

УДК 541.68, 544.18

## **ВЛИЯНИЕ СОРБЦИОННОЙ И ХИМИЧЕСКОЙ МОДИФИКАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ НАНОЧАСТИЦ УГЛЕРОДНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ НА ИХ АГРЕГАЦИЮ И ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ИХ ОСНОВЕ. КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ<sup>1</sup>**

Яновский Ю.Г. ], Никитина Е.А., Никитин С.М.\* , Карнет Ю.Н.

*ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия*

*\*НИИ ядерной физики им.Д.В.Скобельцина, МГУ им.М.В.Ломоносова, г. Москва, Россия*

### **РЕЗЮМЕ**

В рамках квантово-механического (КМ) исследования, а именно, атомистического моделирования из первых принципов, рассмотрены структурные, энергетические и механические свойства межфазных слоев композитов, состоящих из полимерной матрицы и наночастиц аморфного углерода. В компьютерном эксперименте определены пути модификации поверхности частиц аморфного углерода, снижающие агрегацию частиц наполнителя и улучшающие физико-механические свойства композиций в целом. Рассмотрены сорбционная и химическая модификация поверхности частиц наполнителя. Предложен ряд дезагрегирующих дисперсионных сред, в частности растворителей, в присутствии которых с одной стороны затрудняется агрегация частиц углеродного наполнителя, а с другой - облегчается их диспергирование в выбранной полимерной матрице. Предложена модификация углеродных частиц пришивкой на их поверхность (с образованием ковалентных связей) различных поверхностных активных групп. Показано, что такая химическая модификация частиц существенно затрудняет агрегацию частиц наполнителя и значительно улучшает механические и прочностные свойства межфазного слоя между полимерной матрицей и частицами наполнителя. Установлено, что химическая модификация углеродных частиц значительно эффективнее, чем сорбционная модификация. На основе проведенного квантово-механического моделирования даны рекомендации по использованию и модификации углеродных наполнителей эластомерных резин.

**Ключевые слова:** композиционные материалы; наполнитель; модификация поверхности; межфазный слой; квантово-механическое моделирование

## **EFFECT OF ADSORPTION AND CHEMICAL MODIFICATION OF THE SURFACE OF THE NANOPARTICLE CARBON FILLERS TO THEIR AGGREGATION AND THE PHYSICAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF THE POLYMER COMPOSITIONS BASED ON THEM. THE QUANTUM-MECHANICAL STUDY**

Yanovsky Yu.G., Nikitina E.A., Nikitin S.M.\* , Karnet Yu.N.

*Institute of applied mechanics of Russian academy of sciences, Moscow, Russia*

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №14-01-00457.

## SUMMARY

Within the quantum-mechanical (QM) study, namely, atomistic simulations from the first principles we discussed structural, energetic and mechanical properties of the composite interfacial layers consisting of polymer component of the elastomeric rubber and amorphous carbon nanoparticles. In computer simulations the ways of the surface modifying of amorphous carbon particles that reduce the aggregation of filler particles and improve the physical and mechanical properties of the compositions as a whole have been defined. Sorption and chemical modifications of the surface of the filler particles are considered. A number of disaggregating dispersive media, in particular solvents, whose presence hinder aggregation of carbon filler particles and facilitate their dispersion in the polymer matrix, was examined. The modification of the surface of carbon particles was considered with formation of covalent bonds with different surface-active groups. It was shown that such the chemical modification complicates the aggregation of filler particles, and greatly improves the mechanical and strength properties of the interfacial layer between the polymeric matrix and filler particles. It was found that chemical modification of the carbon particles is much more efficient than sorption modification. On the basis of this quantum-mechanical modeling the recommendations are given on the use and modification of carbon fillers of elastomeric rubbers.

