молекул

Тагирова М.Р.,* Ланин С.Н.

**Студент, 5 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: tagirova5353@yandex.ru*

Изучена адсорбция ряда веществ на образце цеолита 13X: дихлорметана, трихлорметана, тетрахлорметана, толуола, бензола, циклогексана, пентана, гексана, гептана. Показана корреляция рассчитанных размеров молекул с их адсорбцией на цеолите. Подтверждена энергетическая неоднородность поверхности цеолита 13X по зависимости теплоты адсорбции от количества сорбата. Проведена оценка вклада в теплоту адсорбции специфических и неспецифических взаимодействий.

Ключевые слова: цеолит 13X, адсорбция, теплота адсорбции, малые органические молекулы, полости, структура поверхности

Zeolite 13X: surface structure effects on small organic molecules adsorption

Tagirova M.R.,* Lanin S.N.

**Student*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: tagirova5353@yandex.ru*

The adsorption of a number of substances on a 13X zeolite sample was studied: dichloromethane, trichloromethane, carbon tetrachloride, toluene, benzene, cyclohexane, pentane, hexane, and heptane. A correlation was demonstrated between the calculated molecular sizes and their adsorption on the zeolite. The energetic heterogeneity of the 13X zeolite surface was determined based on the dependence of the heat of adsorption of dichloromethane on the amount of sorbate. The contribution of specific and nonspecific interactions to the heat of adsorption was assessed.

Keywords: zeolite 13X, adsorption, heat of adsorption, small organic molecules, pores, surface structure.

**Влияние адсорбционной-индуцированной сегрегации на активность
модифицированного платиной катализатора $\text{CrO}_x\text{-ZrO}_2/\text{SiO}_2$
неокислительного дегидрирования пропана**

Ужуев И.К.,* Голубина Е.В.

**Студент, 6 курс*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: uzhuev2003@mail.ru*

*Методом адсорбционно-индуцированной сегрегации исследовано управление структурой и свойствами катализатора PtCrZr/SiO_2 для неокислительного дегидрирования пропана. Показано, что *in situ* обработка CO непосредственно перед испытанием приводит к росту каталитической активности: достигается увеличение конверсии пропана и селективности по пропилену по сравнению с катализатором без обработки.*

Ключевые слова: неокислительное дегидрирование пропана, адсорбционно-индуцированная сегрегация, обработка CO, модифицирование платиной, PtCrZr/SiO_2 .

**Platinum-modified $\text{CrO}_x\text{-ZrO}_2/\text{SiO}_2$ catalysts for nonoxidative propane
dehydrogenation**

Uzhuev I.K.,* Golubina E.V.

**Student, 6th year*

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: uzhuev2003@mail.ru*

Platinum-modified $\text{CrO}_x\text{-ZrO}_2/\text{SiO}_2$ catalysts for nonoxidative propane dehydrogenation In this study, we investigated the effect of CO on the activity of the nonoxidative propane dehydrogenation reaction. The test sample was Pt-CrO_x-ZrO₂-SiO₂ (1 wt% Pt, 9 wt% chromium content based on Cr₂O₃). The performance of the modified catalysts was compared in the nonoxidative propane dehydrogenation reaction in a flow-through system with a fixed catalyst bed.

Keywords: propane dehydrogenation, modified Cr₂O₃ catalysts

Флуктуации температуры водно-этанольной смеси в проточной системе при высоких параметрах состояния

Федосеев Т.В.,^{1,2*} Богдан Т.В.,^{1,3} Богородский С.Э.,¹ Богдан В.И.^{1,3}

**Студент, 1 курс магистратуры*

¹*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Национальный исследовательский университет «МФТИ», Физтех-школа электроники, фотоники и молекулярной физики, Долгопрудный, Россия*

³*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия*

E-mail: vfkbuyec@gmail.com

Экспериментально исследовано поведение водно-этанольной смеси (95 об.% этанола) при высоких параметрах состояния в проточном U-образном канале переменного сечения. Показано, что в околоскритической области реализуется нестационарный температурный режим с амплитудными флуктуациями температуры потока, чувствительными к объёмной скорости подачи. Полученные результаты указывают на нестационарный характер околоскритического теплообмена без формирования устойчивого раздела фаз.

Ключевые слова: водно-этанольная смесь, околоскритические условия, теплообмен, проточная система, температурные флуктуации, нестационарные режимы.

Temperature fluctuations of a water-ethanol mixture in a flow system at high parameters of state

Fedoseev T.V.,^{1,2*} Bogdan T.V.,^{1,3} Bogorodsky S.E.,¹ Bogdan V.I.^{1,3}

**Masters's student, 1st year*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*National Research University "Moscow Institute of Physics and Technology, Phystech School of Electronics, Photonics, and Molecular Physics, Dolgoprudny, Russia*

³*M.V. Lomonosov Moscow State University, Faculty of Chemistry, Moscow, Russia*

E-mail: vfkbuyec@gmail.com

The behavior of a water-ethanol mixture (95 vol.% ethanol) under high state parameters in a flow-through U-shaped channel with a variable cross-section was experimentally investigated. It was shown that in the near-critical region, a non-stationary temperature regime with amplitude fluctuations in the flow temperature sensitive to the volumetric flow rate is realized. The results obtained indicate the non-stationary nature of near-critical heat transfer without the formation of a stable phase separation.

