

# Итоги деятельности ИХТТМ СО РАН за 2020 год

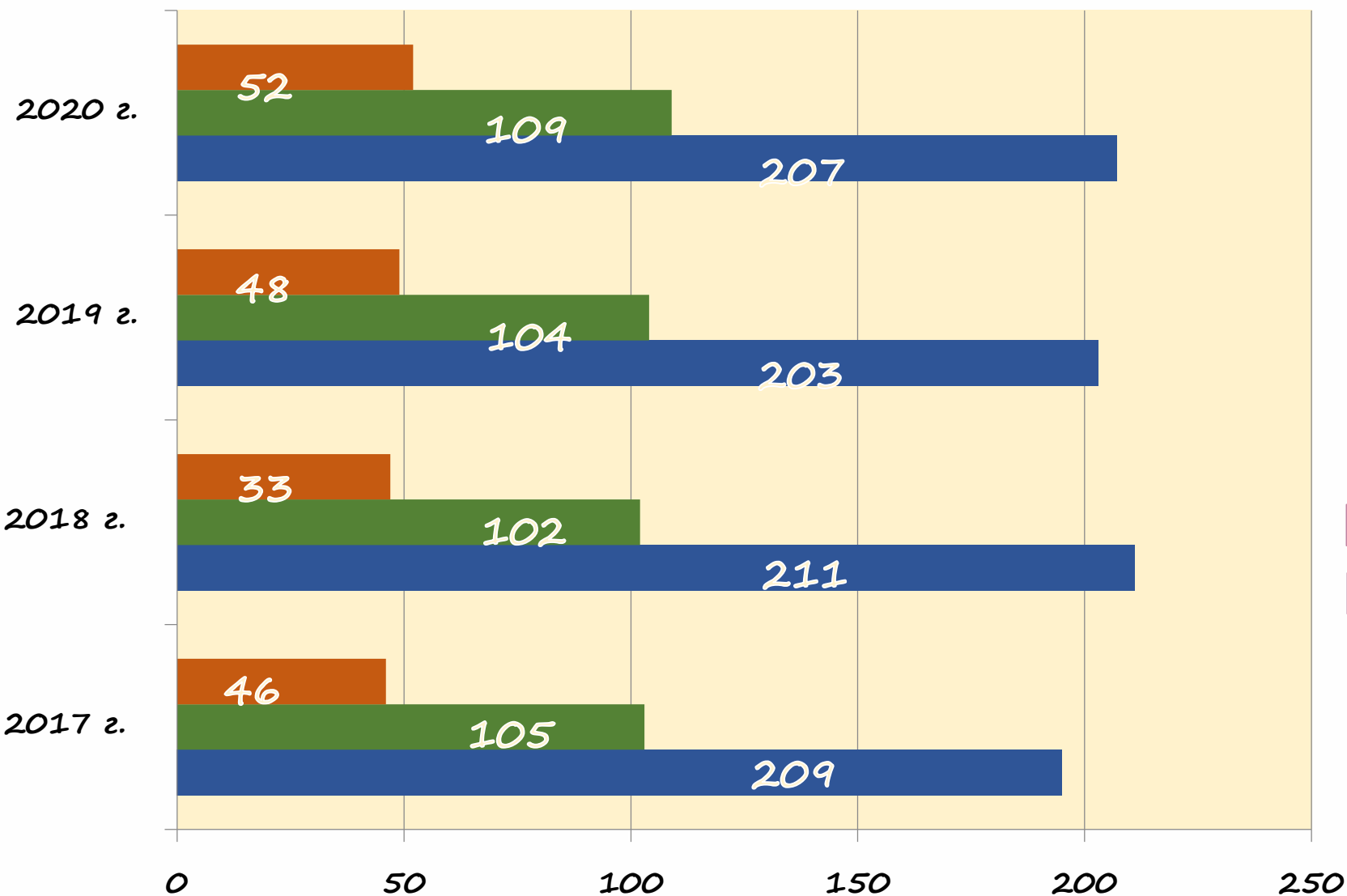
чл.-корр. РАН А.П. Немудрый

Институт химии твердого тела и механохимии

СО РАН  
**ИХТТМ**  
Институт химии  
твердого тела  
и механохимии

2021

# Численность сотрудников (без совместителей)

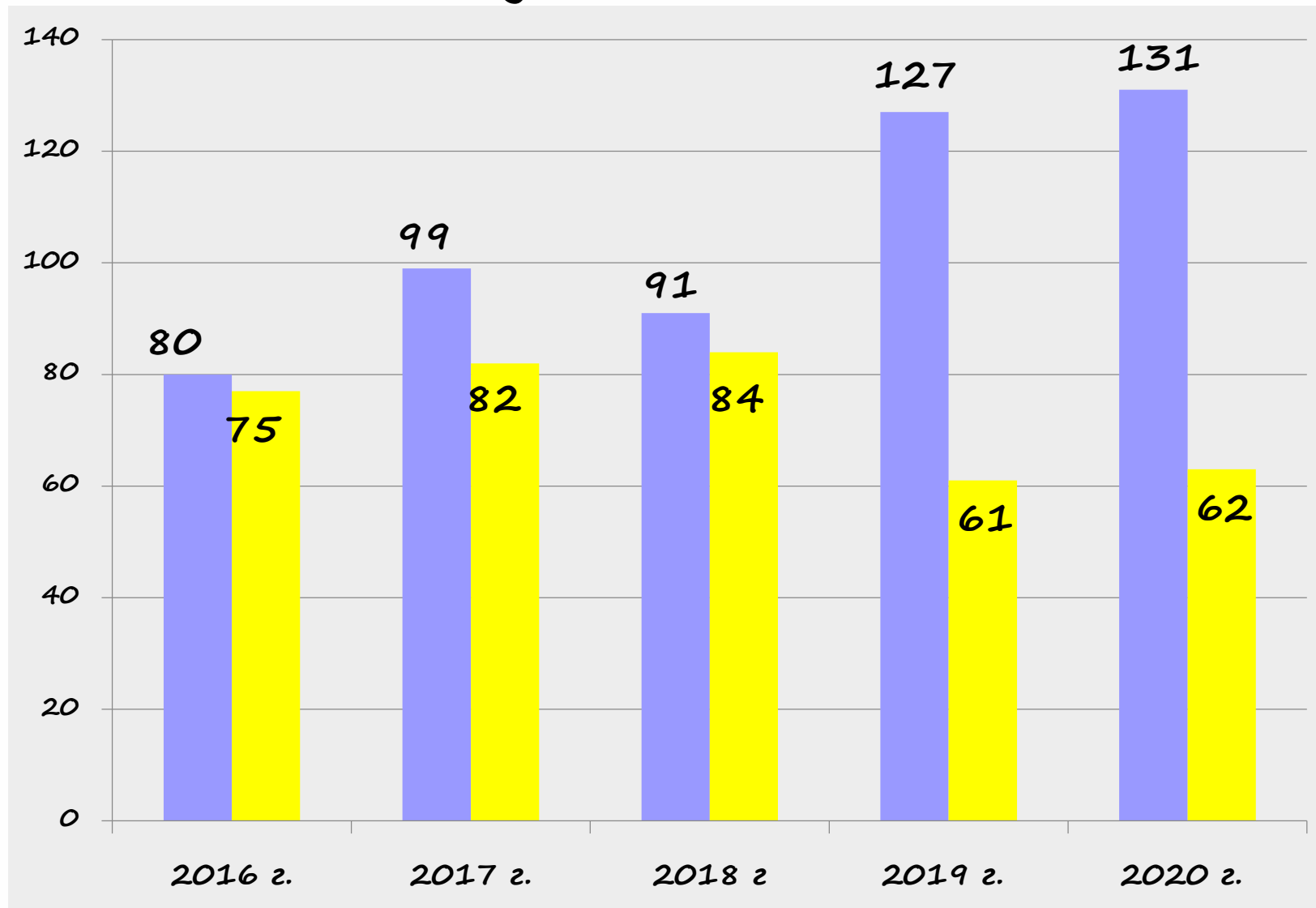


Штат: 207 чел.  
Исследователей: 109 из них  
академиков РАН: 1  
чл.-корр. РАН: 1  
докторов наук: 21  
кандидатов наук: 58