**Key words:** composite materials; filler; surface modification; interphase layer; quantum-mechanical modeling

## ВВЕДЕНИЕ

Углеродные наполнители широко применяют в различных полимерных композициях. Особенно часто используется аморфный углерод. При этом на физико-механические и прочностные свойства композитов существенное влияние оказывает как химическое строение, так и размер их частиц. Наноразмерные углеродные частицы имеют тенденцию к агрегации, что существенно влияет на механические характеристики композитов на их основе. Поэтому особую актуальность приобретает исследование механизмов взаимодействия частиц наполнителей друг с другом (агрегации), а также полимерных матриц и частиц наполнителей различной химической природы и размера, обусловленного высокой активностью поверхности этих частиц [1]. Было установлено, что усиливающая активность частиц наполнителя резко возрастает с увеличением их удельной поверхности [2,3]. Во многих случаях необходимо регулировать и предотвращать агрегацию наночастиц наполнителей. А это может быть сделано путем сорбционной или химической модификации поверхности частиц.

Исследования показали, что агрегацию можно затормозить или предотвратить, если проводить коллоидное измельчение наполнителя в различных дисперсионных жидких средах [4], вследствие физиосорбции молекул растворителей на поверхности частиц наполнителей. Кроме того, в ряде работ было показано, что агрегацию частиц можно значительно уменьшить правильным подбором химической модификации поверхности наноразмерных частиц наполнителя [5,6] (с образованием ковалентных связей между модификатором и частицами наполнителя). При этом, как правило, размол производится в присутствии взаимодействующих с поверхностью частиц наполнителя реагентов.

При этом происходит одновременно модификация поверхности и измельчение частиц наполнителя, которые благодаря этому не объединяются в агрегаты [7-9].

Для подбора возможных дисперсионных сред, в которых размол частиц до наноразмеров дает оптимальные (наименьшие) по размеру агрегаты перспективными являются методы квантово-механического моделирования. Кроме того, методы атомно-молекулярного компьютерного моделирования помогают в компьютерном переборе (эксперименте) подобрать наиболее оптимальные модификаторы для поверхности частиц наполнителя. Все это дает значительную экономию временных и материальных затрат при экспериментальной работе по подборке новых видов наноразмерных наполнителей, активно противостоящих агрегированию [10,11]. При этом возникает возможность виртуальной оценки перспективности использования широкого круга дезагрегирующих и модифицирующих сред (т.е. без проведения длительных натуральных экспериментов) и описания адгезионных свойств наноразмерных объектов, исходя из наноскопического строения и химической активности их поверхности.

## 1. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящей работе расчеты проводились в рамках оригинального пакета квантово-механических программ *NDDO/sp-sp<sub>d</sub>*, разработанного в ИПРИМ РАН [12]. При этом использовался наиболее строгий из полуэмпирических методов - метод пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием с параметризацией РМЗ, в котором условие пренебрежения двухатомным дифференциальным перекрыванием распространяется только на пары орбиталей, локализованных на различных центрах, вследствие чего в явном виде при расчетах сохраняются не только одноцентровые, но и двухцентровые обменные интегралы. Таким образом, используемый метод концептуально наиболее близок к строгим квантово-механическим методам *ab initio* и немногим уступает им в точности расчетов при параметризации по большому количеству экспериментальных данных, однако при этом, хотя и является наиболее трудоемкими в своем классе, выигрывает по временам счета и возможным размерам рассматриваемых молекулярных систем. При рассмотрении межмолекулярных взаимодействий этот метод, по нашим оценкам, не уступает по точности неэмпирическим расчетам, значительно выигрывая при этом в скорости счета.

Вычислительный эксперимент был реализован в кластерном приближении, в котором частицы наполнителя, фрагменты полимерных матриц, частицы диспергирующих сред и модификаторов, а кроме того, границы раздела фаз, межфазные зоны контакта, моделировались кластерами достаточно большой величины (до нескольких десятков ангстрем и до нескольких сотен атомов). Кластерные методы очень близки к методам, применяемым в квантовой химии молекулярных систем. Важное отличие обусловлено тем, что при кластерном моделировании объемного твердого тела необходимо в общем случае учитывать свойства поверхности кластера и влияние окружения кластера на его состояние. На практике это осуществляется, например, при помощи специально подобранных внешних потенциалов или граничных условий, в виде поверхностных активных групп, замыкающих оборванные связи на поверхности частиц. Кластерные методы являются весьма эффективным средством моделирования локализованных объектов, таких как места адсорбционных

контактов молекул растворителя на поверхности частиц наполнителей, а также в межфазной зоне наполнителя и полимерной матрицы, то есть, физические размеры которых меньше, чем размеры доступных с вычислительной точки зрения кластеров.