Keywords: water-ethanol mixture, near-critical conditions, heat transfer, flow system, temperature fluctuations, non-stationary regimes.

Влияние твёрдого электролита на работу потенциометрических сенсоров на водород в сухом воздухе

Фрейман В.М.,* Стариков А.С., Талагаева Н.В., Леонова Л.С., Винюков А.В.

**Младший научный сотрудник*

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Россия

E-mail: freiman_vm@icp.ac.ru

В работе изучалось влияние твёрдого электролита (ТЭл) на чувствительность и время реагирования потенциометрических газовых сенсоров на водород (от 50 до 1000 ppm) в атмосфере сухого воздуха (RH=5%). Сравнивались ТЭл: бис-каликс[4]аренсульфоукислота, каликс[4]аренсульфоукислота и аммонийная соль фосфорновольфрамовой кислоты (АСФВК) $(\text{NH}_4)_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$. Сенсоры с ТЭл из бис-каликс[4]аренсульфоукислота показали меньшее время реагирования при определении маленьких (<300 ppm) концентраций H_2 , при сопоставимой чувствительности в сравнении с сенсорами с ТЭл из АСФВК.

Ключевые слова: потенциометрический сенсор, водород, твёрдый электролит, бис-каликс[4]аренсульфоукислота, каликс[4]аренсульфоукислота.

Работа выполнена по теме Государственного задания ФИЦ ПХФ и МХ РАН, темкарта № 124013000692-4 от 01.01.2024.

The effect of the solid electrolyte on the operation of potentiometric sensors for hydrogen in dry air

Freiman V.M.,* Starikov A.S., Talagaeva N.V., Vinyukov A.V.

**Junior research assistant*

*Federal Research Center for Problems of Chemical Physics and Medical Chemistry,
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia*

E-mail: freiman_vm@icp.ac.ru

The effect of a solid electrolyte (SE) on the sensitivity and response time of potentiometric gas sensors to hydrogen (from 50 to 1000 ppm) in a dry air atmosphere (RH=5%) was studied. The SE were compared: bis-calix[4]arenesulfonic acid, calix[4]arenesulfonic acid and ammonium salt of phosphoric acid (ASPTA) $(\text{NH}_4)_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$. Sensors with SE from bis-calix[4]arenesulfonic acid showed a shorter response time when detecting small (<300 ppm) concentrations of H_2 , with comparable sensitivity compared to sensors with SE from ASPTA.

Keywords: potentiometric sensor, hydrogen, solid electrolyte, bis-calix[4]arenesulfonic acid, calix[4]arenesulfonic acid.

Изучение влияния физико-химических параметров реакции на полноту каталитического окисления L-сорбозы до 2-кето-L-гулоновой кислоты

Цветков Д.Ю.,* Петрова А.И., Лакина Н.В., Долуда В.Ю., Сульман М.Г.

**Студент*

*Тверской государственной технической университет,
химико-технологический факультет, Тверь, Россия
E-mail: dm.cwetkow@mail.ru*

Особенности каталитического окисления L-сорбозы на гетерогенных катализаторах включают выбор подходящего катализатора, условий реакции (температура, pH среды, время проведения процесса). Цель данной работы — исследовать особенности каталитического окисления L-сорбозы на различных гетерогенных катализаторах и оценить влияние различных факторов на эффективность процесса. В данной работе при окислении L-сорбозы при различных условиях реакции применяли три типа гетерогенных платиновых катализатора, известных из литературы. Все образцы анализировали с использованием ВЭЖХ. Селективность по отношению к 2-кето-L-гулоновой кислоте определяли на основе этих аналитических данных.

Ключевые слова: окисление L-сорбозы, каталитическое окисление, гетерогенные катализаторы.

Study of the effect of the physical and chemical parameters of the reaction on the completeness of the catalytic oxidation of L-sorbose to 2-keto-L-gulonic acid

Tsvetkov D.Yu.,* Petrova A.I., Lakina N.V., Doluda V.Yu., Sulman M.G.

**Student*

*Tver State Technical University, Department of Chemical Technology, Tver, Russia
E-mail: dm.cwetkow@mail.ru*

The features of the catalytic oxidation of L-sorbose on heterogeneous catalysts include the choice of a suitable catalyst, reaction conditions (temperature, pH of the medium, and process time). The purpose of this work is to investigate the features of the catalytic oxidation of L-sorbose on various heterogeneous catalysts and to evaluate the influence of various factors on the efficiency of the process. In this work, three types of heterogeneous platinum catalysts known from the literature were used for the oxidation of L-sorbose under various reaction conditions. All samples were analyzed using HPLC. Selectivity with respect to 2-keto-L-gulonic acid was determined based on these analytical data.

Keywords: oxidation of L-sorbose, catalytic oxidation, heterogeneous catalysts.