■ - исследователей  
■ - молодых исследователей до 39 лет

# Публикационная активность

## Опубликовано статей



■ - в зарубежных журналах    ■ - в российских журналах

## Публикационная активность

Индикатор	2018 г.	2019 г.	2020 г.
Количество публикаций в ведущих российских и зарубежных журналах	175	188	193 1.77 на НС
Научные монографии	1	3	3
Главы в монографиях	2	6	3
Число зарегистрированных патентов в России	1	4	7

Полное число охраняемых РИД в 2020 г. : 54 патента

## Гранты. Награды. Премии.

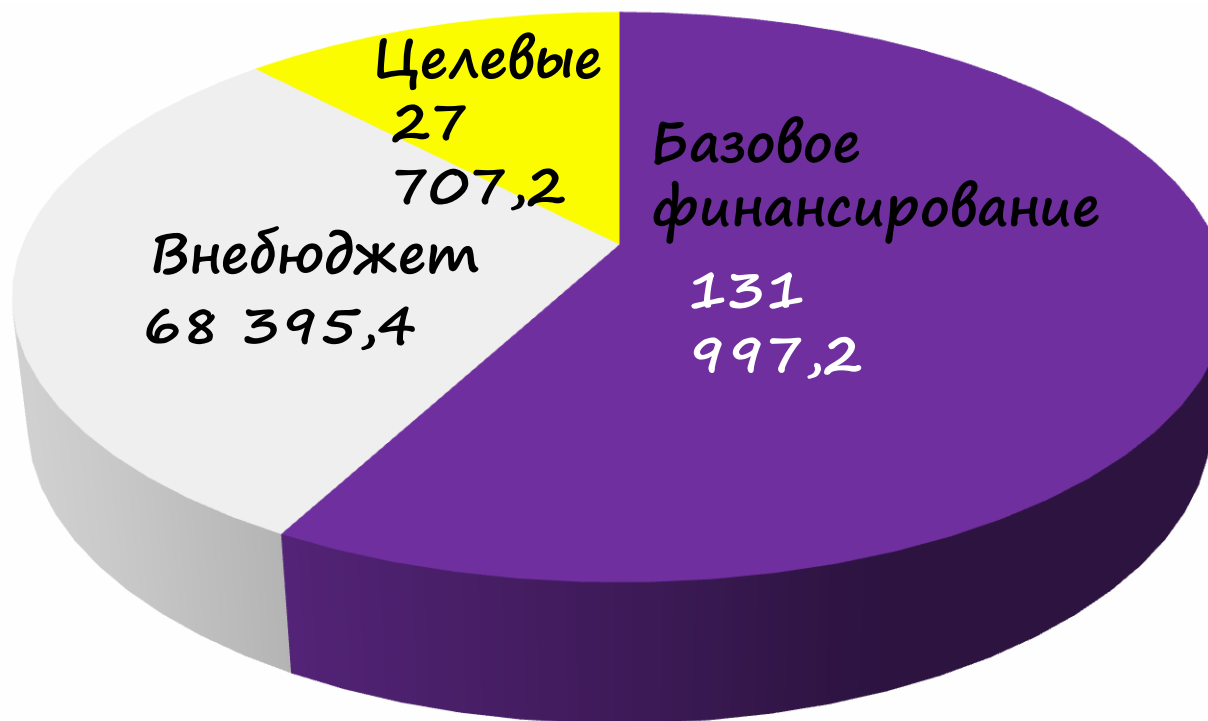


Гранты РФФ	5
Гранты РФФИ	15
Грант Президента РФ для поддержки молодых кандидатов наук	1
Стипендия Минобрнауки РФ за выдающиеся достижения в создании прорывных технологий и разработке современных образцов ВВСТ	2
Стипендия Президента РФ в 2018-2020 гг. для молодых ученых и аспирантов	3
Премия молодым учёным в сфере науки и инноваций мэрии г. Новосибирска	1
Именная премия Правительства НСО в номинации «Лучший молодой исследователь -2020»	3
Грант Германской службы академических обменов DAAD (2019-2020)	1
Благодарственное письмо Мэрии Новосибирска коллективу ИХТТМ СО РАН по итогам работы в 2020 году	

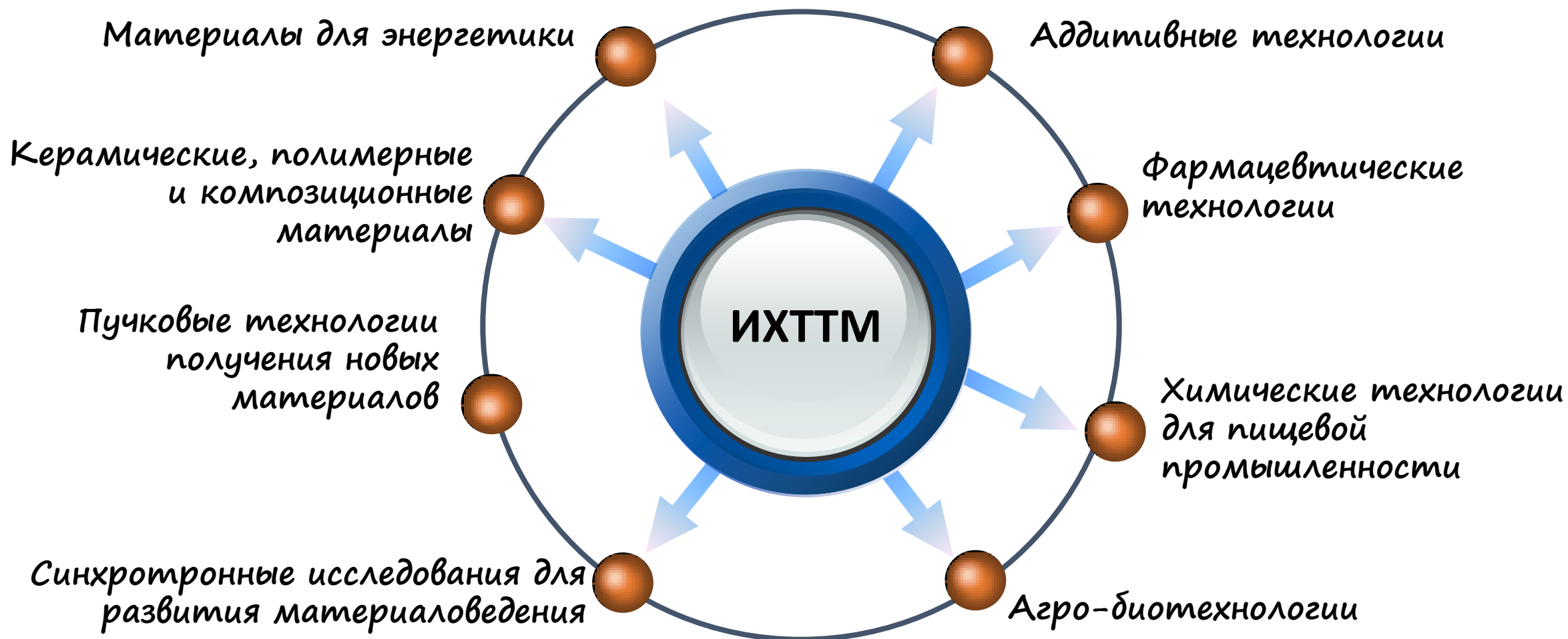
## Доходы

Доход, тыс. руб.	2018 г.	2019 г.	2020 г.
Всего поступлений	167 862,5	275 320,4	228 099,8
Бюджет	110 364,5	127 893,9	131 997,2
Внебюджет	57 447,0 (34,2 %)	104 292,5 (37,9 %)	68 395,4 (30 %)