В ходе компьютерного моделирования вначале строятся молекулярные модели отдельных компонентов адсорбционного комплекса, которые затем оптимизируются в квантово-механическом расчете. На основе полученных моделей компонентов строится сложносоставной кластер, моделирующий изучаемый адсорбционный комплекс, который является объектом дальнейших компьютерных экспериментов. Рассчитанная энтальпия связывания (как разность теплот образования комплекса и отдельных компонент) характеризует на наноскопическом уровне прочность межмолекулярных связей наночастиц и рассчитывается следующим образом:

$$E_{\text{связ}} = E_{\text{комплекса}} - \sum E_{\text{компонентов комплекса в свободном состоянии}}$$

Подобный подход дает надежные результаты при определении атомной структуры и сравнении энергетических характеристик межфазных и адсорбционных слоев композитов, в которых основную роль играют локальные химические взаимодействия.

В рамках использованного оригинального пакета программ [12] взаимосвязь структуры межфазного слоя частица наполнителя - частица наполнителя, частица наполнителя - фрагмент полимерной цепи с характеристиками напряженного состояния, рассматривалась в рамках подхода микроскопической координаты трения (МКТ). При этом микроскопическая координата трения задается двумя группами атомов в системе из двух молекул, определяющими направление и плоскости приложения силы трения. Положение одной частицы фиксируется путем исключения некоторых ее атомов из процесса оптимизации. Вычислительный эксперимент состоит в последовательном пошаговом перемещении второй частицы из исходного состояния вдоль МКТ.

Рассчитанными результатами, которые позволяют сопоставить геометрические, энергетические и механические характеристики модельных сложносоставных комплексов, являются минимальное расстояние  $R$  между модельными частицами, энергия связывания  $E_{\text{связ}}$ , рассчитанная на одну мономерную единицу полимера, а также максимальная сила сдвигового трения  $F_{\text{сдв\_MAX}}$ , рассчитанная на сдвиг в 1Å полимера вдоль поверхности наполнителя.

## **2. МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА СОРБЦИЕЙ ЧАСТИЦ ДИСПЕРГИРУЮЩИХ СРЕД**

В основу структуры ядра модельной углеродной частицы были положены различные циклы из углерода в  $sp^2$ - $sp^3$  гибридизациях, границы этого кластера замыкались поверхностными атомами водородами. Этот кластер представлял собой гидрофобную частицу и имел наибольший линейный размер  $\sim 14$  Å (рис.1).

Для расчетов адгезионных взаимодействий частицы углерода с частицами дисперсионных сред, которые могут быть использоваться при коллоидном помеле, выбрали: спирты (изобутанол, изопропанол, этанол, метанол), ацетон и воду. Оптимизированные структуры молекул этих сред представлены на рис.2.

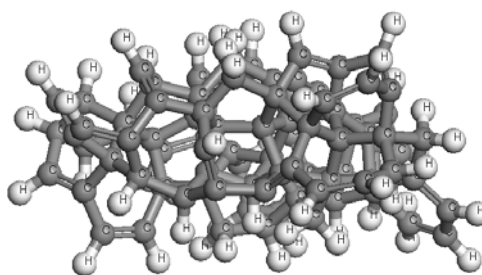


Рис.1. КМ оптимизированная кластерная модель углеродного аморфного наполнителя.