Низкотемпературная теплоемкость 6-(4- метоксифенил)- 1,5- диазабицикло[3.1.0]гексана

Чумаков А.А.,^{1*} Кузнецов В.В.,² Дружинина А.И.¹

**Студент, 4 курс*

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия

²Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук,
Москва, Россия

E-mail: conditer2005@yandex.ru

Исследованное соединение, 6-(4- метоксифенил)- 1,5- диазабицикло[3.1.0]гексан (МФДАБГ), относится к классу производных диазиридина. Синтез и очистка образца МФДАБГ проведены в ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН. Структура полученного соединения была проконтролирована спектроскопическими методами. Очистка вещества проведена путем многократной перекристаллизацией из диэтилового эфира. Чистота образца оценена методом элементного анализа.

Теплоемкость МФДАБГ определена методом низкотемпературной адиабатической калориметрии в интервале температур 6–350 К. Найдены основные термодинамические функции S_m^0 , $\Delta_0^T H_m^0$, $\Delta_0^T G_m^0$, и энтропия образования при 298.15 К, $\Delta_f S_m^0$. Используя экспериментальные литературные данные по энтальпии образования при 298.15 К, рассчитана свободная энергия Гиббса образования, $\Delta_f G_m^0$.

Ключевые слова: 6-(4- метоксифенил)- 1,5- диазабицикло[3.1.0]гексан, калориметрия, теплоемкость, основные термодинамические функции, абсолютная энтропия.

Исследование было выполнено в рамках госбюджетной темы “Химическая термодинамика и материаловедение” (АААА-А16-121031300039-1).

Low-temperature heat capacity of 6-(4-methoxyphenyl)- 1,5-diazabicyclo[3.1.0]hexane

Chumakov A.A.,^{1*} Kuznetsov V.V.,² Druzhinina A.I.¹

**Student, 4th year*

¹M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia

²N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

E-mail: conditer2005@yandex.ru

The heat capacity of 6-(4-methoxyphenyl)-1,5-diazabicyclo[3.1.0]hexane was determined in the temperature range of 6-350 K using low-temperature vacuum adiabatic calorimetry. Based on the obtained data, the main thermodynamic functions and the entropy of formation at 298.15 K were calculated. Using experimental literature data on the enthalpy of formation at 298.15 K, the Gibbs free energy of formation was found.

Keywords: 6-(4-methoxyphenyl)-1,5-diazabicyclo[3.1.0]hexane, calorimetry, heat capacity, main thermodynamic functions, absolute entropy.

Водородсорбционные характеристики модифицированных интерметаллидов TiFe и их композитов

Шамов И.Д.,* Санин В.В., Арбузов А.А., Лотоцкий М.В., Тарасов Б.П.

**Аспирант 3 г.о.*

*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, Черноголовка, Россия
E-mail: shamovid@icp.ac.ru*

Представлены результаты исследований закономерностей влияния методов получения и предварительной обработки модифицированных интерметаллидов TiFe и их композитов на активацию и сорбцию водорода. Показано, что плавка Ti и Fe с добавкой мшиметалла (Mm) активируют процесс гидрирования сплавов за счет образования на поверхностном слое участков с рыхлыми оксидами редкоземельных металлов. Обработка сплавов с добавкой никель-графенового катализатора в шаровой мельнице в атмосфере водорода смягчает условия активации композитов и улучшает кинетику гидрирования.

Ключевые слова: титан, железо, сплав, никель-графеновый катализатор, водород-аккумулирующий композит, хранение водорода, водородсорбционные характеристики

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 23-13-00418, <https://rscf.ru/project/23-13-00418/>.

Hydrogen absorption characteristics of modified TiFe intermetallides and their composites

Shamov I.D.,* Sanin V.V., Arbuzov A.A., Lototsky M.V., Tarasov B.P.

**Graduate student.*

*Institute of Problems of Chemical Physics and Medical Chemistry, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russia
E-mail: shamovid@icp.ac.ru*

The results of studies of the effects of methods for the production and pretreatment of modified TiFe intermetallides and their composites on the activation and sorption of hydrogen are presented. It is shown that melting of Ti and Fe with the addition of mishmetall (Mm) activates the process of hydrogenation of alloys due to the formation of areas with loose oxides of rare earth metals on the surface layer. The processing of alloys with the addition of a nickel-graphene catalyst in a ball mill in a hydrogen atmosphere softens the activation conditions of composites and improves the kinetics of hydrogenation.

Keywords: titanium, iron, alloy, nickel-graphene catalyst, hydrogen-accumulating composite, hydrogen storage, hydrogen absorption characteristics

Высокотемпературная реакторная ячейка с контролируемой атмосферой для «in situ» синхротронных рентген-дифракционных исследований

И.Г. Шептун,^{1*} А.Ю. Серегин,² О.Ю. Грапенко,¹ В.А. Шуваева,¹
Н.В. Тер-Оганесян¹

**Младший научный сотрудник, аспирант*

¹*Южный федеральный университет, научно-исследовательский институт физики,
Ростов-на-Дону, Россия*

²*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Курчатовский
комплекс синхротронно-нейтронных исследований, Москва, Россия*

E-mail: sheptun@sfedu.ru

Разработана высокотемпературная дифракционная ячейка TDC SR 600 для проведения in situ синхротронных рентгенодифракционных исследований фазовых переходов и структурных преобразований функциональных материалов. Устройство обеспечивает нагрев образцов в диапазоне 25–600 °C с точностью поддержания температуры ±0.5 °C. Конструкция адаптирована к условиям станции РКФМ КИСИ НИЦ «Курчатовский институт» и ориентирована на задачи импортозамещения. Предусмотрена возможность расширения функционала для работы в контролируемых газовых атмосферах и вакууме, а также проведения экспериментов с приложением электрического поля. Внедрение установки расширяет экспериментальные возможности исследования высокоэнтропийных оксидов и других перспективных материалов.

