

# Эволюция некоторых тематик в 2001 – 2010 гг (на примере результатов 2010 г.)

Кинетика элементарного акта переноса электрона

↓  
В.А.Никитина, П.А.Загребин

Л.А.Пуголовкин

Строение заряженных межфазных границ

→ М.И.Борзенко

Ионные равновесия в растворах

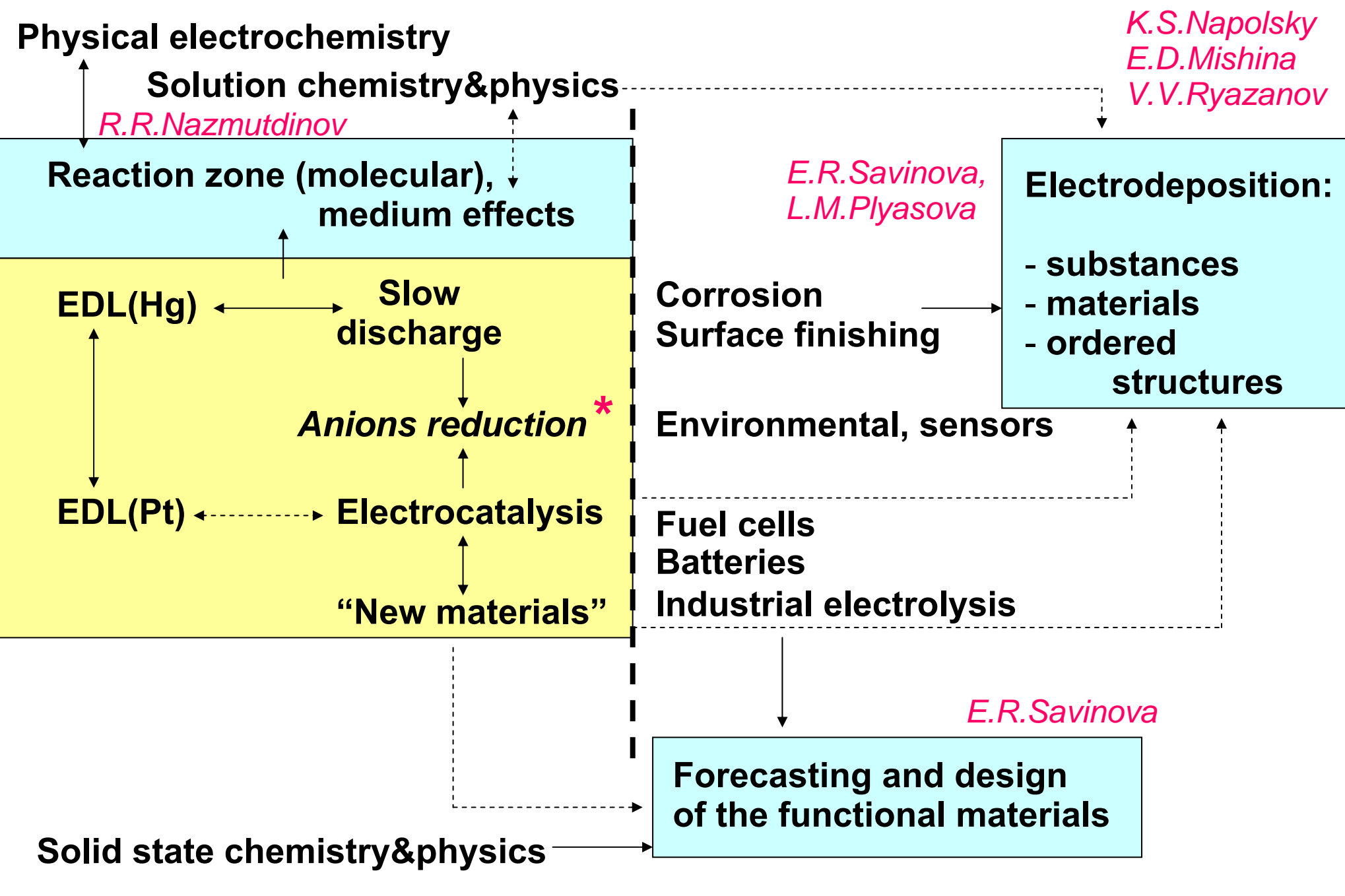
Электрохимическое материаловедение

→ С.Ю.Васильев

↑  
+ сопряженная разносторонняя деятельность  
группы А.Л.Чугреева

↓  
Э.Е.Левин, Е.К.Лаврентьева

↓  
Е.В.Антипов, О.?.Дрожжин



# Physical electrochemistry

# Solution chemistry&physics

*W.Schmickler,  
E.Santos*

Models of the elementary act

Solvent relaxation

Models for parameters!!!

Ionic association

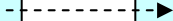
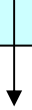
Computational

**Solvation**

*R.Buchner  
K.N.Mikhel'son, M.A.Peshkova*

**Reaction zone (molecular)**

**Multifactor medium effects**



Artificial reaction zone

Corrected Tafel plots and transfer coefficient

Barrier layers

Long range ET

*Th.Wandlowsky  
I.Pobelow*

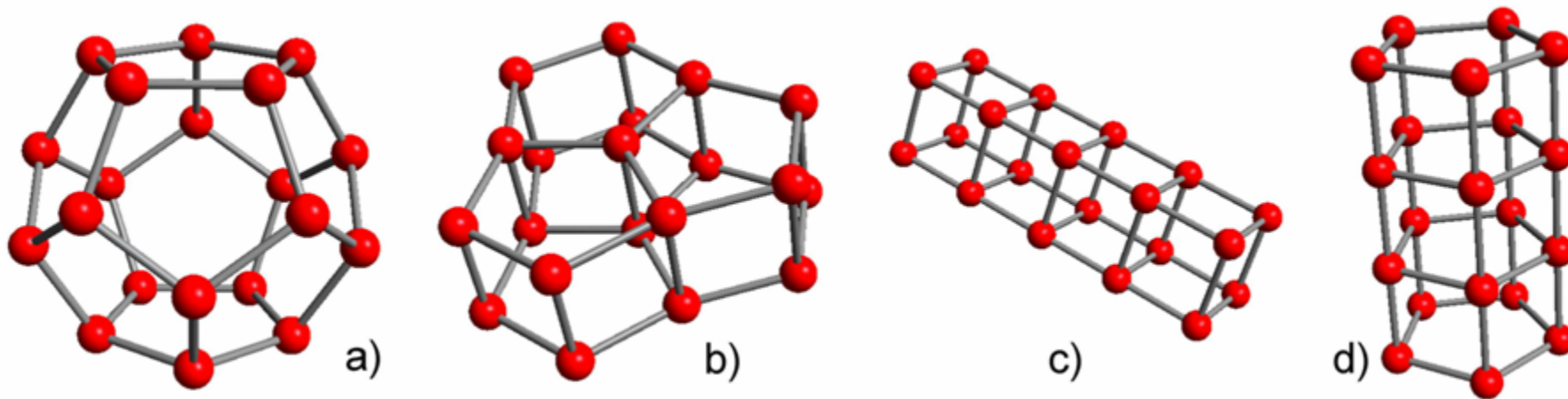
*W.R.Fawcett,  
E.Gileadi*

EDL(Hg)



