



**II Коршаковская Всероссийская с
международным участием
конференция**

**«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»**

Программа и тезисы докладов

25-26 февраля 2021 г.

Москва



Василий Владимирович КОРШАК
(1909 - 1988)

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ РАН
ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
ИМ. А. Н. НЕСМЕЯНОВА РАН
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН
ПО ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ СОЕДИНЕНИЯМ

**II Коршаковская Всероссийская
с международным участием конференция**

**«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»**

Программа и тезисы докладов

ISBN 978-5-6046000-0-9

25-26 февраля 2021 г.

Москва

Председатель конференции – акад. РАН А.Р. Хохлов

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

акад. РАН Музафаров А.М. (*со-председатель*)

акад. РАН Берлин А.А.

чл.-корр. РАН Пономаренко С.А.

акад. РАН Егоров М.П.

чл.-корр. РАН Ярославов А.А.

акад. РАН Новаков И.А.

чл.-корр. РАН Чвалун С.Н.

член-корр. РАН Гришин Д.Ф.

д.х.н. Киреев В.В.

чл.-корр. РАН Куличихин В.Г.

д.х.н. Коршак Ю.В.

чл.-корр. РАН Озерин А.Н.

д.х.н. Якиманский А.В.

к.ф.-м.н. Николаев А.Ю. (ученый секретарь)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

д.х.н. Серенко О.А. (председатель)

д.х.н. Выгодский Я.С. (со-председатель)

д.ф.-м.н. Юдин В.Е.

д.х.н. Аскадский А.А.

д.х.н. Бадамшина Э.Р.

д.х.н. Даванков В.А.

д.х.н. Пономарев И.И.

д.х.н. Салазкин С.Н.

д.х.н. Шапошникова В.В.

д.х.н. Шифрина З.Б.

д.т.н. Андреева Т.И.

**II Коршаковская Всероссийская
с международным участием конференция
«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»**

Проводится при финансовой поддержке:



ПРОГРАММА
II Коршаковской Всероссийской с международным участием
конференции
«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»
(25-26 февраля 2021 г., Москва)

25/02/21, четверг

10:00-10:15	Открытие конференции: Академик РАН Хохлов А.Р., академик РАН Музафаров А.М., директор ИНЭОС РАН член-корр. РАН Трифонов А.А.	
Председатель: Серенко О.А.		
10:15-10:40	PL-1	Загадки химической физики <u>Берлин Ал.Ал.</u> ИХФ РАН, Москва, Россия
10:45-11:10	PL-2	В.В. Коршак - основатель химии полигетероариленов в России <u>Пономарев И.И.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
11:15-11:40	PL-3	Симметрия и структурная аддитивность в рядах низко- и высокомолекулярных ариленфталидов <u>Крайкин В.А., Гилева Н.Г., Янгиров Т.А., Фатыхов А.А., Иванов С.П., Даванков В.А., Ильин М.М., Салазкин С.Н.</u> УФИХ УФИЦ РАН, Уфа, Россия
11:45-12:10	PL-4	Инновации в развитии композиционных материалов на основе полиимидных матриц <u>Юдин В.Е., В.М.Светличный, А.Л.Диденко, Г.В.Ваганов, Л.А.Мягова, В.В.Кудрявцев</u> ИВС РАН, Санкт-Петербург, Россия
12:15-12:40	PL-5	Новые подходы к получению негорючих полимерных композиционных материалов на основе бензоксазиновых и эпоксидных связующих <u>Сиротин И.С.</u> РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
12:45-13:10	PL-6	Многомасштабное компьютерное моделирование полиэфиримидов и нанокompозитов на их основе <u>Ларин С.В.</u> ИВС РАН, Санкт-Петербург, Россия
13:15-14:00	Обед	
Председатель: Шапошникова В.В.		
14:00-14:20	O-1	Амфифильные олигомерные силсесквиоксаны и координационные полимеры переходных металлов (Co²⁺, Ni²⁺) на их основе <u>Шевченко В.В., Bliznyuk V.V., Гуменная М.А., Клименко Н.С., Стрюцкий А.В., Wang J., Vinek C., Чернякова М.Ю., Беликов К.Н.</u> Институт химии высокомолекулярных соединений НАН Украины, Киев