2020 год

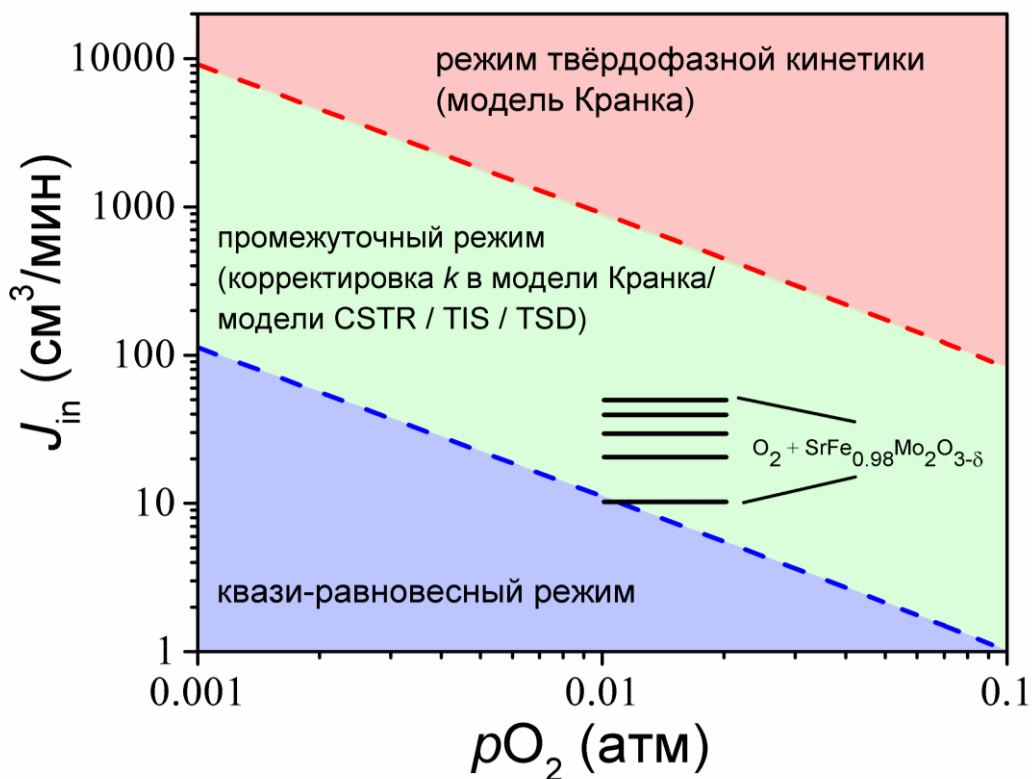


# Основные направления фундаментальных исследований, ориентированных на создание новых материалов и технологий



## Разработка математических моделей для исследования кинетики взаимодействия нестехиометрических оксидов с кислородом в газовой фазе

Авторы: чл.-корр. РАН Немудрый А.П., к.х.н. Чижик С.А.



Области реакционных условий (скорость потока газа, давление в реакторе), в которых применимы разработанные модели

Разработаны математические модели для описания кинетики реакций между твёрдой и газовой фазами в проточном реакторе.

Впервые показано, что невыполнение условия  $\Delta P = const$  приводит к зависимости определяемой константы поверхностной реакции  $k$  и коэффициента диффузии  $D$  от скорости потока  $J_{in}$  в реакторе.

Адекватность моделей подтверждена на экспериментальных данных по исследованию кинетики взаимодействия нестехиометрических оксидов с кислородом в газовой фазе в катодных материалах ТОТЭ.

Публикации:

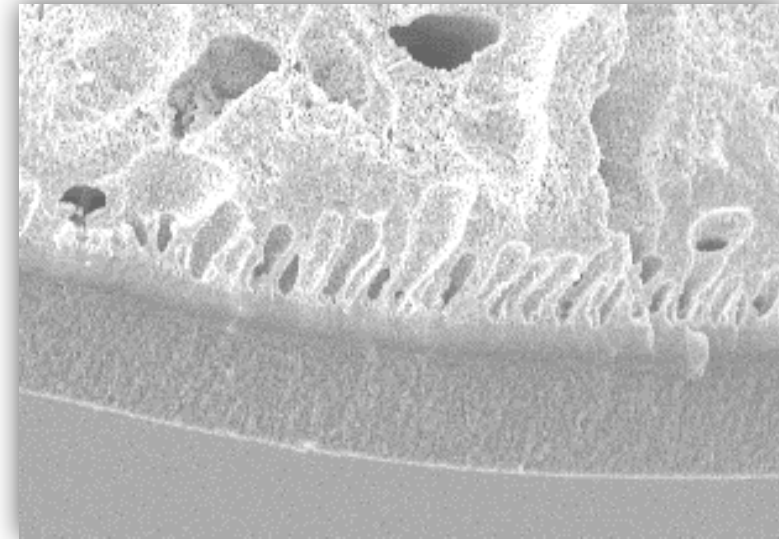
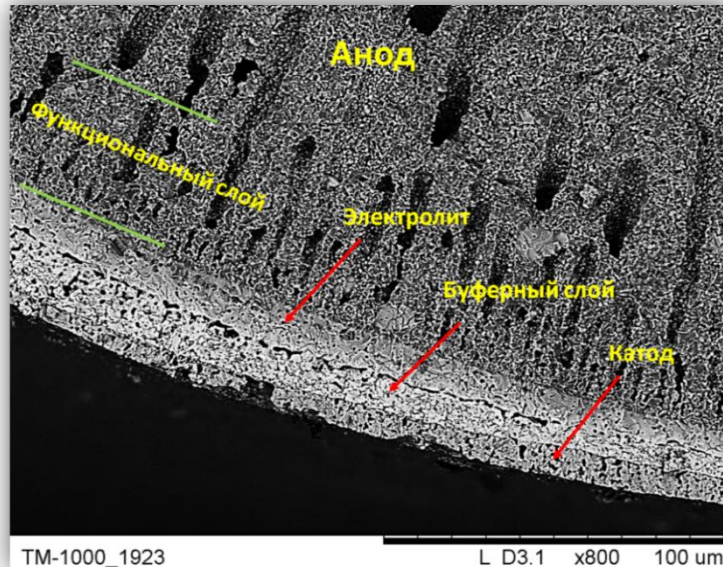
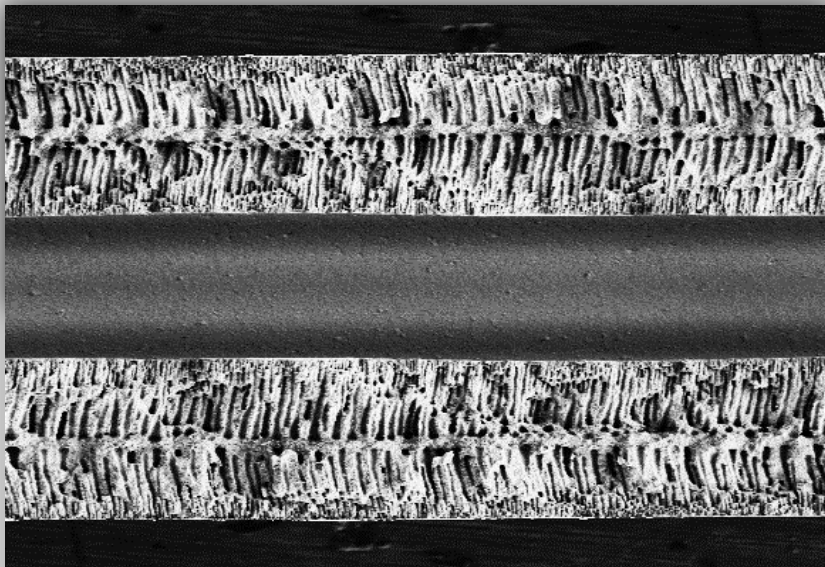
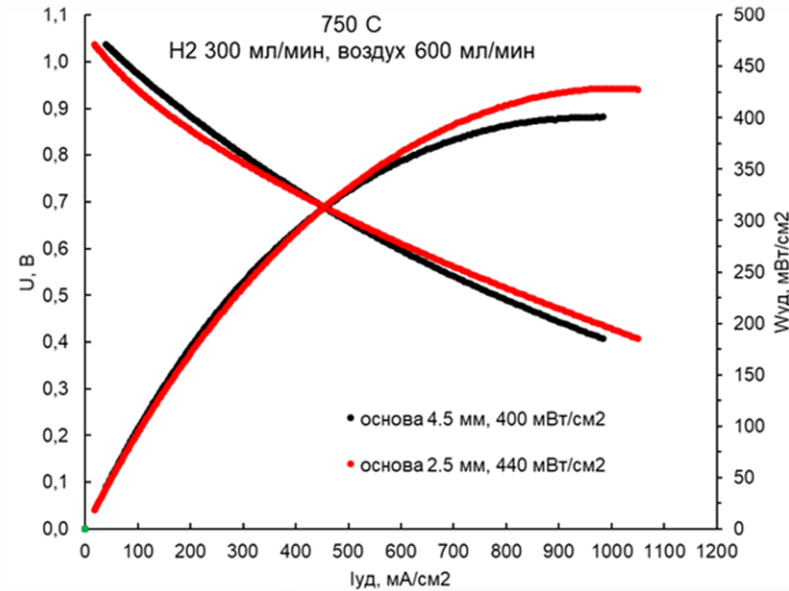
S.A. Chizhik, S.F. Bychkov, B.V. Voloshin, M.P. Popov, A.P. Nemudry. Development of the Crank's diffusion model for the case of material-gas feedback regime in gas flow reactors. Advanced methodology of oxygen partial pressure relaxation for the kinetics of oxygen exchange in nonstoichiometric oxides. *Chemical Engineering Journal*, Available online 13 November 2020, 12771;