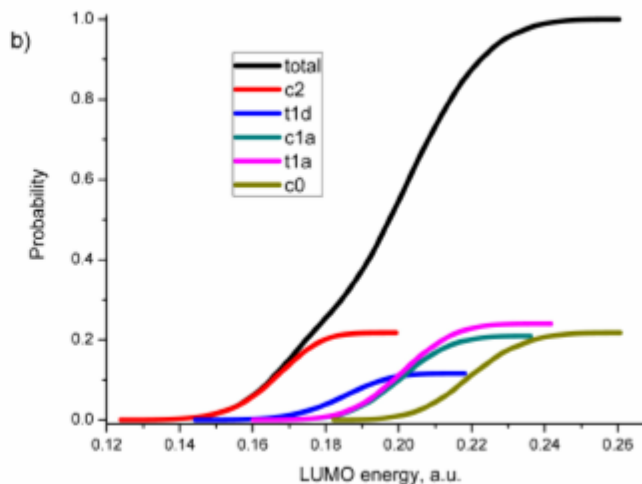
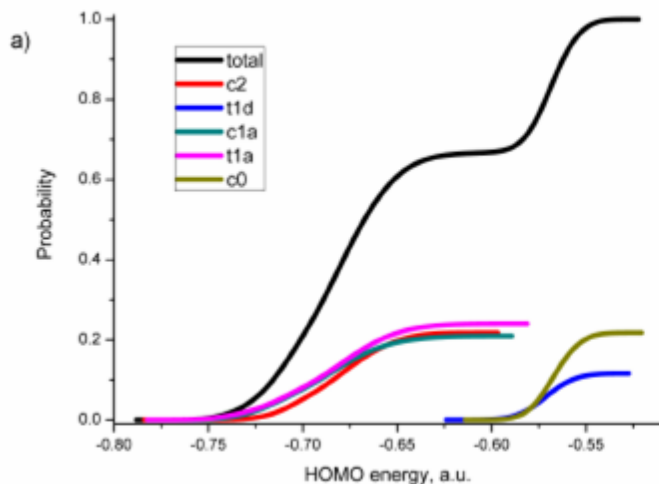
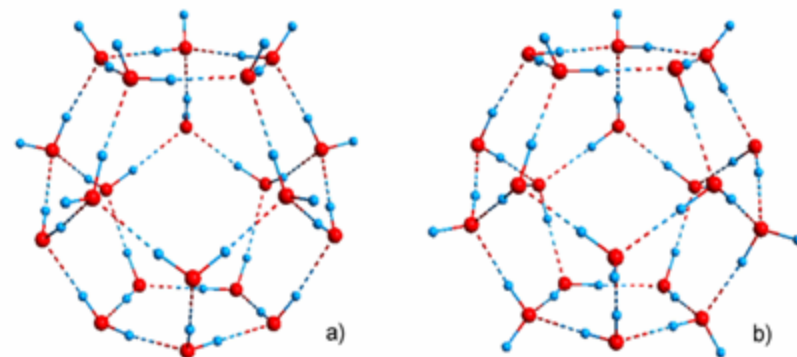
Slow discharge theory

# А.Л.Чугреев, И.?.Андреев



- а – d – различные структурные варианты кластеров воды  $(\text{H}_2\text{O})_{20}$  изученные в **Chem. Phys. Chem.** 11 (2010) 384-388.
- в икосаэдрических - 30026 симметрично неэквивалентных распределений водородных связей, удовлетворяющих правилам льда

# Причины разброса? (35 ккал/моль!)



- Смотрим распределения энергий НОМО и LUMO в связях разных типов (используется независимая топологическая классификация связей).

P.A. Zagrebin, R. Buchner, R.R. Nazmutdinov, **G.A. Tsirlina**, [\*Dynamic Solvent Effects in Electrochemical Kinetics: Indications for a Switch of the Relevant Solvent Mode\*](#), J. Phys. Chem. B, 2010, v. 114, p. 311-320.

R. R. Nazmutdinov, T.A. Zinkicheva, S.Yu. Vassiliev, D.V.Glukhov, **G.A. Tsirlina**, M. Probst, [\*A spectroscopic and computational study of Al\(III\) complexes in sodium cryolite melts: Ionic composition in a wide range of cryolite ratios\*](#), Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 2010, v. 75, p.1244 – 1252.

P.A. Zagrebin, R.R. Nazmutdinov, E.A. Spector, M.I. Borzenko, **G.A. Tsirlina**, K.N. Mikhelson, *Ionic association of Ce(IV)-decatungstate in the context of heteroatom reduction*, Electrochimica Acta, 2010, v.55, p. 6064–6072.

V. A. Nikitina, R.R.Nazmutdinov, **G.A.Tsirlina**, [\*Quinones Electrochemistry in Room-Temperature Ionic Liquids\*](#) J. Phys. Chem. B, **DOI:** 10.1021/jp1095807 published on-line

## Electrodeposition

:

- substances

- materials

- ordered  
structures

**Key words:** *controllable, tunable; monitoring!*

*Applications (nano- and optoelectronics)*

Оксиды молибдена и вольфрама

Катализаторы (Pt, Pd) ←————→ Хим. методы  
[Берлинские лазури]

**ТЕМПЛАТИРОВАНИЕ:**

- ансамбли проволок

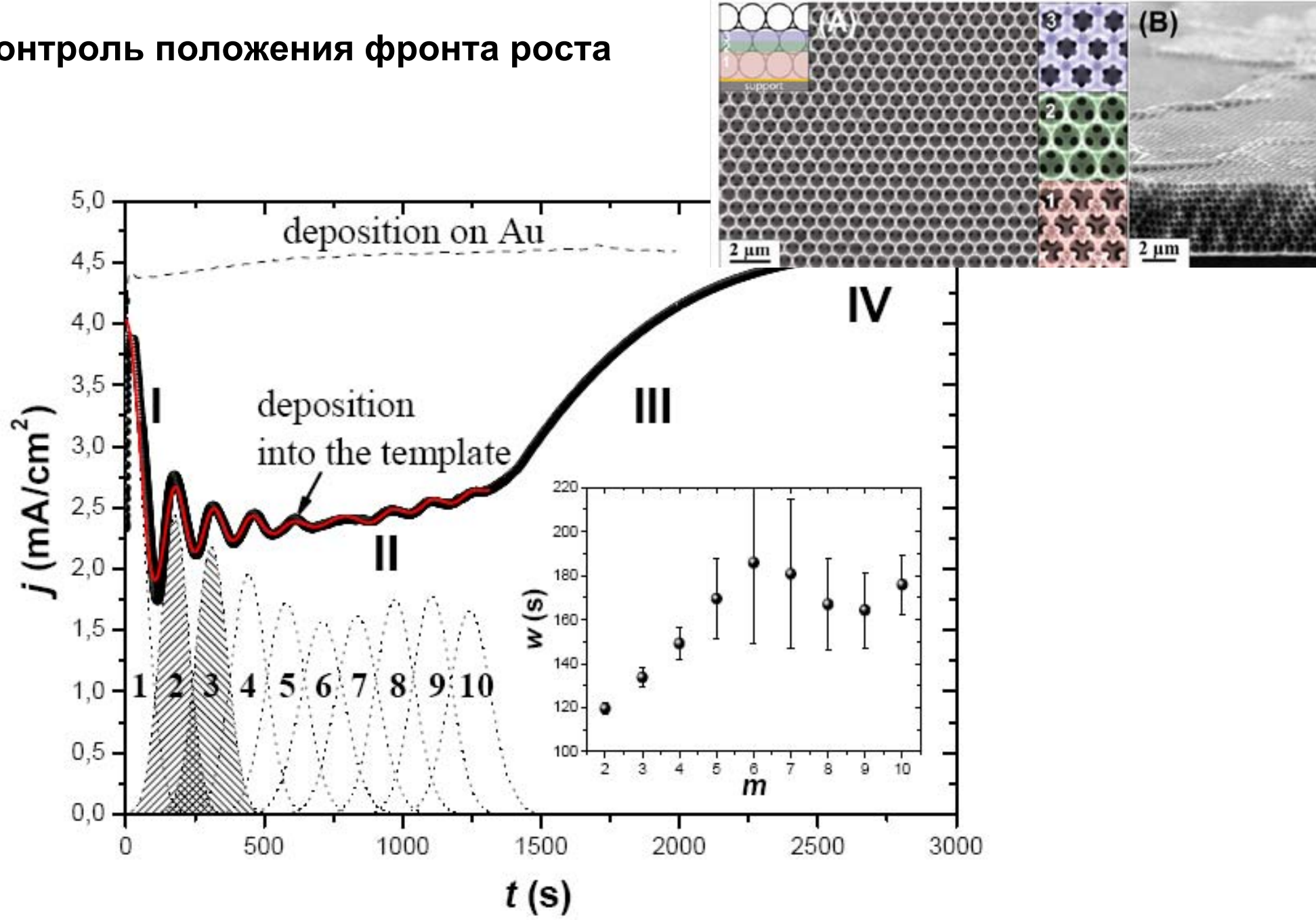
- единичные проволоки (+литография, FIB)