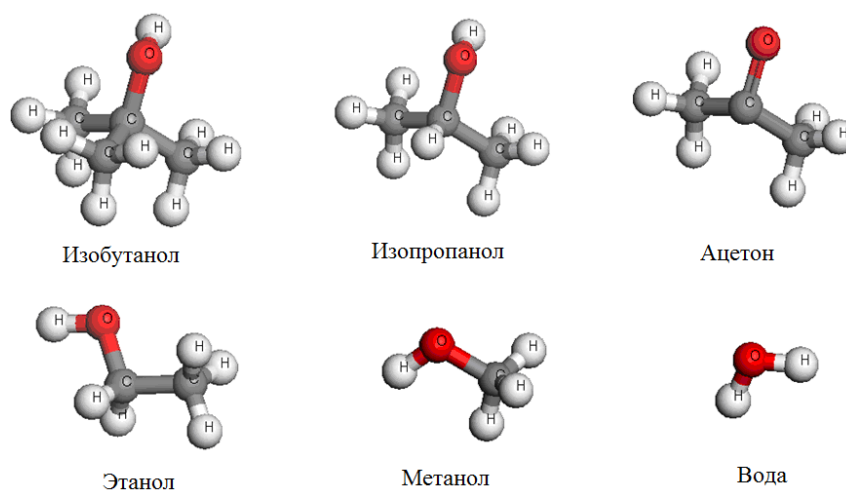


Рис.2. КМ оптимизированные структуры молекул спиртов, ацетона и воды.

Далее была построена кластерная модель адсорбционного комплекса двух углеродных молекул (рис.3).



Рис.3. КМ оптимизированный адсорбционный комплекс двух углеродных частиц.

Проведенные вычисления показали, что характер связывания двух углеродных частиц – гидрофобный, а рассчитанная энергия взаимодействия на один контакт  $\text{CH}\dots\text{HC}$  составляет  $\Delta H=25.08$  кДж/моль. КМ оптимизированные структуры адсорбционных комплексов углеродной частицы с молекулами анализируемых дисперсионных сред представлены на рис.4.

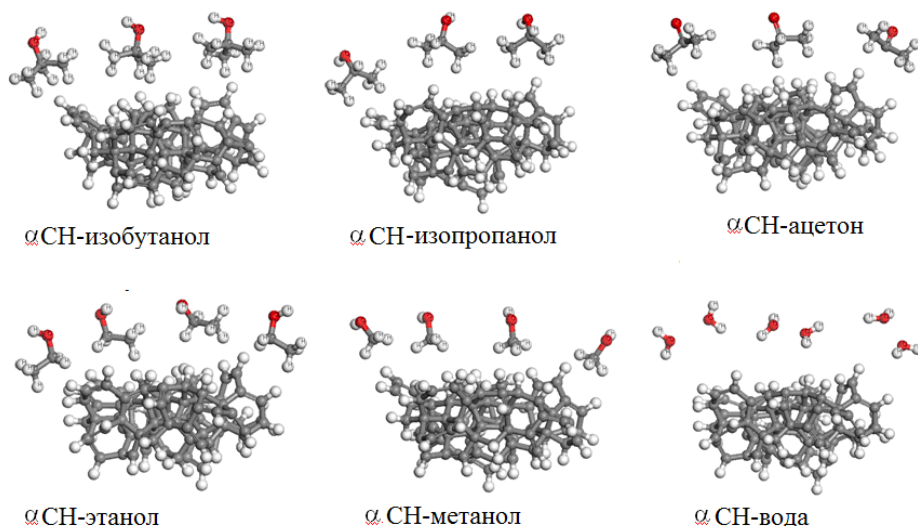


Рис.4. КМ оптимизированные структуры адсорбционных комплексов углеродной частицы с молекулами спиртов, ацетона и воды.

В Таблице 1 приведены рассчитанные энергии взаимодействия углеродной частицы с молекулами спиртов, ацетона и воды на один контакт СН...НС.

Таблица 1.

Рассчитанные энергии взаимодействия углеродной частицы (кДж/моль) с молекулами спиртов, ацетона и воды на один межмолекулярный контакт.