Ключевые слова: in situ дифракция, синхротронное излучение, фазовые переходы, высокотемпературная ячейка, функциональные материалы, высокоэнтропийные оксиды, катализаторы.

High-Temperature Reactor Cell with Controlled Atmosphere for In Situ Synchrotron X-Ray Diffraction Studies

I.G. Sheptun,^{1*} A.Yu. Seregin,² O.Yu. Grapenko,¹ V.A. Shuvaeva,¹ N.V. Ter-Oganessian¹

**Junior Researcher, Graduate student*

¹*Southern Federal University, Research Institute of Physics, Rostov-on-Don, Russia*

²*National Research Centre “Kurchatov Institute”,*

²*Kurchatov Synchrotron Radiation and Neutron Research Complex, Moscow, Russia*

E-mail: sheptun@sfedu.ru

A high-temperature diffraction cell TDC SR 600 has been developed for in situ synchrotron X-ray diffraction studies of phase transitions and structural transformations in functional materials. The device provides sample heating in the temperature range of 25–600 °C with temperature stability of ±0.5 °C. The design is adapted to the experimental conditions of the RKFM beamline at the Kurchatov Synchrotron Radiation Source and is oriented toward import substitution objectives. The system allows further functional expansion for operation in controlled gas atmospheres and vacuum, as well as for experiments under an applied electric field. Implementation of the setup significantly expands the experimental capabilities for studying high-entropy oxides and other advanced functional materials.

Keywords: in situ diffraction, synchrotron radiation, phase transitions, high-temperature cell, functional materials, high-entropy oxides, catalysts.

Синтез, спектральные характеристики и профиль возможной биологической активности комплексных соединений лантана (III), содержащих N- и O- донорные органические лиганды

Шубина А.А.,* Орлова Т.Н.

**Студент 4 курса*

*Институт фундаментальной и прикладной химии Ярославского государственного университета имени П.Г. Демидова, Ярославль, Россия
E-mail: annashubina100@gmail.com*

В настоящей работе приведены методики синтеза и исследование химическими и физико-химическими методами анализа двенадцати комплексных соединений с органическими лигандами различной природы (N- и O- донорные соединения, в том числе лекарственные вещества). Образование комплексов доказано методами электронной и ИК-спектроскопии, выполнен элементный анализ полученных соединений. Определены константы нестойкости спектрофотометрическим методом. Прогноз биологической активности (PASS Online) выявил появление у комплексов на основе фторхинолонов и доxorубина противоопухолевых свойств и общее снижение профиля токсичности, что делает полученные соединения перспективными для разработки новых лекарственных средств и функциональных материалов.

Ключевые слова: лантан, электронные спектры поглощения, комплексные соединения, органические лиганды, ИК-спектроскопия, константы нестойкости.

Synthesis, spectral characteristics, and profile of possible biological activity of lanthanum (III) complex compounds containing N- and O-donor organic ligands

Shubina A.,* Orlova T.

**Graduate student*

*Institute of Fundamental and Applied Chemistry, P.G. Demidov Yaroslavl State University,
Yaroslavl, Russia
E-mail: annashubina100@gmail.com*

This paper presents methods for the synthesis and investigation by chemical and physico-chemical methods of analysis of twelve complex compounds with organic ligands of various nature (N- and O-donor compounds, including medicinal substances). The formation of complexes was proved by electron and IR spectroscopy methods, and an elemental analysis of the obtained compounds was performed. The instability constants were determined by the spectrophotometric method. The forecast of biological activity (PASS Online) revealed the appearance of anticancer properties in complexes based on fluoroquinolones and doxorubicin and an overall decrease in the toxicity profile, which makes the obtained compounds promising for the development of new medicines and functional materials.

Keywords: lanthanum, electronic absorption spectra, complex compounds, organic ligands, IR spectroscopy, instability constants.

Взаимодействие оксида железа с 5-фторурацилом. Экспериментальное и расчетное исследование

Шумилкин А.С.,*^{1,2} Ермилов А.Ю.,¹ Верная О.И.,^{1,2} Шабатина Т.И.^{1,2}

**Аспирант 3 года обучения*

¹*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия*

¹*Московский государственный технический университет имени Н.Э.Баумана,
Москва, Россия*

E-mail: alexpard99@gmail.com

Представлены результаты квантово-химического моделирования взаимодействия оксида железа (FeO) с молекулой 5-фторурацила — одного из наиболее широко применяемых препаратов в химиотерапии злокачественных новообразований. Расчёты выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT) в варианте B3LYP. Определена мультиплетность основного состояния (квинтет), рассчитаны геометрические параметры комплексов 5-фторурацила с FeO, определены наиболее энергетически выгодные координационные центры 5-фторурацила и спектроскопические характеристики (ИК). Полученные данные позволяют обсуждать возможный механизм взаимодействия оксида железа с 5-фторурацилом, для дальнейшего применения для создания систем направленной магнитной доставки.