- инвертированные опалы

N. Sapoletova, T. Makarevich, K. Napolskii, E. Mishina, A. Eliseev, A van Etteger, T. Rasing, **G. Tsirlina**, *Controlled growth of metallic inverse opals by electrodeposition*, Phys. Chem. Chem. Phys, 2010, v.47, p. 15414-15422.

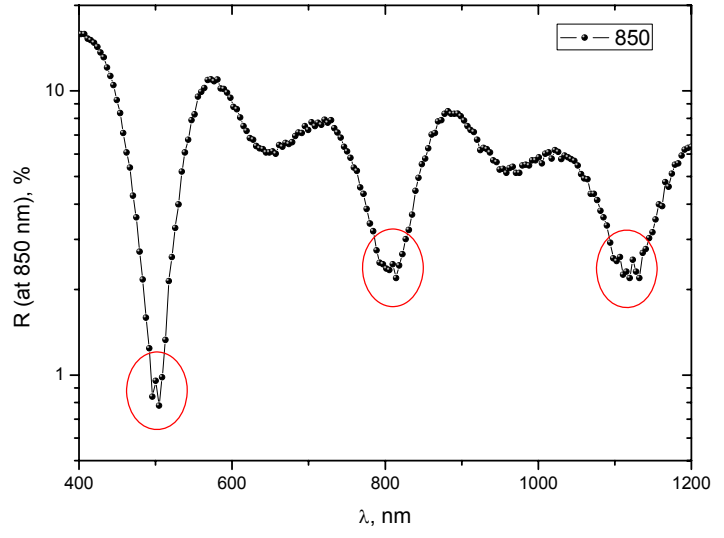
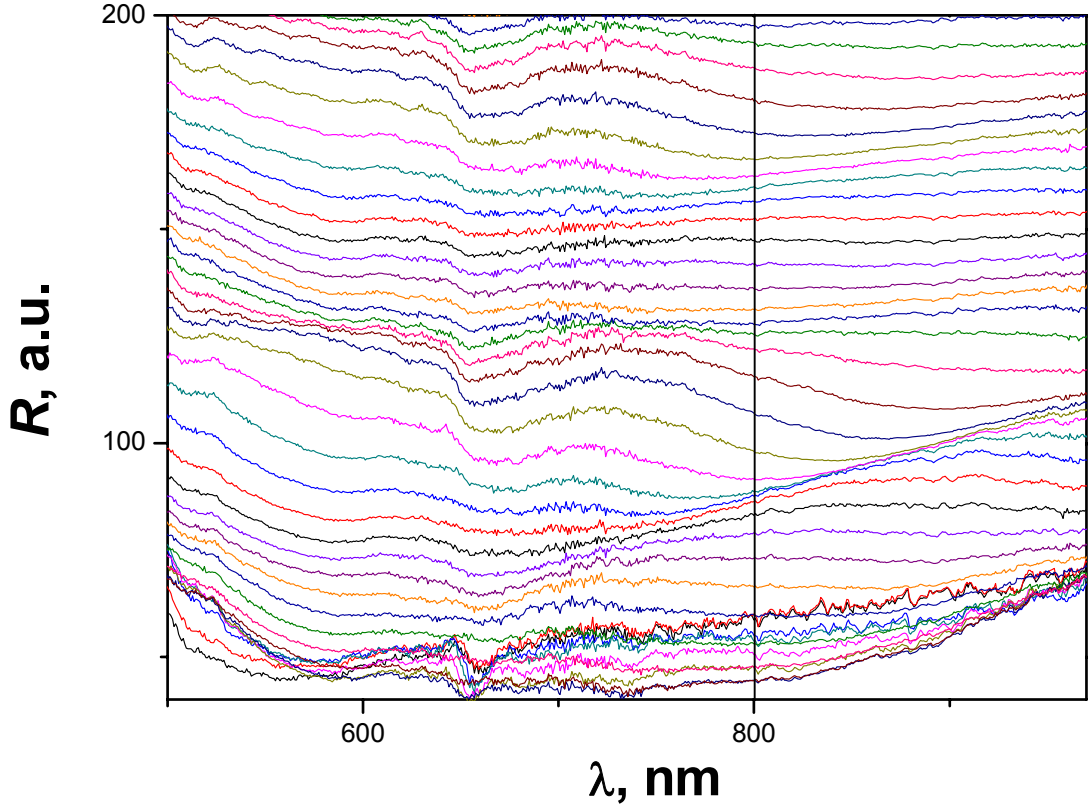
K. S. Napolskii, I. V Roslyakov, A. A Eliseev, D. I. Petukhov. A. V Lukashin, Shu-Fang Chen, Chuan-Pu Liu, **G. A Tsirlina**, *Tuning the microstructure and functional properties of metal nanowire arrays via deposition potential*, Electrochim. Acta, 2011, published on-line.