<https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127711>;

Q1, IF=10.65



Совместно с ООО «НИЦ «ТОПАЗ», входящим в ГК ИнЭнерджи

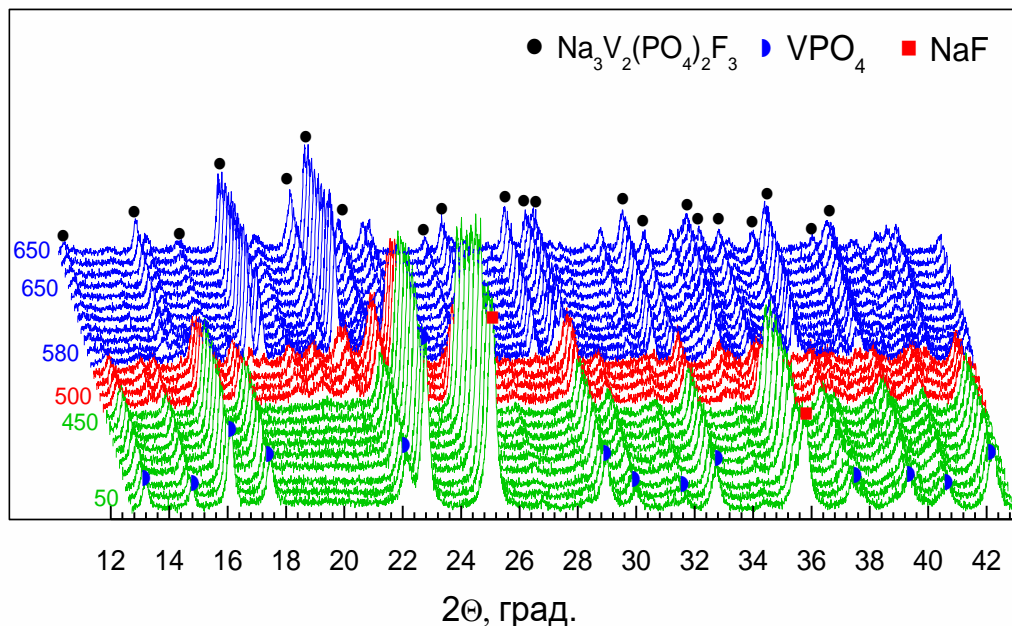


# $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$ – перспективный катодный материал для

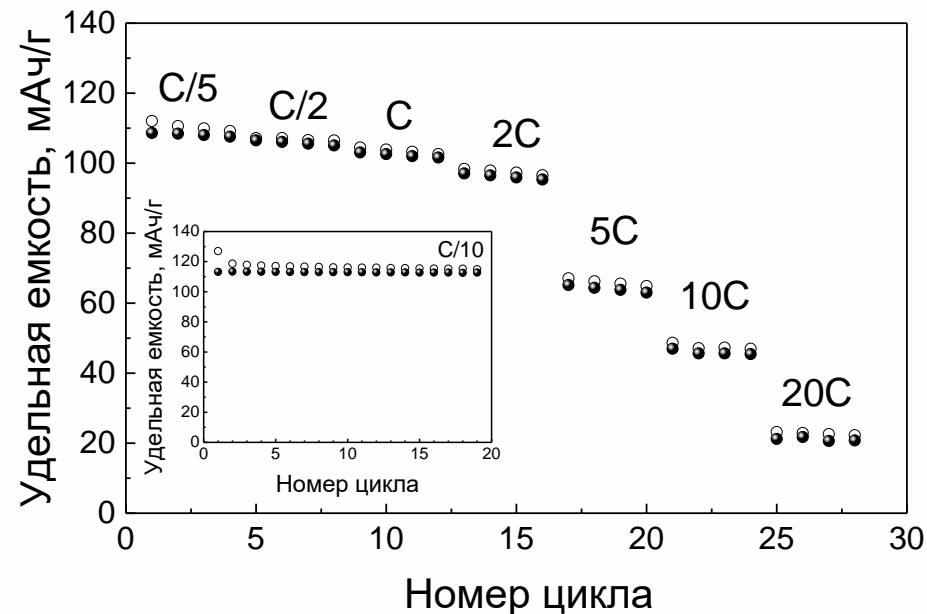
**НИА**

Авторы: к.х.н. Н.В. Косова, к.х.н. Д.О. Семькина, к.х.н. О.А. Подгорнова

Ультратыстрый твердофазный синтез  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$  из механически активированной смеси  $\text{VPO}_4$  с  $\text{NaF}$  (продукт образуется в течение 2–3 мин при температуре  $580^\circ\text{C}$ ).



Избранные дифрактограммы продуктов взаимодействия  $\text{VPO}_4$  с  $\text{NaF}$  при нагревании, полученные с использованием СИ.



Зависимость удельной емкости  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$  от номера цикла (во вставке) и скорости циклирования

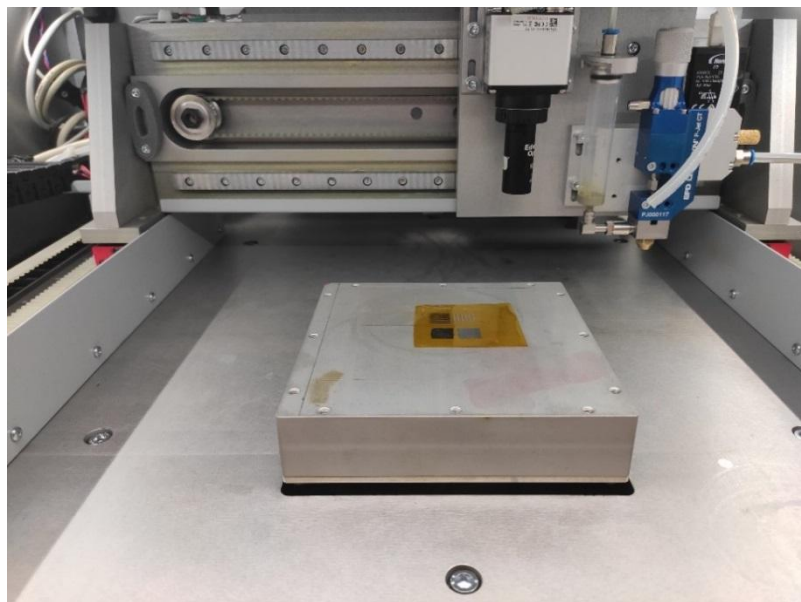
**Публикации:**

Semykina D.O., Yakovlev I.V., Lapina O.B., Kabanov A.A., Kosova N.V. // *PhysChemChemPhys*. – 2020. – V. 22. – P. 15876–15884.

Подана заявка на патент «Способ получения композиционного катодного материала на основе  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$  для натрий-ионных аккумуляторов».

## Оборудование для цифровой 2D и 3D-печати методом инжектирования

Спроектирован и изготовлен в ИАиЭ СО РАН по техническому заданию ИХТТМ СО РАН  
Лабораторный исследовательский 3D-принтер для нанесения низковязких и высоковязких композиций на различные подложки и лазерной постобработки.



