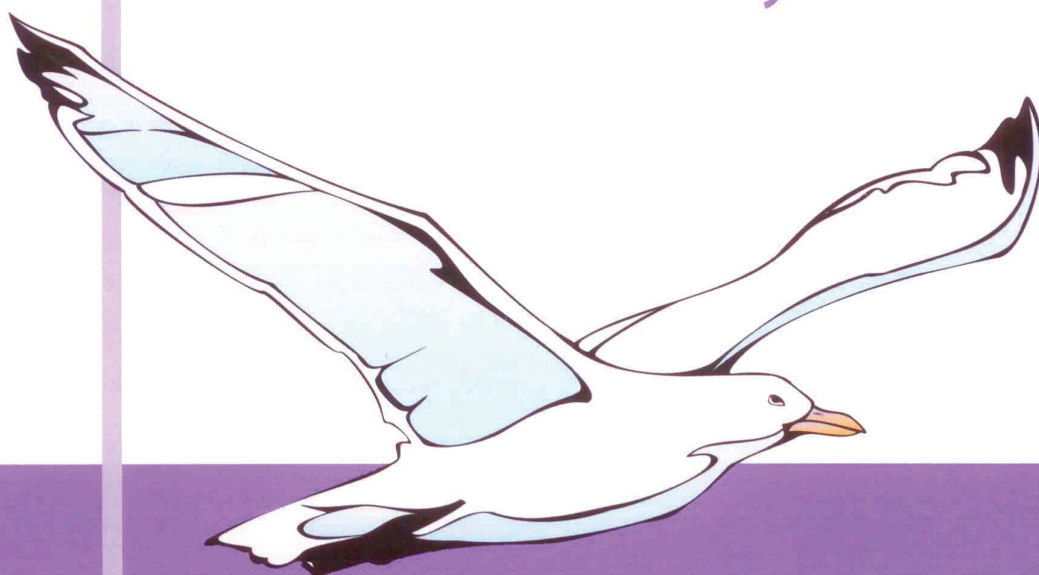


ТУАПСЕ 2011

# Современная химическая физика

XXIII симпозиум



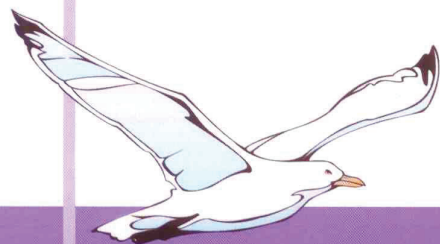
сборник  
аннотаций

23 сентября–4 октября, 2011 года  
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

ТУАПСЕ 2011

# XXIII симпозиум

Современная  
химическая  
физика



тезисы  
докладов

23 сентября - 4 октября 2011 года  
Пансионат «Маяк», г. Туапсе

**XXIII Симпозиум**

**«Современная химическая  
физика»**

селективный абсорбирующий элемент и анализатор поверхностных акустических волн (ПАВ), обеспечивающий контроль за количеством абсорбированного вещества.

Проведены лабораторные испытания макетного образца приборного комплекса СПИ по обнаружению и распознаванию взрывчатых веществ из классов нитросоединений, нитроаминов, эфиров азотной кислоты, солей азотной кислоты и пр., 28-ми наименований. Показано, что чувствительность в этом случае повысилась на порядок, при этом вероятность достоверного обнаружения критической массы ВВ  $\geq 97\%$ , а вероятность ложных тревог срабатывания при обнаружении ВВ  $\leq 5\%$ .

### **Поведение кинетических параметров при изменении полярности растворителя в сверхбыстрой фотоиндуцированной рекомбинации зарядов в донорно-акцепторных комплексах**

*Юданов В.В., Михайлова В.А., Иванов А.И.*

ВолГУ, Волгоград

В конденсированных средах наиболее важными энергетическими параметрами переноса заряда являются: свободная энергия реакции  $\Delta G$ , энергии реорганизации среды  $E_{rm}$  и внутримолекулярных колебательных степеней свободы  $E_{rv}$ . До последнего времени теоретические оценки этих величин остаются достаточно грубыми. Поэтому является актуальной задача определения вышеназванных параметров из экспериментальных данных.