# Контроль положения фронта роста

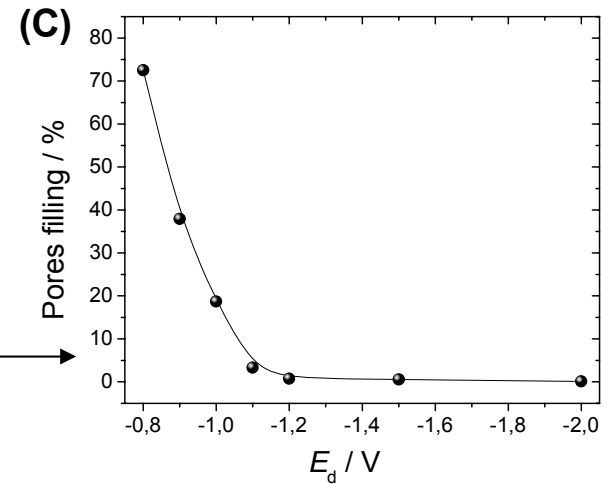
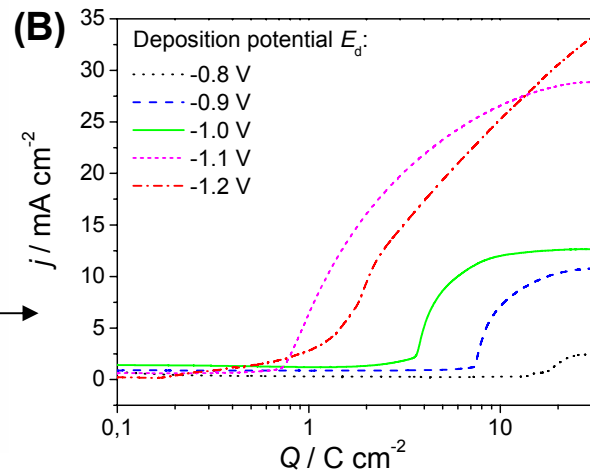
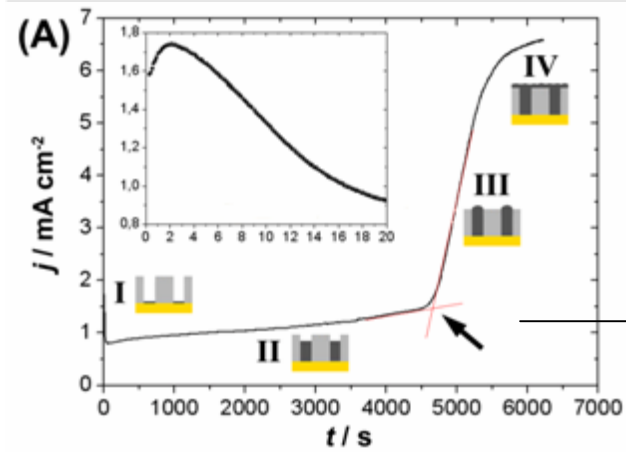
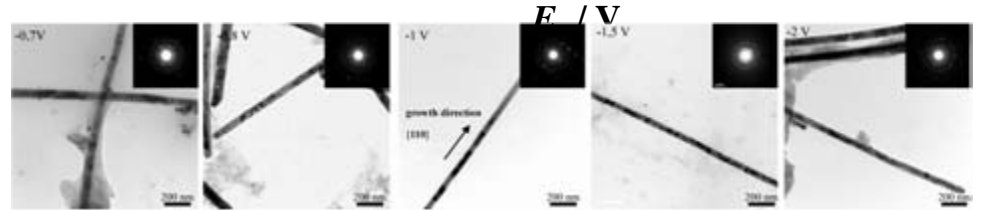
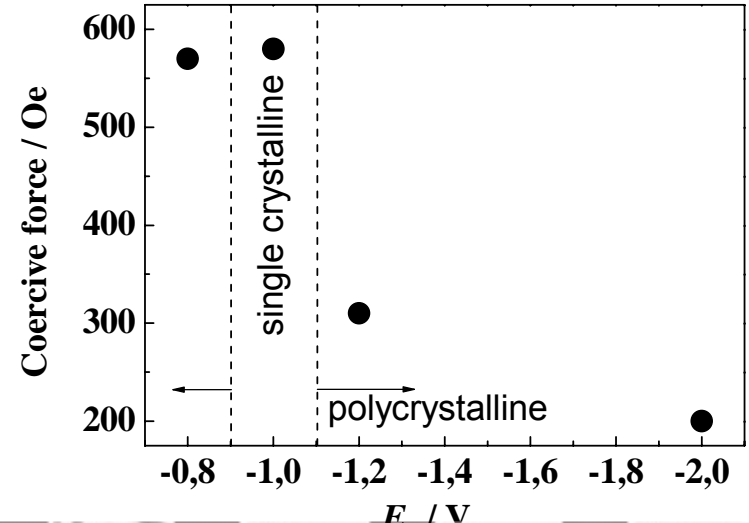
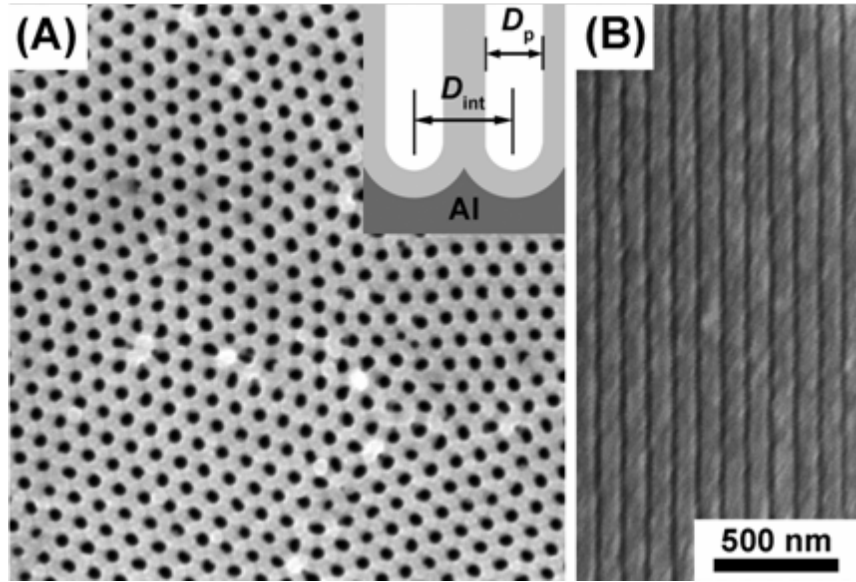