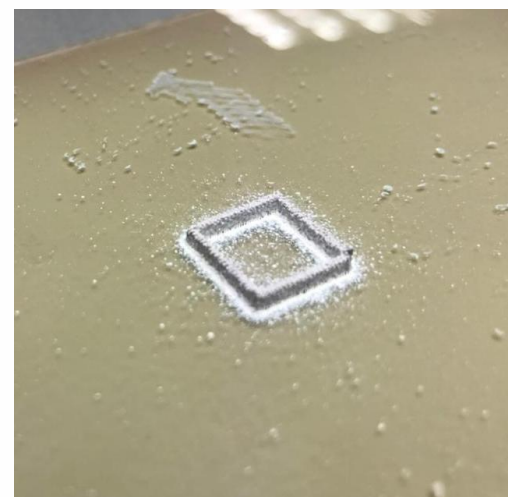
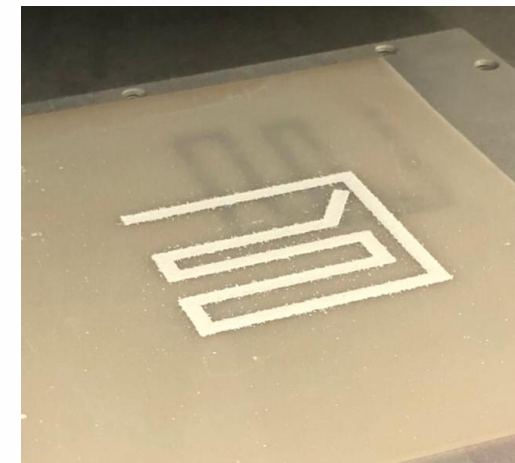
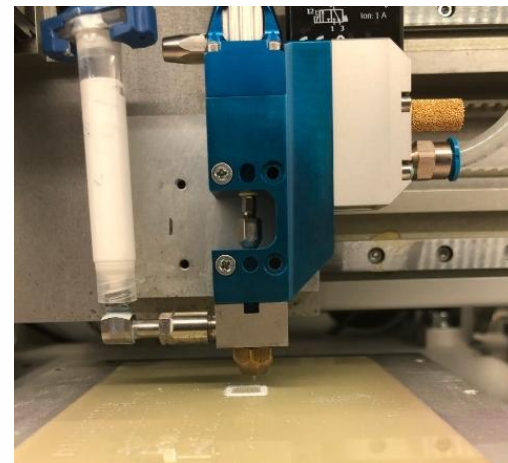
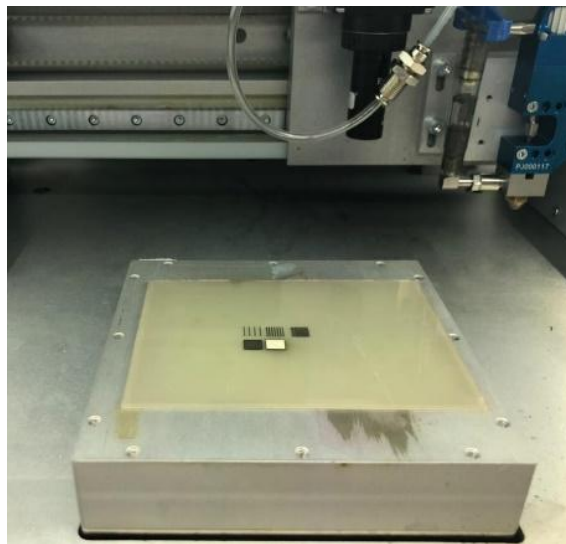
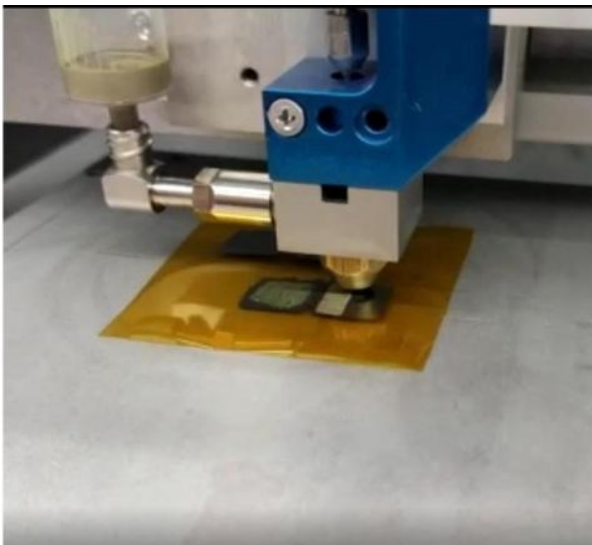
Характеристика	Значение
Вязкость композиций	10 – 10000 мПа*с
Размер частиц	1 нм – 10 мкм
Разрешение при печати	от 30 мкм (x,y)
Максимальный размер изготавливаемого изделия	110x110x120 мм
Толщина слоя	0,1 – 100 мкм
Лазер	1060 нм, мощность 20 Вт

Принтер совмещает возможность использования различных систем дозирования материала для прямой печати методом инжектирования и систему лазерной обработки.

Принтер имеет трехкоординатные системы позиционирования диспенсеров и лазерного луча (10x10x15 см) с подогреваемым столиком для формирования 2D и 3D объектов, а также систему технического зрения и герметичную камеру построения изделия со вводами для подачи инертных газов.

ИАиЭ СО РАН по техническому заданию ИХТТМ СО РАН ведется сборка и тестирование 3D-принтера для печати керамических и композиционных материалов методом селективного лазерного спекания слоя порошка.

## Примеры печати с использованием лабораторного исследовательского 3D-принтера



Электропроводящие элементы, сформированные печатью композиций на основе наночастиц металлов (Ag, Cu, Ni) и сплавов на полимерных пленках

Трехмерные тестовые объекты из YSZ для изготовления ТОТЭ

Двумерные тестовые объекты из YSZ, лазерное спекание

### Возможности

- Формирование 2D и 3D объектов с использованием чернил и паст на подложках различной природы, в том числе на гибких;
- Лазерная постобработка, нанесение лазерной маркировки;
- Селективное лазерное спекание/сплавление при послойном формировании объектов

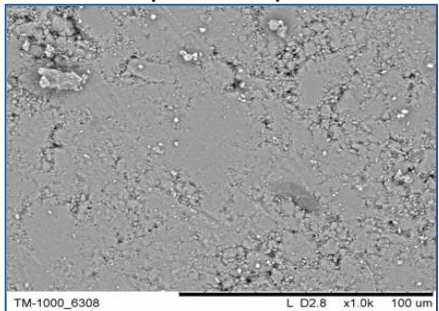
# Разработка методики синтеза замещенных гидроксиапатитов медицинского назначения и применения их для 3D печати биорезорбируемых керамических имплантатов

Авторы: к.ф.-м.н. Булина Н.В., д.х.н. Хвостов М.В., к.х.н. Титков А.И., академик Ляхов Н.З.

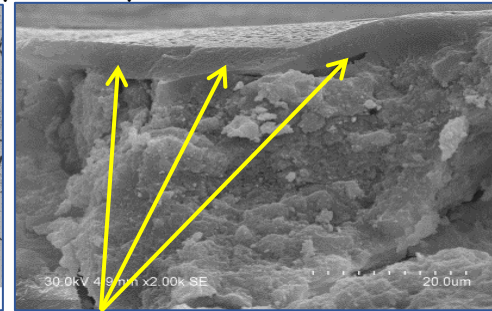
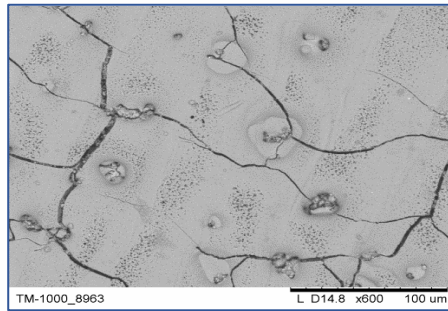
- ❑ Разработан механохимический способ синтеза перспективного керамического материала для медицины – гидроксиапатита, содержащего катионы цинка и анионы карбоната и силиката, который способствует пролиферации клеток костной ткани и эффективной интеграции в родную костную ткань.
- ❑ Разработана методика позволяющая осуществлять конгруэнтное плавление гидроксиапатита путем лазерной обработки порошкового материала. Найдены условия, позволяющие осуществлять быструю печать керамических изделий методом селективного лазерного плавления при использовании CO<sub>2</sub>-лазера с диаметром пятна 0,2 мм и скорости сканирования 600 мм/с.