В данной работе получены параметры  $\Delta G$ ,  $E_{rm}$  и  $E_{rv}$  для целого ряда ДАКов: гексаметилбензол/тетрацианоэтилен (TCNE), изодурен/TCNE и пентаметилбензол/TCNE в нескольких полярных растворителях: ацетонитрил, валеронитрил и октанитрил из подгонки к экспериментальным стационарным спектрам полосы поглощения с переносом заряда. Частоты внутримолекулярных квантовых мод  $\Omega_\alpha$  и параметры Хуанга-Риса  $S_\alpha$  для исследуемых ДАКов были получены ранее из данных резонансного комбинационного рассеяния в работе [3]. Найденные значения  $\Delta G$  и  $E_{rm}$  для вышеназванных растворителей сравнивались с предсказаниями в рамках простейшей континуальной теории. В работе показано, что влияние полярности среды на рассматриваемые параметры подчиняется выражениям этой теории. В рамках многоканальной стохастической модели [1–3] выполнены расчеты кинетики сверхбыстрой РЗ в возбужденных ДАКах, для стационарных и нестационарных моделей, и произведено сравнение с экспериментальными данными, полученными в работе [4].

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (контракт 14.740.11.0374).

Литература



- [1] Bagchi, B.; Gayathri, N. // *Advances in Chemical Physics*. 1999, v. 107. p. 1–80.
- [2] Feskov, S.V.; Ionkin, V.N.; Ivanov, A.I. // *Journal of Physical Chemistry A*. 2006, v. 110. p. 11919–11925.
- [3] Feskov, S.V.; Ionkin, V.N.; Ivanov, A.I.; Hagemann, H.; Vauthey, E. // *Journal of Physical Chemistry A*. 2008, v. 112. p. 594–601.
- [4] Nicolet, O.; Banerji, N.; Pages, S.; Vauthey, E. // *Journal of Physical Chemistry A*. 2005, v. 109. p. 8236–8245.

### **Плазмохимический синтез и свойства полиаминонафталина**

*Яблоков М.Ю.<sup>1</sup>, Гильман А.Б.<sup>1</sup>, Стрельцов Д.В.<sup>1</sup>, Augustyniak-Jablokow M.A.<sup>2</sup>,  
Tadyszak K.<sup>2</sup>, Кузнецов А.А.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> ИСПМ РАН, Москва  
<sup>2</sup> IMP PAN, Poznan, Poland

Методами электронного парамагнитного резонанса, атомно-силовой микроскопии и спектроскопии исследованы структура и свойства пленок полимера, полученных в плазме тлеющего разряда постоянного тока из 1-аминонафталина.

Образцы полимерных пленок, полученных на катоде, дают сильный и узкий сигнал ЭПР, характеризующийся лоренцевской формой линии и g-фактором, равным 2.0021. Температурная зависимость интенсивности, подчиняющаяся закону Кюри, показывает, что источником сигналов являются локализованные электроны.

Полимерные пленки, согласно данным АСМ имеют выраженную гранулярную структуру с широким распределением гранул по размерам. Сопоставление данных, полученных методом ЭПР, и морфологии пленок позволяет предположить, что механизм полимеризации в плазме включает взаимодействие полярных молекул мономера как с ионами на поверхности подложки, так и с ионами в плазме с образованием в последнем случае частиц в объеме плазмы. Эти частицы принимают участие в росте полимерной пленки за счет дрейфа в электрическом поле разряда и осаждения на поверхности подложки.

В работе приведены также результаты исследования кинетики процесса полимеризации 1-аминонафталина в разряде постоянного тока на катоде. Для определения толщины синтезированных пленок полимера использованы методы спектроскопии и интерференционной микроскопии. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 10-03-00772-а