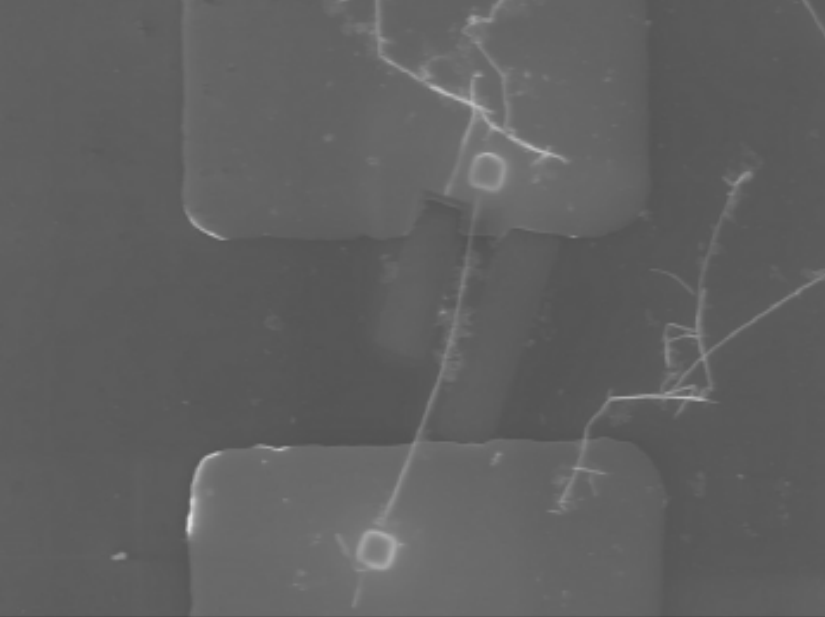
# Оптический контроль in situ



# Контроль заполнения пор и равномерности фронта роста



# Иммобилизация единичных проволок



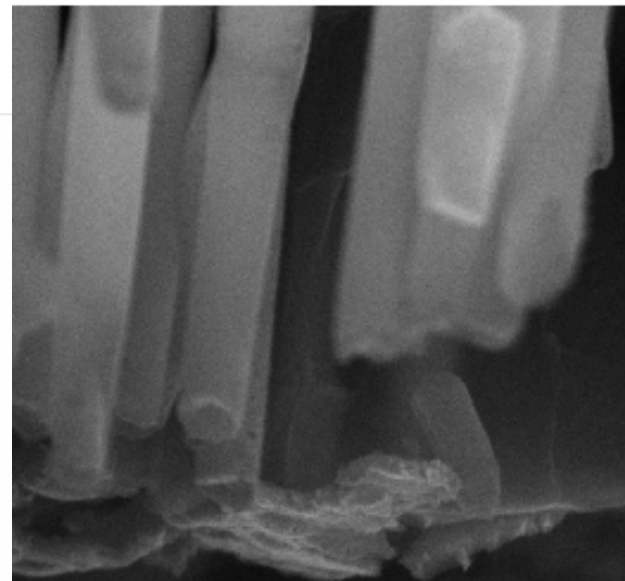
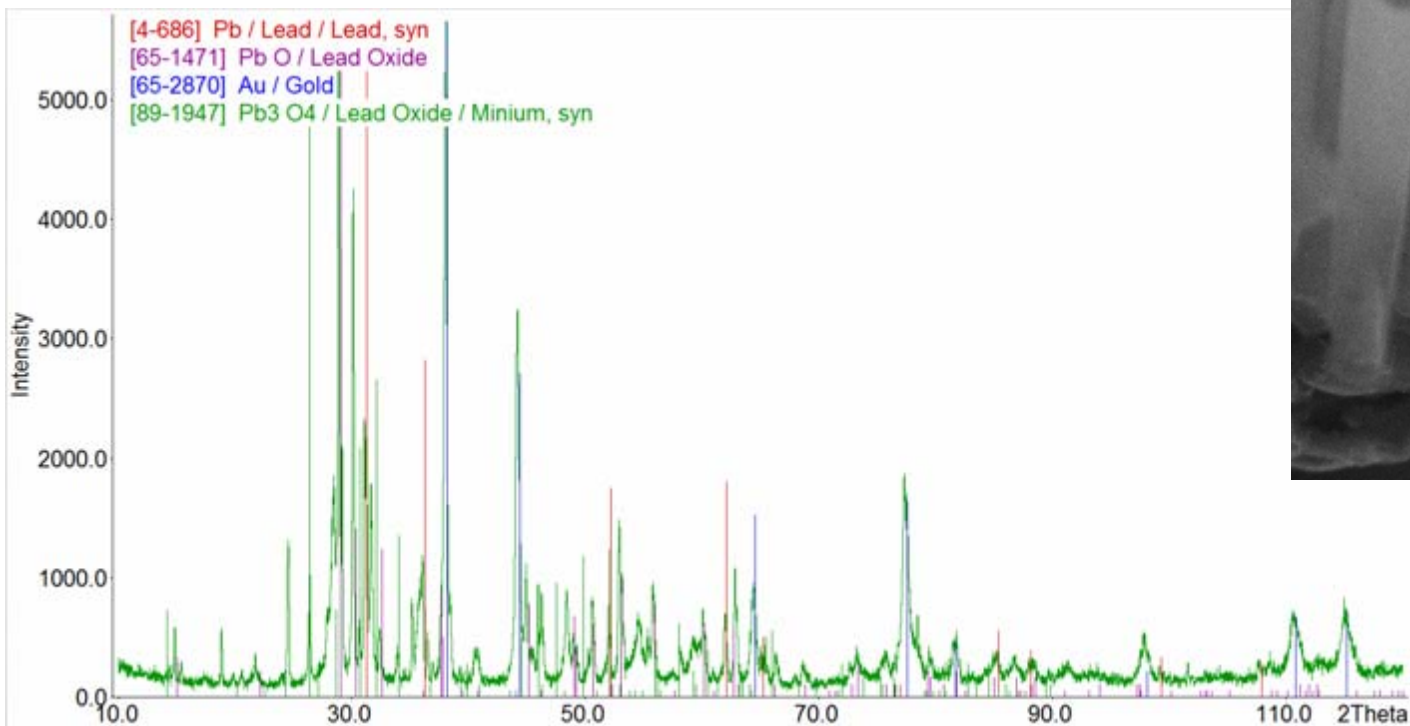
3.00 K X    2µm    EHT = 10.00 kV    Signal A = InLens    MSU HSMS  
WD = 8 mm    Photo No. = 1309    Date :19 Apr 2010



Mag = 100.00 K X    100nm    EHT = 15.00 kV    Signal A = InLe    Photo No. = 1090  
WD = 8 mm    Photo No. = 1090    Mag = 100.00 K X    100nm    EHT = 15.00 kV    Signal A = InLess    Photo No. = 1090  
WD = 7 mm

# Осаждение сверхпроводящих металлов и сплавов: Pb, Bi, Sn ; осаждение хрома

- Избежать соосаждения гидроксидов
- Обеспечивать устойчивость алюминий-оксидной матрицы



М.Лукацкая (ФНМ)  
С.Никонов (МФТИ)  
П.Барзилович (ИПХФ)