## Поверхность таблетки

до лазерной обработки



после лазерной обработки



Слой, расплавившийся при лазерной обработке



Импантируемый материал и место костного дефекта черепа крысы через 4 месяца после имплантации

## Публикации:

1. M.V. Khvostov, M.S. Borisova, N.V. Bulina, S.V. Makarova, N.B. Dumchenko, T.G. Tolstikova, N.Z. Lyakhov. Influence of zinc and silicate ion on biological properties of hydroxyapatite synthesized by mechanochemical method // *Ceram. Intern.*, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.12.083>
2. Н.В. Булина, С.Г. Баев, С.В. Макарова, А.И. Титков, В.П. Бессмельцев, Н.З. Ляхов. Лазерная обработка компактированных образцов гидроксиапатита // *ХИУР*, 2020, 28, 3-9.

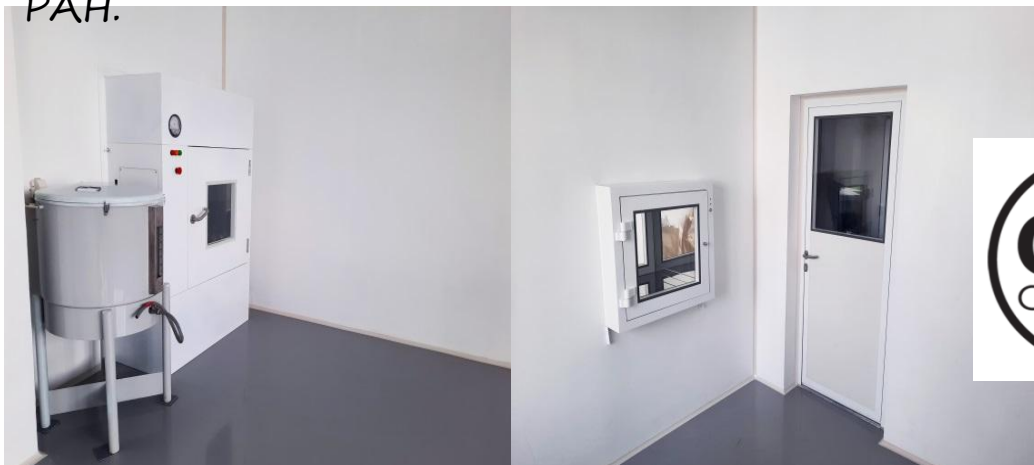
## Висмут-содержащие лекарственные субстанции



На фармацевтической компании Велфарм (г. Курган) запущен цех для производства противоязвенного препарата «Витридинол», входящей в список стратегически важных лекарственных средств.



Технология производства лекарственной субстанции «Висмута трикалия дицитрата» разработана ИХТТМ СО РАН.



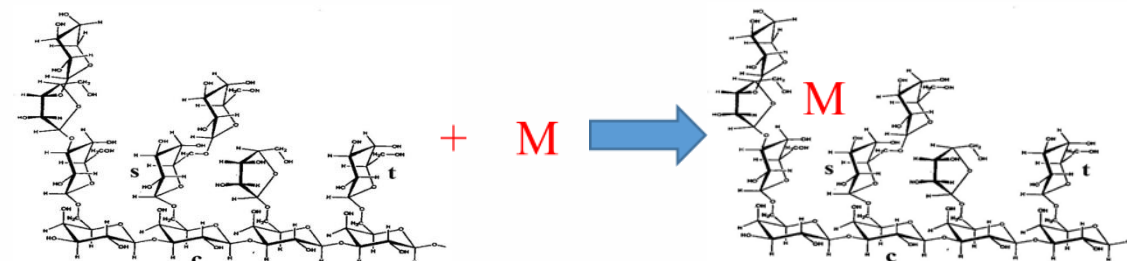
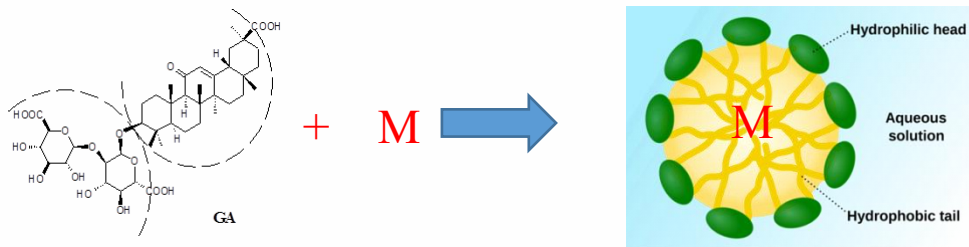
Проведен капитальный ремонт производственного участка по стандартам GMP на территории ИХТТМ СО РАН для производства лекарственных субстанций.

## Создание, исследование и применение супрамолекулярных систем «доставки» биологически активных веществ

Д.х.н. Душкин А.В., д.х.н. Толстикова Т.Г., д.б.н. Мордвинов В.А., д.х.н. Поляков Н.Э., д.т.н. Халиков С.С.: НИОХ СО РАН, ИЦиГ СО РАН, ИХКГ СО РАН, Институт элементоорганических соединений РАН, Институт фундаментальной и практической паразитологии РАН

### Методология исследований:

конструирование твердых дисперсий составов: биологически активное вещество – вспомогательные компоненты, образующие супрамолекулярные структуры – мицеллы и межмолекулярные комплексы



- исследование структуры, свойств и межмолекулярных взаимодействий в твердых многокомпонентных дисперсиях методами РФА, ДСК, ИК и СЭМ;
- исследование условий и оптимизация методов механохимического получения твердых дисперсий, механизмов их растворения, межмолекулярных взаимодействий и свойств водных растворов – используемые методы ВЭЖХ, ГП ВЭЖХ, ЯМР-спектроскопия, ;
- исследование биофизических характеристик водных растворов методами фазовой растворимости, трансмембранной проницаемости и моделирования биодоступности *in vitro*;
- исследование специфических видов фармакологической активности, токсичности, определение действующих доз;
- обобщение комплекса результатов, патентование, публикации в научных журналах, разработка проектов НТД, поиск «заказчиков».

**Результаты** – получение лекарственных, ветеринарных препаратов и БАД повышенной эффективности, снижение действующих доз до 10–100 раз или соответствующее повышение биологического действия

## Супрамолекулярный комплекс празиквантеля и фенбендазола с сапонинами солодки

Авторы: д.х.н. Душкин А.В., к.х.н. Метелева Е.С., к.х.н. Евсеенко В.И.

Механохимическим методом синтезирован супрамолекулярный комплекс празиквантеля и фенбендазола с сапонинами солодки, которые обладают повышенной фармакологической/антигельминтной активностью.

Эффективность действия при однократном пероральном введении против паразитов – *Opisthorchis felineus*, *H. Nana* и *M. expansa* у овец:

**эффективность лечения > 98 % – супрамолекулярный комплекс празиквантеля и фенбендазола с сапонинами солодки**

**эффективность не более 40 % – официальный препарат празиквантеля и фенбендазола в эквивалентных дозах**

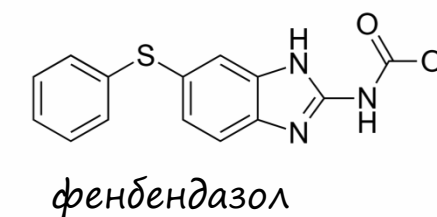
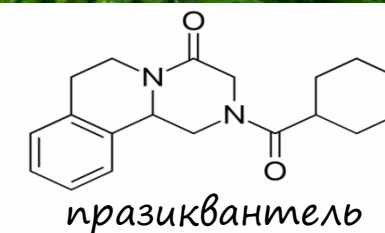


### Публикации:

1. Arkhipov, S. Khalikov, A. Dushkin, K. Sadov, E. Meteleva, M. Arisov, A. Varlamova. Anthelmintic efficacy of supramolecular complex of praziquantel obtained by mechanochemical technology // Iranian Journal of Parasitology. 2020. V. 15. P. 364-373

2. Архипов И.А., Варламова А.И., Халиков С.С., Садов К.М., Душкин А.В. Влияние механохимической технологии на антигельминтную эффективность супрамолекулярных комплексов фенбендазола с экстрактом солодки // Российский паразитологический журнал. 2020. Т. 14, №1. С. 70-74.