Ключевые слова: магнетит, 5-фторурацил, системы направленной магнитной доставки, метод функционала плотности, бидентатная координация, ИК-спектроскопия

Interaction of Iron Oxide with 5-Fluorouracil. Experimental and Computational Study

Shumilkin A.S.,*^{1, 2} Ermilov A.Yu.,¹ Vernaya O.I.,^{1,2} Shabatina T.I.^{1,2}

**Graduate student*

¹*M.V. Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia*

²*Bauman Moscow State Technical University,
Moscow, Russia*

E-mail: alexpard99@gmail.com

The report presents the results of quantum-chemical modeling of the interaction between iron (II) oxide (FeO) and the 5-fluorouracil molecule one of the most widely used drugs in chemotherapy. The calculations were performed within the framework of density functional theory (DFT) using the hybrid functional B3LYP. The geometric parameters of 5-fluorouracil complexes with FeO were calculated, the most energetically favorable coordination sites of 5-fluorouracil were determined, as well as the spectroscopic characteristics (IR spectra). The obtained data allow us to discuss the possible mechanism of interaction between iron oxide and 5-fluorouracil for further application in the development of targeted magnetic drug delivery systems.

Keywords: magnetite, 5-fluorouracil, targeted magnetic delivery systems, density functional theory, bidentate coordination, IR spectroscopy.

Исследование термоустойчивости полиэтилентерефталата (ПЭТ)

Щенявский Д.В.*

**Студент 4 курса*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия
E-mail: shcheniavskii.d21@physics.msu.ru*

Актуальной задачей лазерной физики и оптики является разработка доступных методов контроля волнового фронта (ВФ) широкоапертурных инфракрасных (ИК)-лазеров и крупногабаритных оптических систем. Перспективным решением является использование тальбот-интерферометрии, где ключевым элементом служит двумерная дифракционная решетка (ДР). Ведутся разработки ДР методом лазерной печати на полимерных пленках. Для применения в условиях энергетических нагрузок необходимы полимеры с повышенной термооптической стабильностью. В данной работе исследуется термоустойчивость полиэтилентерефталата (ПЭТ) – базового материала для печати решеток – при воздействии лазерного излучения. Экспериментальные данные получены методом прецизионной рентгеновской дифракции с использованием синхротронного излучения и методом атомно-силовой микроскопии. Установлено, что изменение кристалличности поверхности образцов в результате термообработки с 0.013 до 0.007 долей.

Ключевые слова: полиэтилентерефталат (ПЭТ), термоустойчивость, сферолиты.

Автор благодарит Каминскую Т.П. и сотрудников Московского политехнического университета за помощь в получении информации о поверхности образцов.

Study of thermal stability of polyethylene terephthalate (PET)

Chshenyavskiy D.V.*

*Student**

*M.V. Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow, Russia
E-mail: shcheniavskii.d21@physics.msu.ru*

A current challenge in laser physics and optics is the development of accessible methods for wavefront control of large-aperture infrared (IR) lasers and large-scale optical systems. A promising solution is the use of Talbot interferometry, where a two-dimensional diffraction grating serves as a key element. Diffraction gratings are being developed using the method of laser printing on polymer films. Polymers with enhanced thermo-optical stability are required for applications under energy loads. This work investigates the thermal stability of polyethylene terephthalate (PET) – the base material for printing such gratings – under laser irradiation. Experimental data were obtained using high-precision X-ray diffraction with synchrotron radiation and atomic force microscopy. It was found that the change in the crystallinity of the surface of the samples as a result of heat treatment increased from 0.013 to 0.007 fractions.

Keywords: Polyethylene terephthalate (PET), thermal stability, spherulites.

The author thanks T.P. Kaminskaya and the staff of the Moscow Polytechnic University for her assistance in obtaining information about the sample surfaces.

Селективное гидрирование примесей ацетилена в этилене на Pd–Ag катализаторах в условиях фронтальной схемы

Якубов К.Ш.,^{1*} Ваулина А.Е.,^{1,2} Баева Г.Н.,¹ Смирнова Н.С.,¹ Машковский И.С.,¹ Стахеев А.Ю.¹

**Аспирант*

¹*Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского Российской академии наук, Москва, Россия*

²*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047, г. Москва, Миусская площадь, 9
E-mail: komil405@gmail.com*

Исследовано влияние концентраций водорода и монооксида углерода на каталитические свойства Pd–Ag/Al₂O₃ катализаторов в реакции газофазного селективного гидрирования примесей ацетилена в смесях, обогащенных этиленом. Методами рентгенофазового анализа, просвечивающей электронной микроскопии и ИК-спектроскопии адсорбированного СО показано, что введение серебра приводит к формированию изолированных палладиевых центров, характерных для катализаторов типа single-atom alloy. Установлено, что биметаллические Pd–Ag катализаторы менее чувствительны к изменению состава газовой фазы по сравнению с Pd/Al₂O₃ и сохраняют высокую селективность по этилену даже при высоких концентрациях H₂ и в присутствии СО. Показано, что использование Pd–Ag катализаторов позволяет подавить неконтролируемый разогрев катализатора и повысить стабильность процесса в условиях, близких к фронтальной схеме гидрирования.