# Слоистые материалы с переходными металлами. 300 лет берлинской лазури



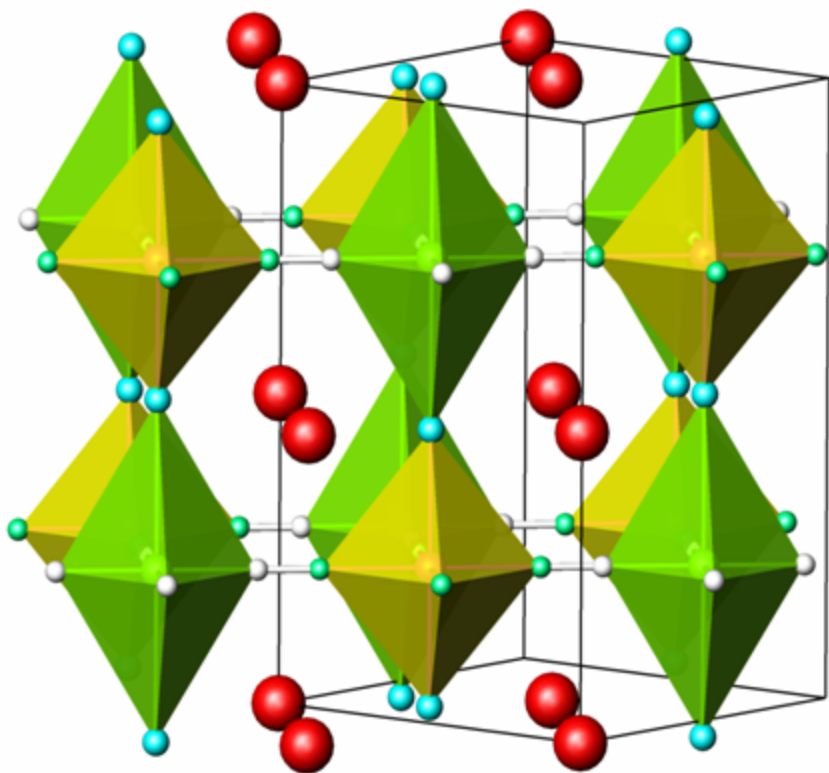
Anonymous, *Miscellanea*

*Berolinensia ad*

*Incrementum Scientarium*

**1710, 1.**

# Новый класс материалов:

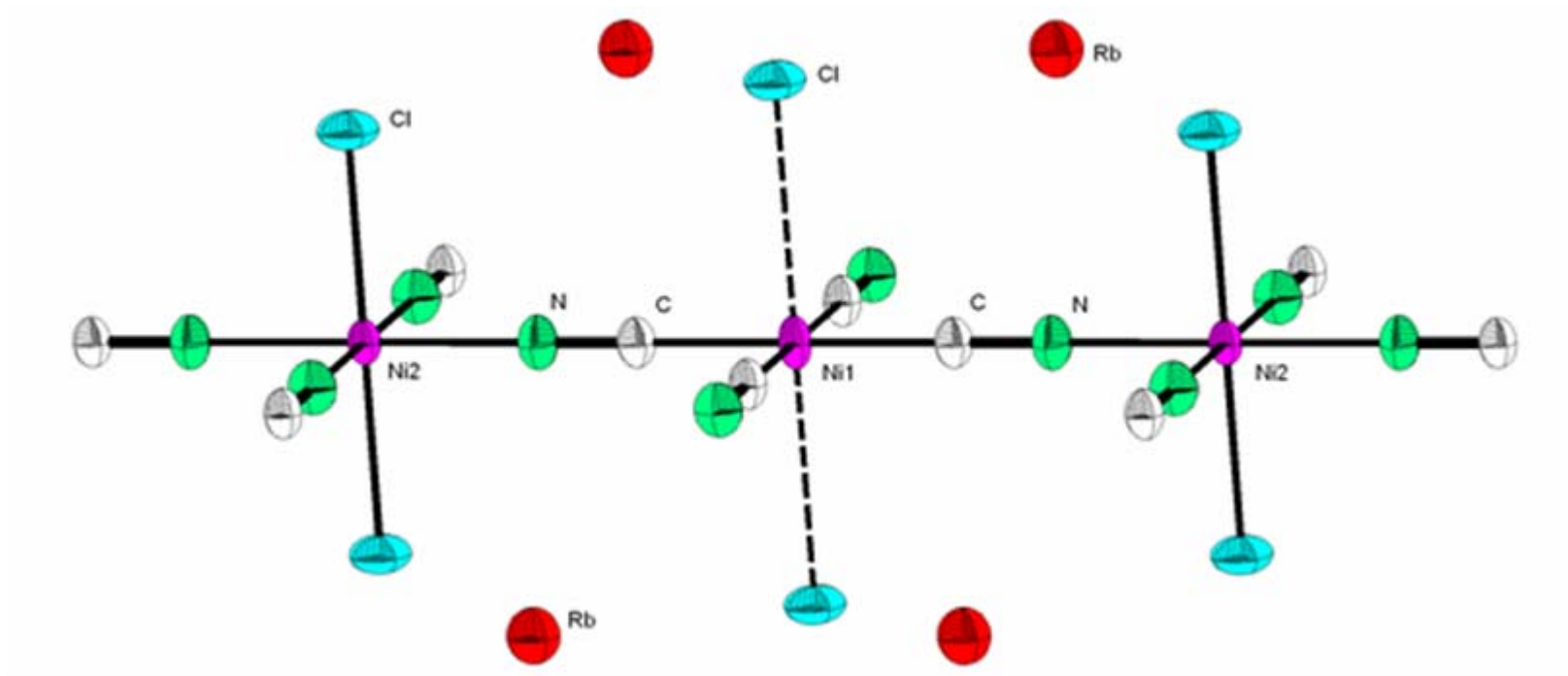


- Ni<sup>2+</sup> аналоги берлинской лазури:



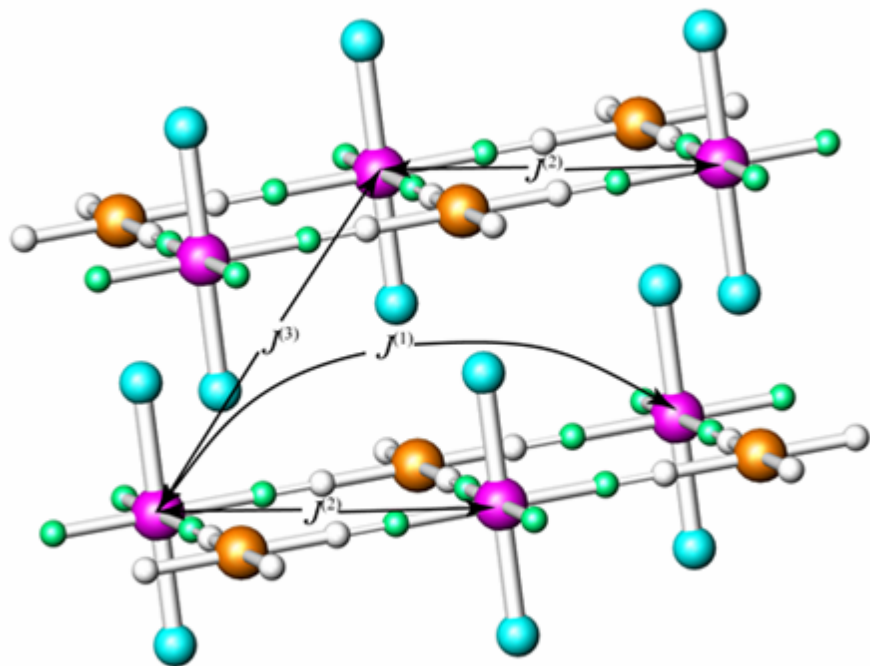
**Inorg. Chem.** 49  
(2010) 7414

# Электронная структура



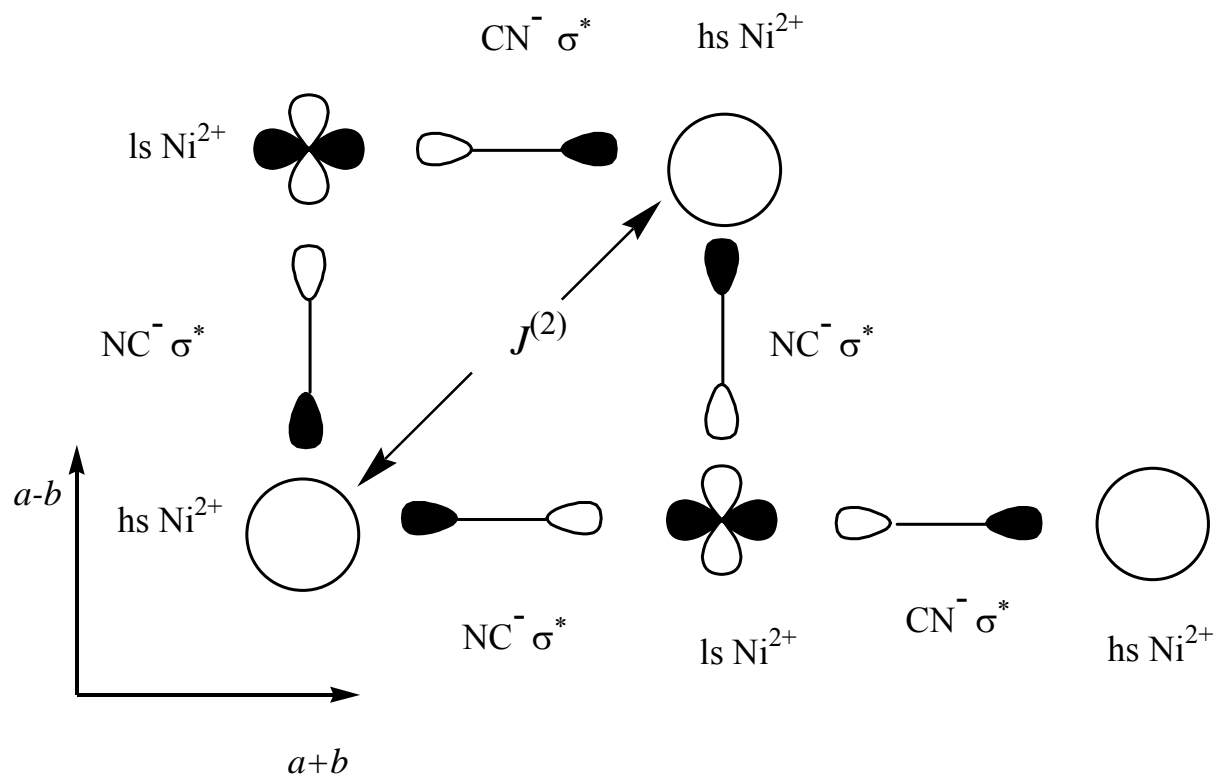
# Магнитные свойства

Установлены пути антиферромагнитного суперобмена, включающие магнитно неактивные ионы  $\text{Ni}^{2+}$ .

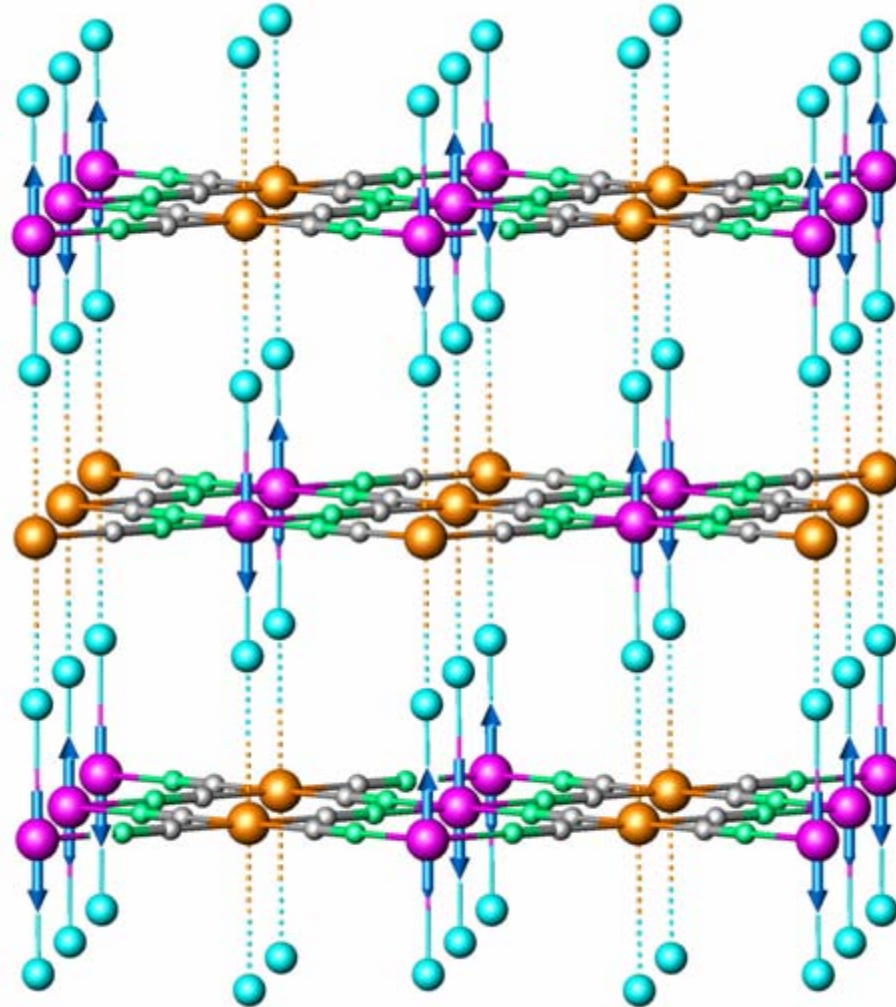
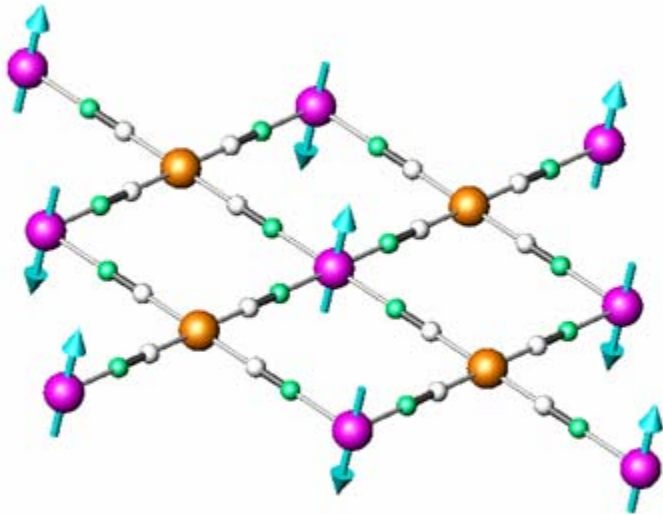