	Изобутанол	Изопропанол	Ацетон	Этанол	Метанол	Вода
$\alpha$ СН	20.90	16.72	16.72	33.44	25.08	8.36

При сравнении рассчитанных значений энергий взаимодействия частиц на один межатомный контакт можно сделать вывод о том, в среде каких дисперсионных сред частицы углерода агрегируются меньше. Результаты КМ моделирования показывают, что в случае дисперсионных сред, имеющих достаточно крупные молекулы (изобутанол, изопропанол и ацетон), только часть поверхностных активных групп частиц углерода “закрыта” молекулами дисперсионных сред. В случае дисперсионных сред с малыми размерами молекул (этанол и метанол) практически все поверхностные активные группы частиц углерода “закрыты” и образуют с молекулами этих спиртов связи гидрофобного характера. Контакты с молекулами дисперсионных сред в этом случае энергетически равноценны или превосходят энергии связей между частицами углерода, что препятствует взаимодействию) между углеродными частицами и, как следствие, их агрегации. Вода является плохой дисперсионной средой для коллоидного измельчения аморфного углерода. Результаты КМ моделирования показывают, что меньшие по размеру агрегаты частиц углерода при коллоидном размолле должны образовываться в среде этанола или метанола.

### 3. ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА

Были рассмотрены пути химической модификации углеродного компонента полимерного композита, т.е. модификация поверхности частиц углеродного наполнителя с целью изменения химической природы активных центров его

поверхности вследствие образования химических связей с новыми поверхностно-активными группами.

Исследовали взаимодействие фрагмента полимерной молекулы натурального каучука (полиизопрена) с поверхностью углеродных кластеров, покрытой различными поверхностно-активными группами ( $-H$ ,  $-OH$ ,  $-COO^-$ ,  $-CH_3$ ). Собственно стандартно поверхность углеродных частиц (без модификации) покрыта водородными атомами. В процессе моделирования использовали фрагмент макромолекулы полиизопрена  $CH_3-(CH_2-C(CH_3)=CH-CH_2)_n-CH_3$ , где  $n=10$ . Исходная частица аморфного углерода CN170 содержала 170 атомов углерода и 50 атомов водорода (рис.5,а). Три другие частицы (с модифицированной поверхностью) были получены из этой базовой структуры путем замены поверхностных атомов водорода частицами  $-OH$ ,  $-COO^-$ ,  $-CH_3$ , соответственно. Таким образом, ядро частицы состояло из одного и того же количества атомов углерода, но каждая частица была покрыта поверхностно-активными группами различной химической природы. Оптимизированные в КМ приближении структуры частиц углерода с модифицированной поверхностью представлены на рис.5.

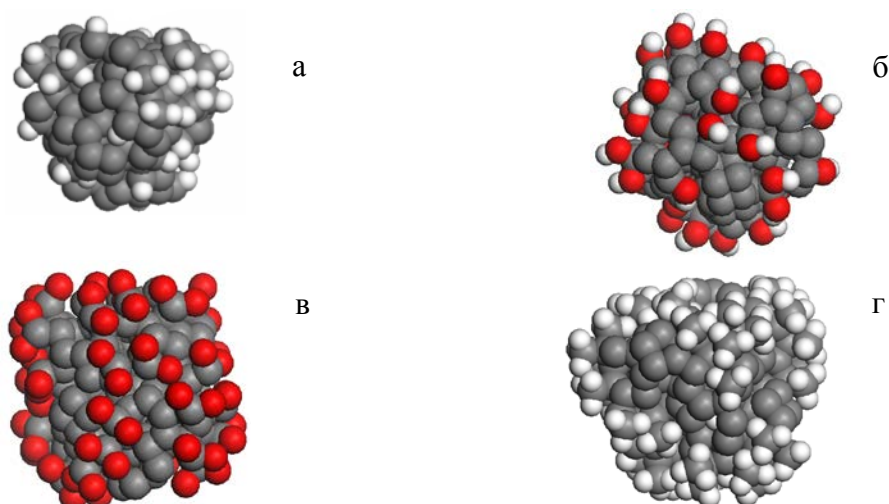


Рис.5. КМ оптимизированные структуры поверхностно-модифицированных частиц углеродного аморфного наполнителя: (а) CN170\_H, (б) CN170\_OH, (в) CN170\_COO<sup>-</sup>, (г) CN170\_CH<sub>3</sub>.

