

Институт проблем химической физики Российской академии наук



Этот выпуск журнала полностью составлен из обзорных статей, подготовленных сотрудниками Института проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН) — одного из ведущих институтов Отделения химии и наук о материалах РАН. В 1956 г. директором Института химической физики АН СССР (ИХФ), лауреатом Нобелевской премии академиком Н.Н.Семеновым совместно с членом-корреспондентом АН СССР Ф.И.Дубовицким в поселке Черноголовка близ подмосковного Ногинска был организован Филиал ИХФ, прежде всего с целью проведения крупномасштабных и специальных исследований процессов горения и взрыва. В 1972 г. Филиал был преобразован в Отделение ИХФ, а в 1991 г. это Отделение было реорганизовано в Институт химической физики в Черноголовке, ныне ИПХФ РАН.

Основными научными направлениями деятельности ИПХФ РАН являются:

- общие проблемы химической физики;
- строение и структура молекул и твердых тел, кинетика и механизм сложных химических реакций;
- химическая физика процессов горения и взрыва;
- образование и модификация полимеров;
- биологические процессы и системы.

При этом объединяющей основой проводимых в ИПХФ РАН исследований является изучение кинетики и механизма протекания разнообразных химических и биологических превращений.

Институт имеет уникальную экспериментальную базу: полигон; специализированные бронированные помещения, позволяющие проводить крупномасштабные исследования быстротекущих процессов; натурные химико-технологические и микробиологические установки; виварий; пилотные установки; криогенную технику; аналитический центр коллективного пользования, который был создан для экспериментальной поддержки работ, выполняемых в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ) и государственных научно-исследовательских

программ Министерства промышленности, науки и технологий.

Вычислительный центр института оснащен современным вычислительным комплексом RM 600 E60/E20 производства фирмы Siemens, интегрирован в компьютерную сеть Научного центра РАН в Черноголовке и предоставляет услуги институтам РАН Черноголовки, а также МГУ, МФТИ, МИФИ и многим другим институтам и вузам Москвы, Казани, Ростова-на-Дону, Иванова и иных городов. Организация мощного вычислительного центра в институте позволила сформулировать новые фундаментальные задачи исследования:

- создание программных средств для численного моделирования развития гидродинамической неустойчивости;
- развитие метода «индивидуальных частиц» для описания высокоэнергетических импульсных процессов;
- изучение фазовых переходов в органических кристаллах;
- квантово-химическое изучение механизма химических превращений в органических соединениях.

В институте разработаны программные комплексы нового поколения на базе массивно-параллельных технологий, что позволило сократить время расчетов в 10–20 раз и проводить прямое моделирование пожаро- и взрывоопасных ситуаций на химических и ядерных объектах.

В институте работают более 800 научных сотрудников, в том числе 109 докторов и 332 кандидата наук. На базе института успешно функционирует кафедра Московского физико-технического института. В 1995 г. ИПХФ РАН и химический факультет Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова создали филиал химического факультета МГУ, а в 1997 г. Подмосковный филиал МГУ с химическим, физическим и геологическим факультетами. В институте проходят практику и выполняют дипломные работы студенты старших курсов МГУ, МФТИ и других вузов, выполняют диссертационные работы аспиранты этих вузов. В ИПХФ работают три специализированных совета по

защите кандидатских и докторских диссертаций, существует аспирантура по 16 специальностям.

В последние годы наблюдается усиление интереса талантливой молодежи к научным исследованиям, чему определенно способствовало создание в Научном центре в Черноголовке системы непрерывного образования школа – вуз – аспирантура. В настоящее время в институте 30 студентов выполняют дипломные работы и более 30 человек обучаются в аспирантуре.

В институте проводятся исследования в рамках проектов Российского фонда фундаментальных исследований (ежегодно около 100 инициативных проектов), Европейского союза (INTAS), Международного научно-технического центра (МНТЦ), Федерально-целевых программ, по грантам Президента РФ для ведущих научных школ, а также совместные работы с более чем 50 отечественными и зарубежными университетами и институтами.

Широкая тематика исследований, охватывающая практически все основные направления химической физики, обусловила нынешнюю структуру ИПХФ РАН. В институте десять научных отделов: горения и взрыва, кинетики химических и биологических процессов, кинетики и катализа, экстремального состояния вещества, полимеров и композиционных материалов, строения вещества, фотохимии, функциональных неорганических материалов, химико-технологический, математический. Глубокие фундаментальные исследования позволили получить основополагающие результаты по этим направлениям.

Развиты методы точного расчета сложных поверхностей потенциальной энергии и динамики элементарных процессов. Разработана квантовая теория молекулярных перегруппировок. Теоретически и экспериментально определены константы скоростей важнейших элементарных реакций в газовой, жидкой и твердой фазах. Исследован механизм действия металлоферментов. На этой основе созданы чисто химические системы, осуществляющие фотокаталитическое выделение водорода и кислорода из воды, окисление метана, а также каталитическое восстановление водорода в мягких условиях.

Исследован механизм и развита общая теория горения конденсированных веществ. Разработаны методы управления горением. Изучены закономерности гетерогенного и фильтрационного горения.