Ключевые слова: селективное гидрирование, ацетилен, палладий-серебряные катализаторы, single-atom alloy, этилен, фронтальное гидрирование, водород, монооксид углерода.

В работе использована методология, разработанная в рамках проекта РНФ 23-13-00301.

Selective hydrogenation of acetylene impurities in ethylene over Pd–Ag catalysts under front-end conditions

Yakubov K.,^{1*} Vaulina A.,² Baeva G.N.,¹ Smirnova N.S.,¹ Mashkovsky I.S.,¹ Stakheev A.¹

**Graduate student*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia*

E-mail: komil405@gmail.com

The effect of hydrogen and carbon monoxide concentrations on the catalytic properties of Pd–Ag/Al₂O₃ catalysts in the gas-phase selective hydrogenation of acetylene impurities in ethylene-rich mixtures was investigated. X-ray diffraction, transmission electron microscopy, and infrared spectroscopy of adsorbed CO revealed that the introduction of silver leads to the formation of isolated palladium centers characteristic of single-atom alloy catalysts. It was shown that bimetallic Pd–Ag catalysts are less sensitive to variations in gas-phase composition than Pd/Al₂O₃ and maintain high ethylene selectivity even at high H₂ concentrations and in the presence of CO. The use of Pd–Ag catalysts was demonstrated to suppress uncontrolled catalyst overheating and improve process stability under conditions close to the front-end hydrogenation scheme.

Keywords: selective hydrogenation, acetylene, palladium–silver catalysts, single-atom alloy, ethylene, front-end acetylene hydrogenation, hydrogen, carbon monoxide.

Безметалльный катализ в электрохимическом способе получения аммиака

**Дмитриев Д.А.,* Кузнецова И.И., Захаров В.Н., Культин Д.Ю., Лебедева О.К.,
Чернышев В.В., Асланов Л.А., Кустов Л.М.**

**Студент*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: amid2006dd@gmail.com*

В работе впервые с использованием микроволнового метода были синтезированы триазиновые кольца в узлах каркаса и молекулы 4,4-дипиридила как линкеры с ионами хлорида в качестве анионов. На основе полученного материала создан гибридный электрод-катализатор: графитовый субстрат и слой полимерного триазинового каркаса. Катализатор испытан в известной «зеленой» электрохимической реакции синтеза аммиака из водных растворов нитратов в стандартных условиях. Фарадеевская эффективность процесса составила около 30%.

Ключевые слова: безметалльный катализ, триазиновый каркас, электрохимическая реакция синтеза аммиака, экологическая химия, рентгенофазовый анализ

Работа выполнена при финансовой поддержке проектов: госзадания № АААА-А21-121011590083-9 и АААА-А21-122040600057-3. Микроволновый синтез образца выполнен на приборе NOVA 2S (КНР).

Metal-free catalysis in an electrochemical process for the production of ammonia

**Dmitriev D.A.,* Kuznetsova I.I., Zakharov V.N., Kultin D.Yu., Lebedeva O.K.,
Chernyshev V.V., Aslanov L.A., Kustov L.M.**

**Student*

*Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, Moscow, Russia
E-mail: amid2006dd@gmail.com*

In this work, for the first time, triazine rings in the nodes of the framework and 4,4-dipyridyl molecules in the linker nodes with chloride ions as anions were synthesized using the microwave method. Based on the obtained material, a hybrid electrode-catalyst was created: a graphite substrate and a layer of a polymer triazine framework. The catalyst was tested in the well-known "green" electrochemical reaction for the synthesis of ammonia from aqueous nitrate solutions under standard conditions. The Faraday efficiency of the process was about 30%.

Keywords: metal-free catalysis, triazine framework, electrochemical reaction of ammonia synthesis, green chemistry, X-ray phase analysis.

Оз-промотированное NH₃-СКВ оксидов азота на VW/TiO₂ нанесенном на сотовый носитель

Парамошин И.В.,^{1,2*} Бокарев Д.А.,¹ Баева Г.Н.,¹ Стахеев А.Ю.¹

**Студент 4 курса*

¹Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

E-mail: Paramochin@mail.ru

Введение озона в газовый поток перед катализатором СКВ (V-W/TiO₂) значительно улучшает его каталитические характеристики при 100–250 °С. Это улучшение обусловлено окислением NO озоном, которое происходит даже при комнатной температуре, с последующим восстановлением смеси NO + NO₂ по маршрутам быстрого СКВ, NO₂-СКВ и накопления NH₄NO₃ на поверхности катализатора.

Ключевые слова: селективное каталитическое восстановление (СКВ), NO_x, озон, вольфрам, ванадий, оксидные катализаторы.