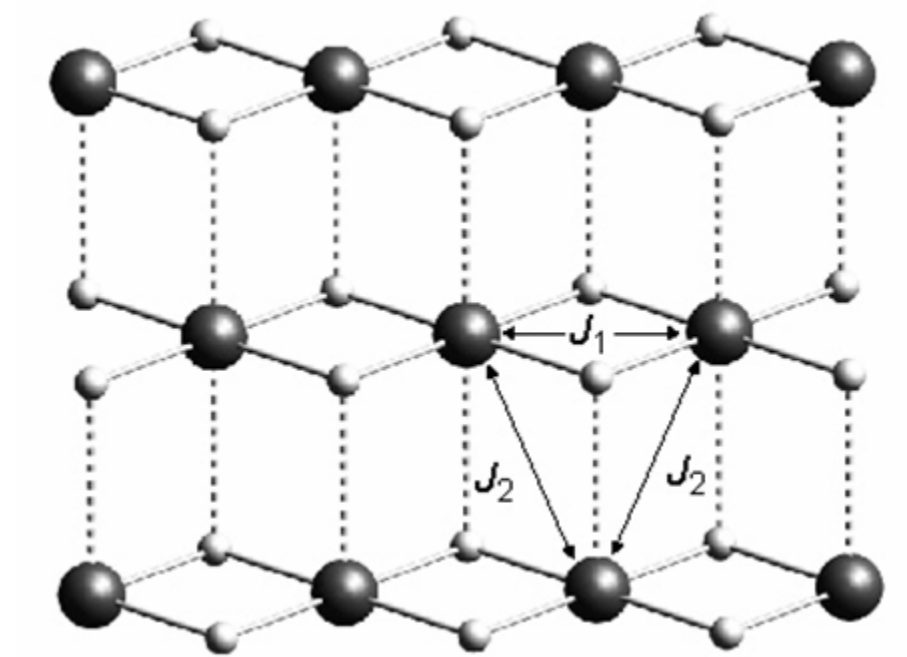
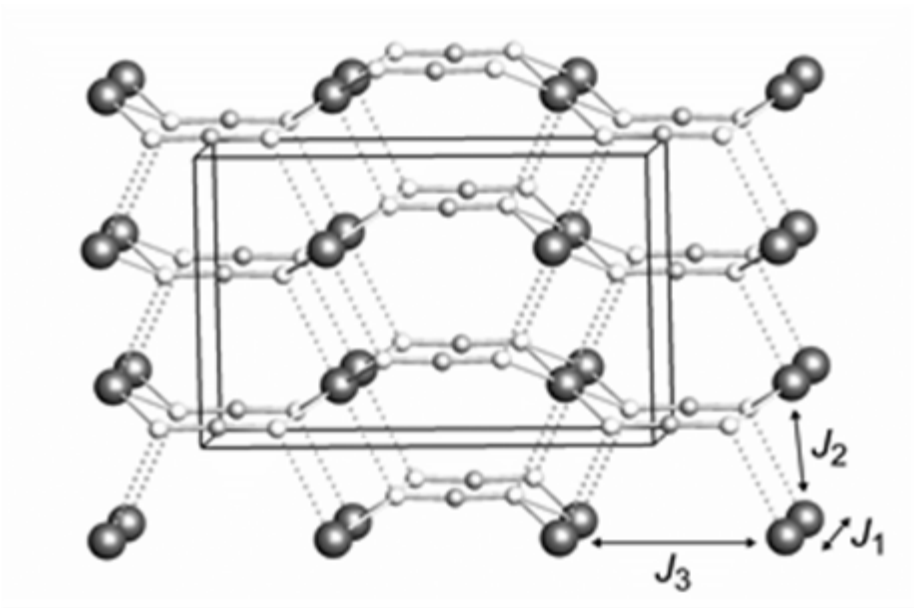
# Пример пути суперобмея



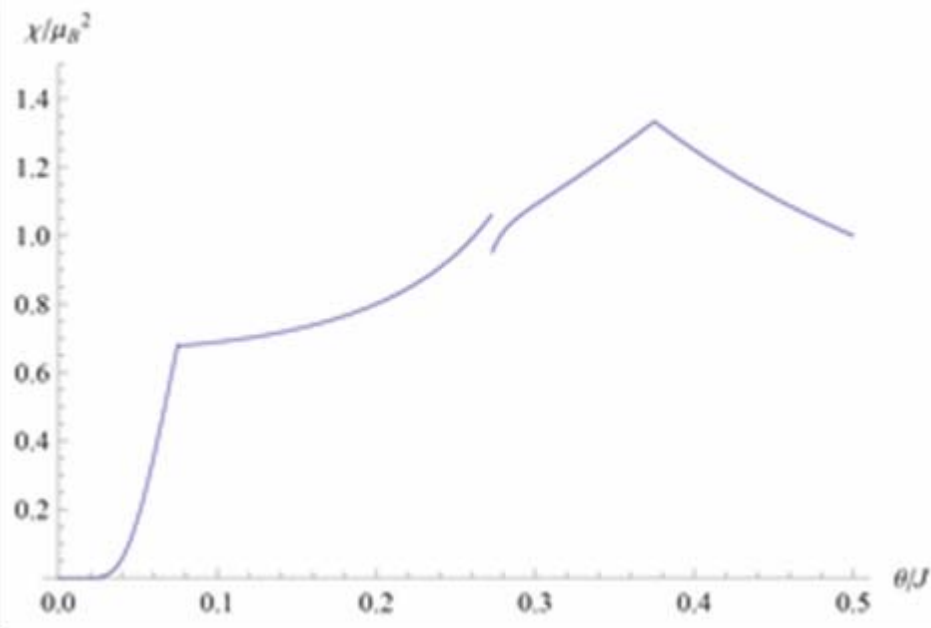
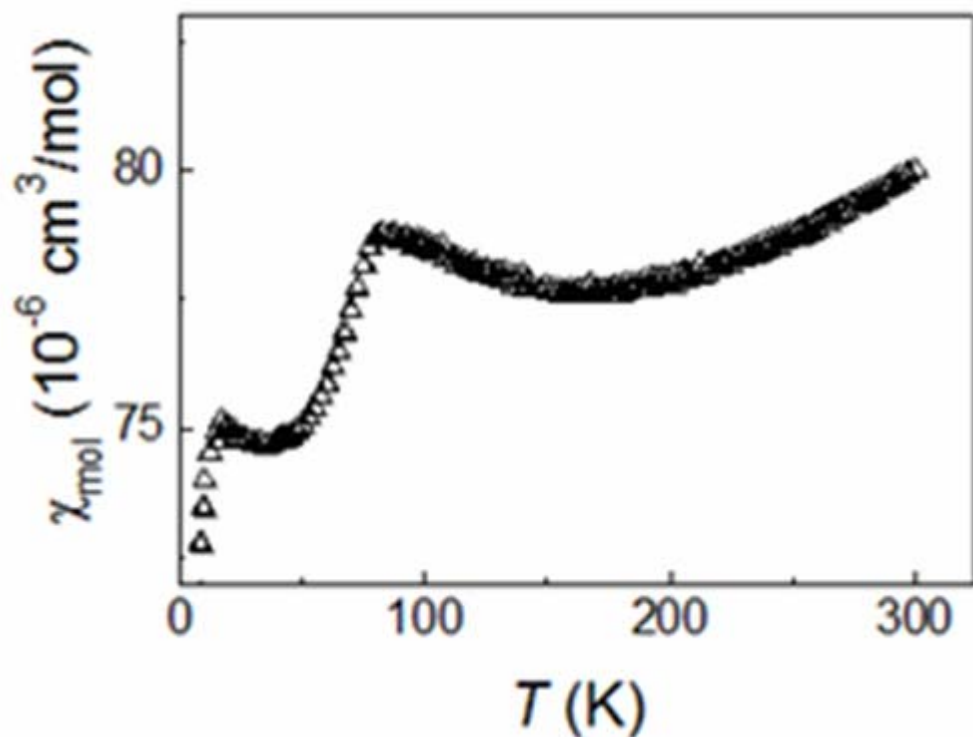
# Возможные магнитные структуры



# Frustration macht froh: CuNCN



# Магнитная восприимчивость в RVB состоянии $\text{CuNCN}$ : эксперимент и теория <http://arxiv.org/abs/1008.0182>



# Декорированные полиоскометаллаты

$$\{[M^{II}(H_2O)_3]_4 Mo_{12}^V O_{30} (\mu_2-OH)_{10} H_2\} \cdot 14H_2O$$

Проведены расчеты распределений зарядовой и спиновой плотностей и d-d спектров гетерополианионов с ионами переходных металлов M=Co, Fe (МЦНМО, IAC-RWTH).

В процессе подготовки 3 публикации (Андреев).