14:25-14:40	О-2	Динамическое формирование металл-полимерных контактов: моделирование из первых принципов <u>Сызганцева О.А., Сызганцева М.А.</u> Химический факультет, МГУ, Москва, Россия
14:45-15:00	О-3	О механизме роста лучей в синтезе звездообразных олигоимидов <u>А.А. Кузнецов, А.Ю. Цегельская, А.Е. Солдатова, Г.К. Семенова</u> ИСПМ РАН, Москва, Россия
15:05-15:20	О-4	Полифосфазены с регулируемыми молекулярно-массовыми характеристиками: от мономера до применения <u>Горлов М.В., Бредов Н.С., Есин А.С., Чернышева А.И., Солдатов М.А., Киреев В.В.</u> РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
15:25-15:40	О-5	Эпоксифосфазеновые олигомеры на основе резорцина <u>Биличенко Ю.В., Киреев В.В., Филатов С.Н.</u> РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия
15:45-16:00	О-6	Процессы самоорганизации в водных растворах амфифильных привитых сополимеров с полидиметилсилоксановой основной и поли-2-изопропил-2-оксазолиновыми боковыми цепями <u>Родченко С.В., Миленин С.А., Курлыкин М.П., Теньковцев А.В., Филиппов А.П.</u> ИВС РАН, Санкт-Петербург, Россия
16:05-16:20	О-7	Исследование трибологических свойств полиариленаэфиркетонов <u>Горошков М.В., Краснов А.П., Шапошникова В.В., Салазкин С.Н., Наумкин А.В.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
16:25-16:40	О-8	Получение термостойких полимерных изделий фотополимеризационными методами 3D-печати <u>Бурдуковский В.Ф., Холхоев Б.Ч., Бардакова К.Н., Тимашев П.С.</u> Байкальский институт природопользования СО РАН, Улан-Удэ, Россия
16:45-17:00	О-9	Молекулярно-динамический анализ топологии переплетений линейных макромолекул в полимерных наноккомпозитах с углеродными наночастицами <u>Логунов М.А., Орехов Н.Д.</u> Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

26/02/21, пятница

Председатель: Пономарев И.И.		
09:45-10:00		Академик Василий Владимирович Коршак - Воспоминания. <u>Валецкий П.М.</u>
10:00-10:25	PL-7	Успехи научной школы В.В. Коршака в области синтеза конденсационных полимеров - полиариленэфиркетонов <u>Шапошникова В.В., Салазкин С.Н., Крайкин В.А., Гилева Н.Г.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
10:30-10:55	PL-8	Использование природных соединений для синтеза кремнийорганических олигомеров и полимеров <u>Дроздов Ф.В.</u> ИСПМ РАН, Москва, Россия
11:00-11:25	PL-9	Микропористые и мембранные полимерные материалы на основе производных норборнена <u>Бермешев М.В.</u> ИНХС РАН, Москва, Россия
11:30-11:55	PL-11	Полиариленфталиды: от изолятора до сверхпроводника <u>Лачинов А.Н., Корнилов В.М., Юсупов А.Р.</u> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия
12:00-12:25	PL-10	Электроактивные полимеры ариламинов и композиты на их основе <u>Карпачева Г.П.</u> ИНХС РАН, Москва, Россия
12:30-12:55	PL-12	Мезомасштабное моделирование магниточувствительных полимерных нанокомпозитов на основе эпоксидных смол <u>Комаров П.В., Халатур П.Г., Хохлов А.Р.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
13:00-13:45	Обед	
Председатель: Сапожников Д.А.		
13:45-14:00	O-10	Violin scientific: методы QCM-D и Ленгмюра для исследования полимеров. <u>Долинин О.Г.</u> Компания МИЛЛАБ
14:00-14:15	O-11	Исследование конденсации фенилсодержащих силанолов и силоксанолов в среде аммиака <u>Анисимов А.А., Еришова Т.О., Никифорова Г.Г., Щеголихина О.И., Музафаров А.М.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
14:20-14:35	O-12	Кардовые ароматические простые полиэфиры: пленочные адгезивы в контактной системе солнечных элементов <u>Чеботарева А.Б., Кост Т.Н., Салазкин С.Н., Шапошникова В.В.</u> МГУ, НИИЯФ, Москва, Россия
14:40-14:55	O-13	Адсорбция кремнийсодержащих дендримеров: влияние химического состава, структуры и номера генерации <u>Курбатов А.О., Балабаев Н.К., Мазо М.А., Крамаренко Е.Ю.</u> Физический факультет МГУ, Москва, Россия
15:00-15:15	O-14	Новые ферроценилсодержащие ароматические дендримеры: синтез и электрохимические свойства <u>Чамкина Е.С., Чамкин А.А., Перегудов А.С., Шифрина З.Б.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия

15:20-15:35	O-15	Мультимасштабное моделирование механических и структурных свойств в смесях полимера и олигомера L-молочной кислоты <u>Глаголев М. К., Василевская В. В.</u> ИНЭОС РАН, Москва, Россия
15:40-15:55	O-16	Композиционные материалы на основе полиуретанового эластомера с механически управляемыми оптическими свойствами <u>Баленко Н.В., Шибеев В.П., Бобровский А.Ю.</u> Химический факультет, МГУ, Москва, Россия
16:00-16:15	O-17	Роль перколяционной сетки в структуре электроореологических жидкостей <u>Кузнецов Н.М., Загоскин Ю.Д., Ковалева В.В., Белоусов С.И., Чвалун С.Н.</u> НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
16:20-16:40	O-18	Влияние структуры компонентов синтеза полиуретанов на их молекулярную динамику и микрофазную структуру. Релаксационная твердотельная спектроскопия ЯМР <u>Останин С. А., Зуев В.В</u> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
16:45-17:05	O-19	Advanced plastic scintillators using functional pyrazoline type fluorophores <u>Bliznyuk V.N., Seliman A.F., Derevyanko N.A, Ishchenko A.A., DeVol T.A.</u> Department of Environmental Engineering and Earth Science, Clemson University, Clemson, United States
17:10	Закрытие конференции	

ДИНАМИЧЕСКОЕ ФОРМИРОВАНИЕ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫХ КОНТАКТОВ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Сызганцева О.А.¹, Сызганцева М.А.¹

¹ *Московский государственный университет, Химический факультет*

E-mail: osyzgantseva@gmail.com

Формирование металл-полимерных контактов играет ключевую роль при создании композитных полимерных материалов для применения в фотовольтаике, медицине, катализе, процессах экстракции и разделения. Локальная структура таких контактов предопределяет как функциональные свойства полимерных композитов, так и их механическую и химическую стабильность. С развитием вычислительного материаловедения стало возможным динамическое моделирование процессов формирования таких контактов из первых принципов. В данной работе с помощью метода *ab initio* молекулярной динамики исследован механизм сшивки цепей полиметакриловой кислоты катионами Ca^{2+} [1]. Выявлены характеристические паттерны взаимодействия Са-полимер, включая тип, количество и длины связей Са–О, а также максимальное количество полимерных цепей, координируемых одним катионом Ca^{2+} . Найдены времена образования кальциевых контактов и спонтанного замещения молекул воды в первой координационной сфере кальция в пикосекундном диапазоне (Рис.1). Проведено сравнение с другими полимерами, включая полиакриловую кислоту и алгинат [2]. Полученные данные по микроструктуре Са контактов позволяют оптимизировать состав компонентов при получении гидрогелей.

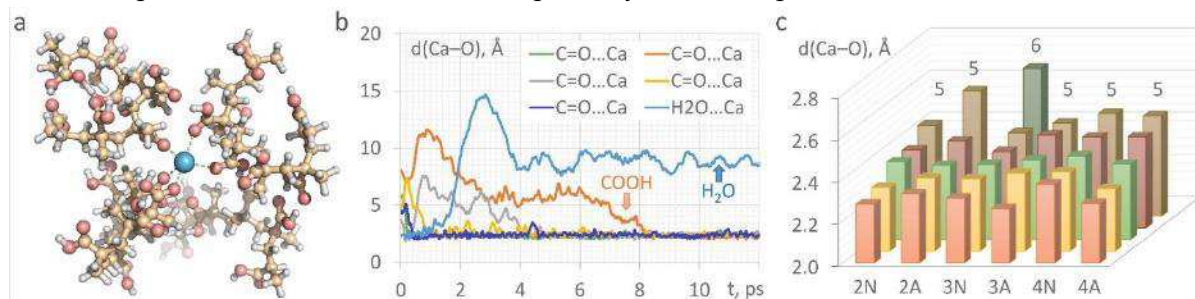


Рисунок 1. Локальная структура контактов Са – полимер: а – общая схема Са-сшивки цепей полиметакриловой кислоты; б – изменение расстояний Са – О в динамическом процессе образования Са сшивки; в – координационные числа и средние длины связей Са – О [1].

Благодарность

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

- [1] M.A. Syzgantseva, O.A. Syzgantseva. Structural insights on the metal cross-linking of polymers from the first principles: Calcium – Polymethacrylic acid case study // *Polymer* – 2021. – Vol. 215 C. 123368
- [2] S. Yang, L. Peng, O.A. Syzgantseva, O. Trukhina, I.V. Kochetygov, A. Justin, D.T. Sun, H. Abedini, M.A. Syzgantseva, E. Oveisi, G. Lu, W.L. Queen. Preparation of Highly Porous Metal–Organic Framework Beads for Metal Extraction from Liquid Streams // *JACS* – 2020. – Vol. 142 C. 13415–13425

СОДЕРЖАНИЕ

5	Информация о спонсорах Конференции
6-16	Программа
17-42	Пленарные доклады
43-61	Устные доклады
62-120	Стендовые доклады

II Коршаковская Всероссийская с международным участием
конференция

«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»

ISBN 978-5-6046000-0-9



ISBN 978-5-6046000-0-9