3. D.F. Avgustinovich, M.A. Tsyganov, M.Y. Pakharukova, E.N. Chulakov, A.V. Dushkin, V.P. Krasnov, V.A. Mordvinov. Effectiveness of repeated administration of Praziquantel with Disodium Glycyrrhizinate and two enantiomers of Praziquantel on *Opisthorchis felineus* (Rivolta, 1884) // Acta Parasitologica. 2020. V. 65. P. 156-164.





## Пестициды для защиты злаковых культур на основе супрамолекулярных комплексов тебуконазола

Авторы: д.х.н. Душкин А.В., к.х.н. Метелева Е.С., к.х.н. Евсеенко В.И., д.х.н. Поляков Н.Э., Селюткина

О.Ю.

Природные полисахариды и сапонины – вещества, создающие супрамолекулярные структуры, а также обладающие фунгицидным, противобактериальным и ростостимулирующим действием

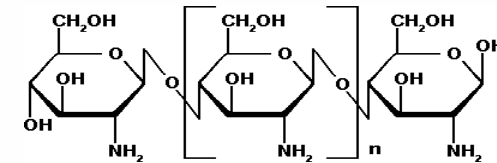


В рамках исследований по созданию «экологических» пестицидов на основе природных нетоксичных для человека компонентов (и их метаболитов):

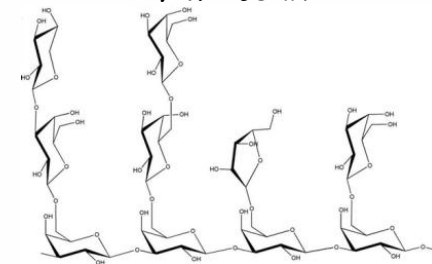
1. Впервые получены пестицидные препараты на основе тебуконазола в виде супрамолекулярных комплексов – с целью их использования как средств защиты зерновых культур от грибковых и бактериальных инфекций.
2. Проведены физико-химические и биофизические *in vitro* и *in vivo* исследования в лабораторных и опытно-полевых условиях при обработке семян и посевов злаковых культур.
3. Использование разрабатываемых пестицидов при возделывании яровой пшеницы, в качестве фунгицидов или индукторов защитных механизмов, **приводит к повышению урожайности на 0,55 и 0,6 т/га при снижении дозы тебуконазола в 5 раз.**

### Публикации:

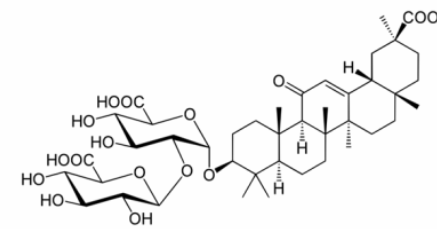
1. Е.С. Метелева, В.И. Евсеенко, О.И. Теплякова, О.В. Кулагин, О.Ю. Селюткина, Н.Э. Поляков, А.В. Душкин, Н.Г. Власенко. Инновационные средства защиты яровой пшеницы на основе хитозана, полученные методами механохимии // Химия в интересах устойчивого развития. 2020. Т. 28. С. 57–65.
2. O.Yu. Selyutina, S.S. Khalikov, N.E. Polyakov, Arabinogalactan and glycyrrhizin based nanopesticides as novel delivery systems for plant protection // Environmental Science and Pollution Research. 2020. V. 27(6). P. 5864–5872.
3. О.И. Теплякова, Н.Г. Власенко, А.В. Душкин. Супрамолекулярные комплексы тебуконазола с веществами экстракта корней солодки эффективные фунгициды для защиты яровой пшеницы от обыкновенной корневой гнили // Агрохимия. 2020. № 5. С. 31–37.
4. Н.Г. Власенко, О.И. Теплякова, В.И. Евсеенко, А.В. Душкин. Влияние обработки посевов мягкой яровой пшеницы супрамолекулярными комплексами тебуконазола на качество семян // Земледелие и химизация. 2020. Т. 50, №3. С. 5–15.



Хитозан



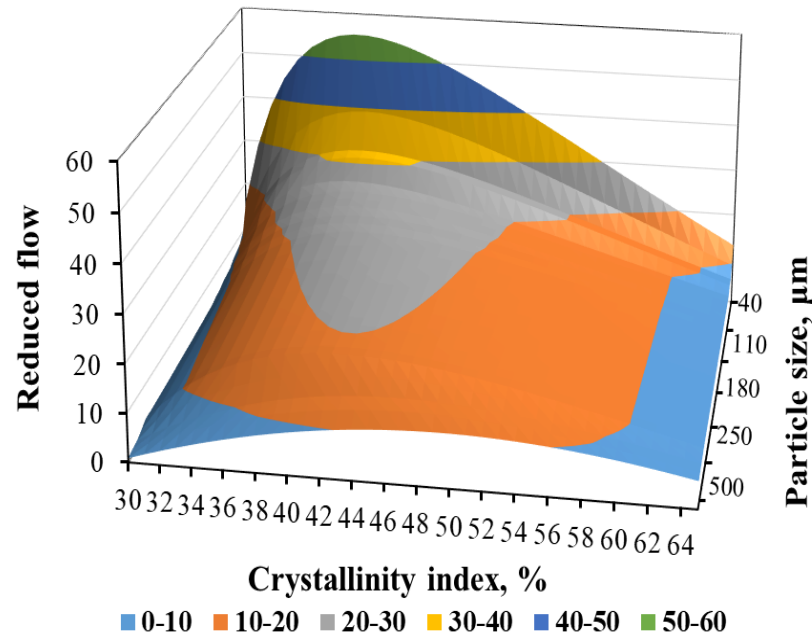
Арабиногалактан



Глицырризиновая кислота

## Анализ диффузионных характеристик растительного сырья

Авторы: к.х.н. И.О. Ломовский, к.х.н. Е.М. Подгорбунских, д.х.н. О.И. Ломовский



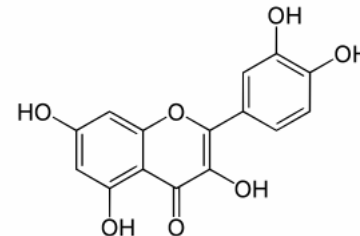
На основе математической модели диффузии в полупроницаемых пористых средах с проводящими каналами разработана методика анализа кинетики экстракции целевых веществ из растительного сырья.

Механохимическая обработка влияет на структуру растительного сырья и изменяет скорость и выход жидкофазной экстракции целевых веществ.

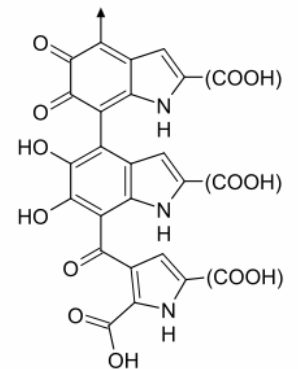
Определены условия, при которых скорость экстракции целевых компонентов повышается в 7-10 раз.



Выход кверцетина из Софоры японской увеличен на 40 %



Выход меланина шелухи гречихи увеличен в 2,5 раза



### Публикации:

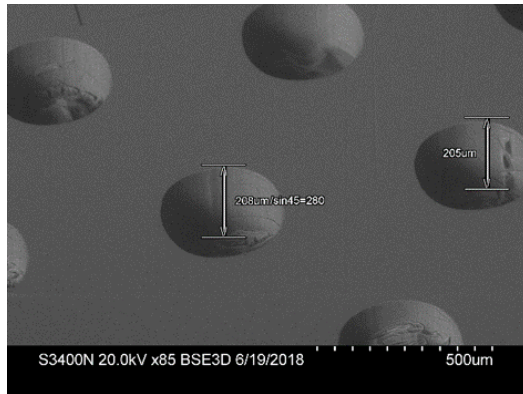
I. Lomovskiy, L. Makeeva, E. Podgorbunskikh, O. Lomovsky. The influence of particle size and crystallinity of plant materials on the diffusion constant for model extraction // Processes. 2020. V. 8. P. 1348; doi:10.3390/pr8111348.