Выполнены глубокие фундаментальные исследования состояния вещества, химических и фазовых превращений при высоких давлениях и температурах в сильных ударных и детонационных волнах. Исследованы теплофизические свойства плотной плазмы с сильным межчастичным взаимодействием. Изучены термодинамические и электропроводящие свойства газообразного и жидкого водорода при многократном ударно-волновом нагружении. Обнаружен переход водорода, гелия и ксенона в высокопроводящее (металлическое) состояние. Исследован процесс «диэлектризации» металлов, в частности, лития и натрия, при высоких динамических давлениях. Впервые в условиях динамического эксперимента измерено электросопротивление фуллерита C_{60} . Температурная зависимость сопротивления ударно-нагруженного фуллерита обратима и имеет вид, характерный для полупроводников.

В институте проводятся обширные исследования в рамках общей проблемы: строение молекулы – структура твердого тела – физические и химические свойства материалов. В результате получены и исследованы органические сверхпроводники и металлы, фотохромные материалы, суперионники, материалы с разнообразными механическими, электрическими и оптическими характеристиками, наноматериалы, фуллерены.

На основе химической модификации противоопухолевых цитостатиков различных классов путем включения в их структуру фрагментов нитроксильных радикалов, являющихся биоантиоксидантами, разработаны лекарственные препараты новых классов, обладающие широким спектром противоопухолевого действия, мембранопротекторы и антиоксиданты.

Впервые получены адекватные нитрозильные модели активных $[Fe-S]$ -центров негемовых протеинов — новый класс перспективных лекарственных препаратов. Разработаны новые методы синтеза этих комплексов, имеющих в своем составе одновременно две биохимические функциональные группы: $-NO$ (радио-, хемосенсибилизатор) и $-SR$ (антибактериальные и противовоспалительные агенты, ингибиторы ферментов, антиметаболиты).

Институт сочетает фундаментальные исследования с решением прикладных задач, разрабатывает и внедряет новые технологические решения и процессы. Немецкая фирма «Линде» приобрела у ИПХФ лицензию на высокоселективные процессы получения высших линейных α -олефинов на основе контролируемой димеризации и олигомеризации этилена и начала строить по этой технологии ряд заводов в Саудовской Аравии. Совместно с Югославской нефтехимической компанией «Нефтяная индустрия Сербии» разработан и опробован в опытно-промышленном масштабе процесс получения поли- α -олефиновых основ синтетических смазочных масел. По этой технологии в Нижнекамске (Татарстан) начато строительство первого в Российской Федерации завода по производству синтетических масел автомобильного назначения.

Для промышленной реализации технологии получения пестицидов пиридинового ряда ИПХФ РАН и Академией инженерной физики Китая была создана совместная российско-китайская компания «Сичуан Мяньян Лизр». В 1997 г. на заводе этой компании в г.Мяньян введено в эксплуатацию производство 3,6-дихлорпиколиновой кислоты и препарата лизр (аналога лонтрела).

На основе фундаментальных исследований неравновесных режимов фильтрационного горения разработаны экологически чистые технологические процессы и оборудование для переработки промышленных и бытовых отходов, а также низкосортного горючего сырья с получением тепловой и электрической энергии. Созданы промышленные установки по переработке закалочных масел (АО «Электросталь-маш», г.Электросталь Московской области) и бытового мусора (г.Лаппеенранта, Финляндия). В настоящее время заканчивается монтаж установки для мусоросжигательного завода в Москве.

В связи с активным участием института в коммерциализации своих результатов, ИПХФ РАН совместно с Академией народного хозяйства при Правительстве РФ и Британским Советом в 2001 г. создали Центр коммерциализации научно-технических разработок — новое структурное подразделение института. В задачи Центра коммерциализации входит проведение технологического аудита научных разработок, их правовое сопровождение и изучение рынка. Эксперты Британского Совета оказывают Центру помощь в проведении семинаров-тренингов по технологическому аудиту. Это начинание получило дальнейшее развитие. Призвав на необходимость подготовки кадров для инновационной сферы, в соответствии с соглашением между Российской академией наук, Московским государственным университетом им. М.В.Ломоносова, Правительством Московской области и Академией народного хозяйства при Правительстве РФ в конце 2002 г. было принято решение о создании Инновационно-технологического центра РАН на базе Научного центра в Черноголовке. Одним из направлений деятельности Инновационно-технологического центра станет

подготовка специалистов по технологическому менеджменту. Такая подготовка даст будущим исследователям профессиональные знания по коммерциализации новых разработок, умению оценивать коммерческий потенциал технологий, привлечению инвестиций для продвижения на рынок новых технологий, продуктов научной и научно-технической деятельности.

Институт принимает активное участие в международных и всероссийских научно-технических выставках. За последние пять лет сотрудники института участвовали в 61 выставке, в том числе в Ганноверской промышленной ярмарке, Салоне инноваций, новых технологий и изобретений в Питсбурге, «Химэкспо», «Экспогород», были победителями и лауреатами таких крупных международных выставок, как «Инновации. Новые материалы и химические продукты», «Наука. Научные приборы», «Салон промышленной собственности "Архимед"», национальной выставки «Технологии из России». На проходящей в Брюсселе 51-й выставке-салоне «Брюссель. Эврика-2002» разработки института получили высокую оценку жюри и были удостоены трех золотых, одной серебряной и одной бронзовой медалей.