O₃-assisted NH₃-SCR over VW/TiO₂ monolith catalyst

Paramoshin I.V.,^{1,2*} Bokarev D.A.,¹ Baeva G.N.,¹ Stakheev A.Yu.¹

**Student, 4th year*

¹ N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

² D.I. Mendeleev Russian University of Chemical Technology, Moscow, Russia

E-mail: Paramochin@mail.ru

The injection of O₃ upstream to the SCR catalyst, V₂O₅-WO₃/TiO₂, significantly improves its catalytic performance at 100–250 °C. This improvement is due to the oxidation of NO by ozone, which proceeds even at ambient temperature, and to the further reduction of the NO + NO₂ mixture as a result of fast SCR, NO₂-SCR and accumulation of NH₄NO₃ on the catalyst surface.

Keywords: selective catalytic reduction (SCR), NO_x, ozone, tungsten, vanadium, oxide catalysts.

Влияние металла (Fe, Co, Cu) на активность катализатора Me-FER в реакции разложения N₂O

Макова А.С.,^{*1,2} Кустов Л.М.^{1,2}

**Младший научный сотрудник*

¹*Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия*

²*Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
Москва, Россия*

E-mail: makovaas@ioc.ac.ru

Аннотация. В работе изучена активность металлсодержащих цеолитных катализаторов Me-FER (где Me – Fe, Co и Cu). Данные катализаторы были получены методом пропитки по влагоемкости растворами ацетилацетонатов соответствующих солей цеолита FER, синтезированного микроволно-гидротермальным способом. Были изучены физико-химические характеристики как исходного цеолита FER, так и приготовленных катализаторов Me-FER. Каталитические свойства полученных катализаторов были изучены в реакции разложения N₂O. Установлено, что катализатор Fe-FER продемонстрировал наилучшую активность в данной реакции.

Ключевые слова: цеолит ферриерит, FER, микроволновый синтез, металл-цеолитный катализатор, Me-FER, закись азота N₂O.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-73-30007).

Effect of metal (Fe, Co, Cu) on the activity of the Me-FER catalyst in the N₂O decomposition reaction

Makova A.S.,^{*1,2}Kustov L.M.^{1,2}

**Junior researcher*

¹*N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

²*National University of Science and Technology 'MISIS', Moscow, Russia*

E-mail: makovaas@ioc.ac.ru

The activity of metal-containing zeolite catalysts Me-FER (where Me is Fe, Co, and Cu) was investigated. These catalysts were obtained by incipient wetness method with solutions of acetylacetonate salts of the corresponding metals of FER zeolite synthesized by microwave hydrothermal method. The physicochemical characteristics of both the initial FER zeolite and the prepared Me-FER catalysts were studied. Investigation of the catalytic properties of the obtained materials in the N₂O decomposition reaction showed that the Fe-FER catalyst demonstrated the best activity in this reaction.

Keywords: ferrierite zeolite, FER, microwave synthesis, metal-zeolite catalyst, Me-FER, nitrous oxide N₂O.

Систематическое описание структур фаз внедрения

Гаранин Д.К.,* Засурская Л.А.

**Студент, 6 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
химический факультет, Москва, Россия
E-mail: dangar1999@vk.com*

Изучение структур фаз внедрения показало, что их можно описывать с точки зрения плотнейших шаровых упаковок и кладок, используя этот подход как один из уровней моделирования строения кристаллического вещества.

К плотноупакованным фазам внедрения относятся структуры, в которых атомы неметаллов-«гости» Н, В, С, N или О, имеющие относительно малые размеры, внедряются в пустоты между атомами металлов («хозяева»). Учитывая возможные способы упаковки металлов и тип пустот, занятых неметаллами, можно использовать удобный и простой символ описания строения фаз внедрения, предложенный Г.Б. Боким. Символ состоит из КЧ металла в упаковке атомов «хозяина», сингонии и цифры, соответствующей КЧ «гостя»-неметалла в занятой им пустоте. Так, гексагональные и кубические ПШУ металлов (ГПУ и КПУ) с КЧ 12 тогда можно обозначить как 12Г и 12К, а для ОЦК и простой гексагональной кладки (ПГК) с КЧ 8 – 8К и 8Г. Используя правила построения символов, получили следующие обозначения, которые дополнили структурными классами (СК) П.М.Зоркого. Используя данный подход и топологическое описание структуры с помощью СК, мы получаем более полное описание структур фаз внедрения как стехиометрического состава, так и при статистическом заполнении пустот. Приведены примеры использования этого подхода для описания структур карбидов вольфрама и других фаз внедрения.

Ключевые слова: фазы внедрения, шаровые упаковки, структурные классы, карбиды металлов, классификация кристаллов

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме № 121031300090-2 «Молекулярное строение и надмолекулярная организация индивидуальных веществ, гибридных и функциональных материалов».

Systematic description of the structures of the interstitial phases

Garanin D.K.,* Zasurskaya L.A.

**Student, 6th year specialist*

*Department of Chemistry Lomonosov State University, Moscow 119991, Russia
E-mail: dangar1999@vk.com*

A study of structures of interstitial phases revealed that they can be described in terms of densest sphere packings, using this approach as one of the levels of modeling of crystal structures. Examples are given of using this approach to describe the structures of tungsten carbides and other interstitial phases.

Keywords: interstitial phases, sphere packings, structural classes, metal carbides, classification of crystals.

Влияние серебра на эффективность работы палладиевых катализаторов селективного гидрирования диенов

Гетманова А.Д.,* Маслов И.А.