## Способ получения материала и прозрачных изделий на основе сверхвысокомолекулярного полиметилметакрилата

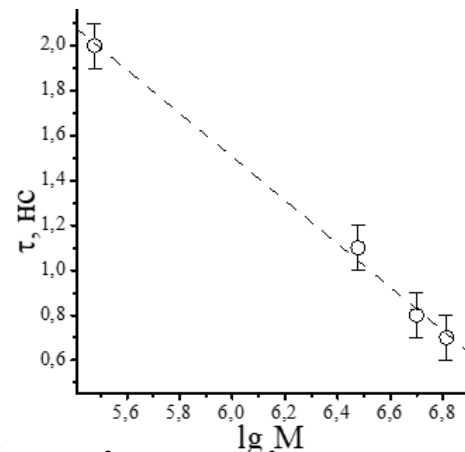
Авторы: Варанд А.В., д.х.н. Толочко Б.П., к.х.н. Михайленко М.А.

### Преимущества:

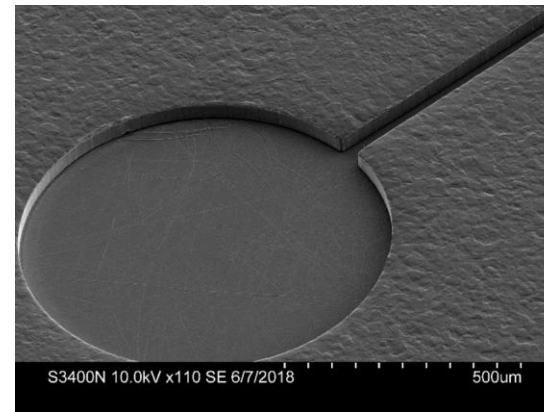
- отсутствие химических инициаторов и продуктов их разложения
- большая по сравнению с обычным ПММА химическая и радиационная стойкость / *применение для рентгеновской литографии*
- уменьшение времени пострadiационной люминесценции / *элементы высокоскоростных детекторов рентгеновского излучения*
- низкая адгезия к металлу / *изготовление изделий методом полимеризации в матрице*
- возможность изготовления изделий больших размеров – **преодолен предел толщины в 200 мм** / *изготовление иллюминаторов и окон для военной техники*



Картина травления при рентгеновской литографии – одинаковая глубина и ширина каналов по глубине



Зависимость времени пострadiационной люминесценции от ММ ПММА



Формирование структур методом полимеризации в матрице – ровные стенки при разъёме пресс-формы



Пример изделия из прозрачного сверхвысокомолекулярного полиметилметакрилата большого размера



Совместно с ИЯФ СО РАН

### Публикации:

Генцелев А. Н., Дульцев Ф. Н., Варанд А. В., Кондратьев В. И. Способ изготовления микрофлюидных биочипов // Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования, 2020, № 12, стр. 105-112. DOI: 10.31857/S1028096020120122

Lyubas G.A., Tolochko B.P., Ancharov A.I., Mikhailenko M.A., Varand, A.V. Dependence of spectral and luminescent properties of

# Тестирование рентгеновской оптики СКИФ на ВЭПП-3/ВЭПП-4 и расчеты тепловых нагрузок и деформаций



## Решаемая проблема:

Пучки СИ на СКИФ будут очень мощные – до 100 кВт.

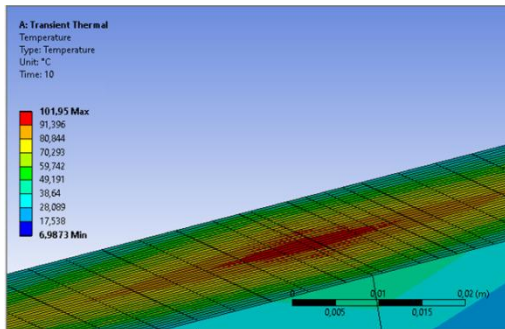
Рентгеновскую оптику для таких мощностей промышленность не выпускает. Встала проблема изготовления и эксплуатации высоконагруженной рентгеновской оптики.

ИХТТМ СО РАН проводит модельные эксперименты на пучках СИ ВЭПП-3/ВЭПП-4 и выполняет расчеты нагрева и деформации элементов рентгеновской оптики СКИФ и ищет конструкционные решения проблемы.

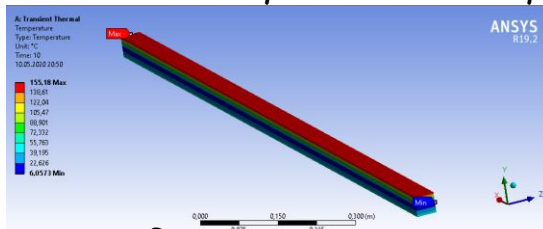
## Моделирование охлаждения зеркала водой

## ЗЕРКАЛА

Тестирование зеркала на ВЭПП-4



Охлаждение со всех сторон. Видна неоднородность нагрева.



Охлаждение только снизу. Нагрев равномерный.

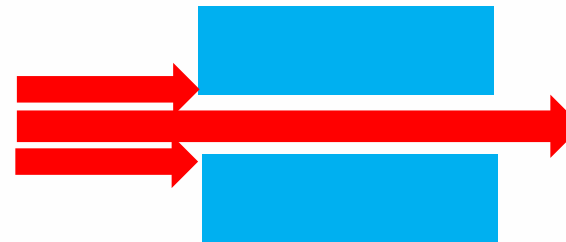
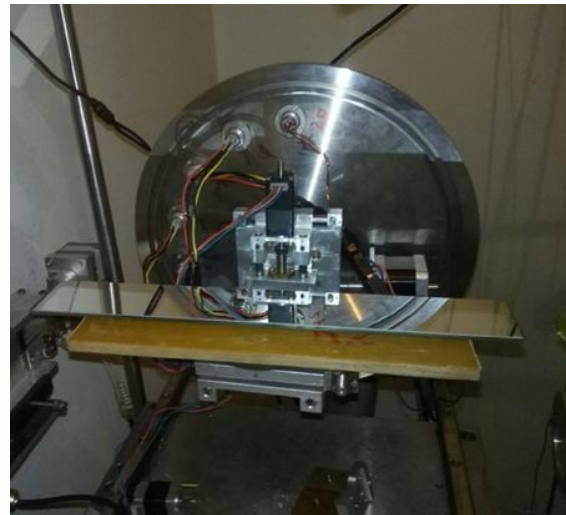
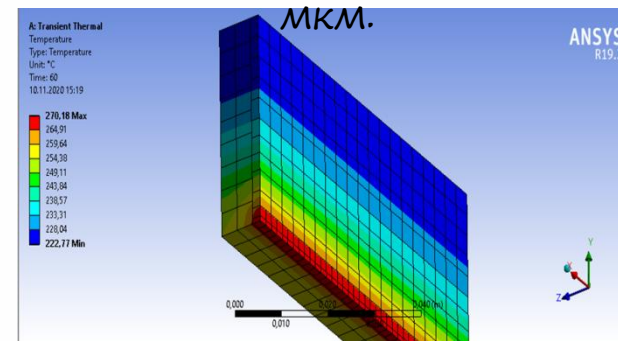


Схема прохождения пучка СИ через коллиматор 7



Распределение температуры после 1 минуты нагрева.

## КОЛЛИМАТОРЫ

Поглощение прецизионного коллиматора составляет десятки киловатт, что приводит к нагреву пластин коллиматора на сотни градусов и термическому расширению материала. Расчеты показали, что по вертикальной оси термическое расширение каждой пластины составляет 30 мкм. При запланированном размере щели в 7 мкм коллиматор полностью перекрывается и перестает работать.

**Спасибо за внимание!**