Ежегодно сотрудники института по результатам научных исследований публикуют около 350 статей в российских и зарубежных журналах, делают около 400 докладов на российских и международных конференциях. За последние пять лет учеными института опубликовано 34 монографии, в том числе в таких издательствах, как Gordon & Breach, Elsevier, Springer, Kluwer Academic Publishers, Наука, Химия и др. Институт издает сборники работ по проблемам химической физики и физической химии, процессам горения и взрыва, химической кинетики, физики и химии полимеров. Институт владеет более чем 60 патентами на современные научно-технические разработки и технологии, среди них свыше 30 патентов получено за последние пять лет.

Институт выступает организатором многих научных российских и международных конференций и симпозиумов по вопросам горения и взрыва, химии и физикохимии олигомеров, физики и химии элементарных химических процессов, кристаллохимии, катализа.

Ряду ученых института присуждено почетное звание «Заслуженный деятель науки России». Среди наград ученым института, полученных уже в новом тысячелетии, премия Правительства РФ за разработку новой техники, Государственные премии РФ для молодых ученых за выдающиеся работы в области науки и техники, премии Европейской академии для молодых ученых России. В 2002 г. за комплекс экспериментальных и теоретических работ по исследованию свойств веществ в экстремальных условиях академику В.Е.Фортову присуждена престижная премия германского Общества Макса Планка.

Представленные в этом номере обзоры далеко не полностью отражают главные направления исследований в институте, среди которых многие предназначены скорее для физического научного сообщества.

Как уже отмечалось выше, одним из активно разрабатываемых научных направлений исследований в институте является химическая физика процессов образования и модификации полимеров, а именно, кинетика процессов образования и деструкции полимеров, макромолекулярный дизайн, межфазные явления в полимерах и композиционных материалах, создание и исследование полимеров и композиционных материалов с уникальными оптическими, электрическими и магнитными свойствами, теория строения макромолекул и фазообразования в полимерных материалах, развитие физических методов анализа полимерных материалов. В обзорах Г.В.Королева «Современные тенденции в развитии исследований микрогетерогенного механизма трехмерной радикальной полимеризации», а также

Д.П.Кирюхина и И.М.Баркалова «Цепные химические реакции при низких температурах» отражено как раз данное научное направление.

Другим направлением, объединяющим ведущиеся в институте исследования, является изучение кинетики, механизма и элементарных актов химических реакций. В этой связи несомненный интерес представляет изучение короткоживущих промежуточных частиц, участвующих в таких реакциях. Обзор Е.Я.Мисочко, А.В.Акимова и И.У.Гольдшлегера «Современные приложения метода матричной изоляции для изучения радикальных частиц, генерированных в атомомолекулярных химических реакциях» посвящен рассмотрению одного из самых мощных экспериментальных методов изучения промежуточных продуктов и его приложения к конкретным системам в современной химической физике. Особое внимание уделено изучению условий стабилизации радикальных интермедиатов, генерированных в криохимических реакциях, а также комбинированному использованию различных спектроскопических методов.

Фундаментальное направление исследований, связанное с активацией углеводородов комплексами переходных металлов, проводится в институте под руководством академика А.Е.Шилова. Некоторые аспекты этой проблемы рассматривает В.Д.Махаев в обзоре «Строение комплексов метана по данным экспериментальных и теоретических исследований», в котором анализируется влияние природы центрального атома металла и лигандов на координацию метана в комплексах с нейтральными атомами, ионами и молекулярными фрагментами, обсуждаются закономерности строения комплексов метана и проводятся аналогии со строением тетрагидроборатных комплексов.

Исследования в области кинетики и механизма термического разложения высокоэнергетических соединений, их химической стабильности и безопасности использования оставались на многие годы основным научным направлением члена-корреспондента РАН Ф.И.Дубовицкого. Результаты многолетних поисковых синтетических работ по получению новых представителей энергоемких соединений класса триазинов и их аналогов представлены в обзоре А.В.Шастина, Т.И.Годовиковой, Б.Л.Корсунского «Нитропроизводные 1,3,5-триазина. Синтез и свойства». В нем впервые систематизированы данные о новых производных 1,3,5-триазина, представляющих интерес в качестве энергоемких соединений, биологически активных веществ, реагентов для органического синтеза. При этом способность тринитрометильных групп в производных 1,3,5-триазина к реакциям нуклеофильного замещения представляет несомненный интерес для понимания механизма нуклеофильного ароматического замещения в гетероциклических соединениях.

Это лишь некоторые направления исследований нашего института. В одном из следующих номеров журнала «Успехи химии» мы планируем продолжить знакомство с нашими научными результатами. Получить более подробную информацию об институте можно на его web-сайте (<http://www.iscr.ac.ru>).

Директор ИПХФ РАН,
член-корреспондент РАН С.М.Алдошин