** Специалист*

ООО «Объединенный центр исследований и разработок» (ООО «РН-ЦИР»),

Москва, Россия

E-mail: AD_Getmanova@rdc.rosneft.ru

Изучено влияние серебра на эффективность работы палладиевых катализаторов селективного гидрирования для удаления диеновых углеводородов из изопентан-изоамиленовой фракции (ИиАФ), используемой для получения октанповышающей добавки. Катализаторы синтезировали методом пропитки гранул оксида алюминия растворами солей палладия и серебра, обеспечивающим «корочковое» распределение Pd. Методами SEM-EDS установлено, что палладий формирует поверхностный слой толщиной 35-60 мкм, в то время как серебро равномерно распределяется по всему объёму гранулы. Каталитические испытания показали, что промотирование серебром существенно повышает селективность процесса гидрирования одной двойной связи диеновых углеводородов. При использовании катализаторов, содержащих только Pd, наблюдается полное гидрирование изоамиленов, тогда как биметаллические Pd-Ag-катализаторы селективно гидрируют одну двойную связь диенов и не затрагивают изоамилены. Установлено оптимальное соотношение Ag/Pd = 17 в составе катализатора, при котором наблюдается конверсия диенов 98 %, обеспечивающая прирост целевых изоамиленов в продукте на 2,40 % при T = 50 °C, P = 0,5 МПа, ОСПС = 5 ч⁻¹. Данный катализатор обладает высокой селективностью при низких температурах, при которых не происходит образование нежелательных продуктов в процессе гидрирования ИиАФ.

Ключевые слова: палладий-серебряные катализаторы, селективное гидрирование диенов, изопентан-изоамиленовая фракция

The effect of silver on the efficiency of palladium catalysts for selective hydrogenation of dienes

Getmanova A.D.,* Maslov I.A.

**Specialist,*

United Research and Development Center LLC, Moscow, Russia

E-mail: AD_Getmanova@rdc.rosneft.ru

The effect of silver on the efficiency of palladium selective hydrogenation catalysts for the removal of diene hydrocarbons from the isopentane-isoamylene fraction (IiAF) used to produce octane-enhancing additives has been studied. The catalysts were synthesized by impregnating aluminum oxide granules with solutions of palladium and silver salts, providing a "crusty" distribution of Pd. Using SEM-EDS methods, it was found that palladium forms a surface layer with a thickness of 35-60 microns, while silver is evenly distributed throughout the entire volume of the pellet. Catalytic tests have shown that silver promotion significantly increases the selectivity of the hydrogenation process of one double bond of diene hydrocarbons.

Keywords: palladium-silver catalysts, selective hydrogenation of dienes, isopentane-isoamylene fraction

Катализаторы гидрирования CO₂ на основе СВС-ВЭС, полученные выщелачиванием под воздействием ультразвука

Ромазева К.А.,* Пугачева Е.В., Борщ В.Н.

**Аспирант 2-го года обучения*

*¹Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения
им. А.Г. Мерджанова
Черноголовка, Россия
E-mail: xenia.slepowa@yandex.ru*

Методом центробежной СВС-металлургии получены высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) состава FeCoNiCuMnAlx и FeCoNiCuCrMnAlx как прекурсоры новых катализаторов гидрирования CO₂. Описан процесс получения катализаторов из полученных сплавов путем выщелачивания в растворе NaOH под воздействием ультразвука с последующей стабилизацией раствором H₂O₂. Исследованы физико-химические характеристики прекурсоров и катализаторов. После воздействия ультразвука наблюдается повышение удельной поверхности образцов, а для катализатора FeCoNiCuMn также значительное повышение конверсии CO₂ при 300 °С с 2 % до 49 % при селективности по метану 86,6 %. В перспективе планируется оптимизация условий обработки, расширение состава прекурсоров и исследование новых областей применения таких материалов.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы; самораспространяющийся высокотемпературный синтез; ультразвуковое выщелачивание; полиметаллические катализаторы; гидрирование CO₂.

SHS-HEAs based catalysts of CO₂ hydrogenation obtained by ultrasonic leaching

Romazeva K.A.,* Pugacheva E.V., Borshch V.N.

**Graduate student*

*Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Problems of Materials Science (ISMAN)
Chernogolovka, Russia
E-mail: xenia.slepowa@yandex.ru*

FeCoNiCuMnAlx and FeCoNiCuCrMnAl high-entropy alloys (HEAs) were obtained by the SHS-method as precursors of new catalysts for CO₂ hydrogenation. The process of preparing catalysts from these alloys was described, involving leaching in NaOH solution under the influence of ultrasound, with subsequent stabilization of the solution H₂O₂. The physicochemical characteristics of precursors and catalysts were studied. After exposure to ultrasound, an increase in the specific surface area of the samples was observed, and for the FeCoNiCuMn catalyst CO₂ conversion at 300 °C increased significantly from 2% to 49%, with a methane selectivity of 86,6 %. In the future, optimization of processing conditions, expansion of the precursor compositions, and exploration of new applications for these materials are planned.

Keywords: high-entropy alloys; self-propagating high-temperature synthesis; ultrasonic leaching; polycatalytic catalysts; CO₂ hydrogenation.