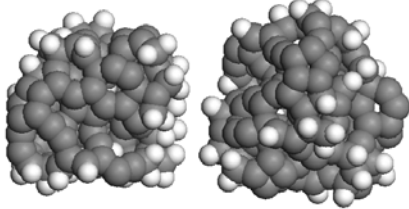
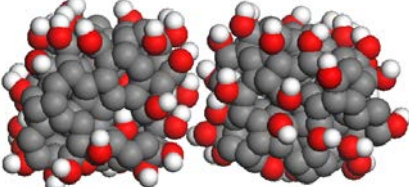
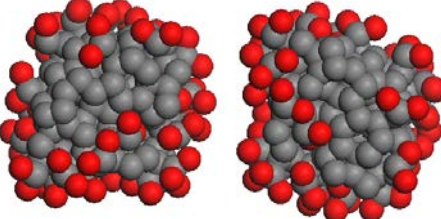
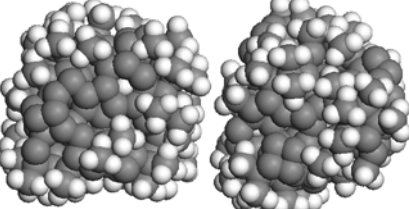
Далее исследовали контактные зоны между взаимодействующими частицам наполнителя (оптимизировали адсорбционный кластер, состоящий из двух однородных частиц и рассчитывали энергию взаимодействия в контактной зоне). В Таблице 2 приведены оптимизированные комплексы, соответствующие минимальные расстояния  $R$  между частицами и энергии взаимодействия  $E_{связ}$  на единицу контактирующей поверхности ( $1A^2$ ).

Данные, представленные в Таблице 2, показывают, что наиболее сильное взаимодействие отмечено у частиц, поверхность которых модифицирована гидроксилами. Межмолекулярное взаимодействие здесь обусловлено образованием водородных связей между гидрофильными поверхностными частицами. Следующая по силе взаимодействия частиц система состоит из двух частиц, покрытых водородом (стандартные углеродные частицы). Здесь взаимодействие обусловлено гидрофобными дисперсионными силами. Наиболее слабое (близкое к отталкиванию) взаимодействие наблюдается в системе двух

частиц, поверхность которых модифицирована карбоксильными поверхностно-активными частицам, однако модификация поверхностными органотфильными группами  $^{-}\text{CH}_3$  также дает положительный эффект.

Таблица 2.

Характеристики взаимодействия частиц углерода с разной поверхностной модификацией, рассчитанные в КМ приближении.

Модификация поверхности	Оптимизированная модель	R, А	$E_{\text{связ.}}$ , кДж/моль
$^{-}\text{H}$		2.0	25.08
$^{-}\text{OH}$		1.2	32.66
$^{-}\text{COO}^{-}$		2.5	9.21
$^{-}\text{CH}_3$		1.6	13.87

Проведенный КМ эксперимент показал, что агрегация (или слипание) поверхностно модифицированных частиц углерода изменяется в ряду поверхностно-активных групп:  $^{-}\text{COO}^{-} <^{-}\text{CH}_3 <^{-}\text{CH} <^{-}\text{OH}$ . Таким образом, для уменьшения агрегации частиц углеродного наполнителя и получения меньших размеров их агрегатов необходимо модифицировать его поверхность карбоксильными ионами. При необходимости увеличения размера агрегатов углеродного наполнителя следует модифицировать его поверхность гидроксилами.

Рассчитанные максимальные силы сдвигового трения  $F_{\text{сдв.МАХ}}$  для комплексов, в которых координаты трения рассчитывались для систем: (1) две углеродные частицы – одна полимерная цепочка движется, (2) две углеродные частицы – три полимерные цепочки, движение полимера в слое рядом с поверхностью наполнителя, (3) две углеродные частицы – три полимерные цепочки, движение полимера в слое, удаленном от поверхности наполнителя, для



всех четырех исследуемых комбинаций полимер-наполнитель представлены на рис.6.

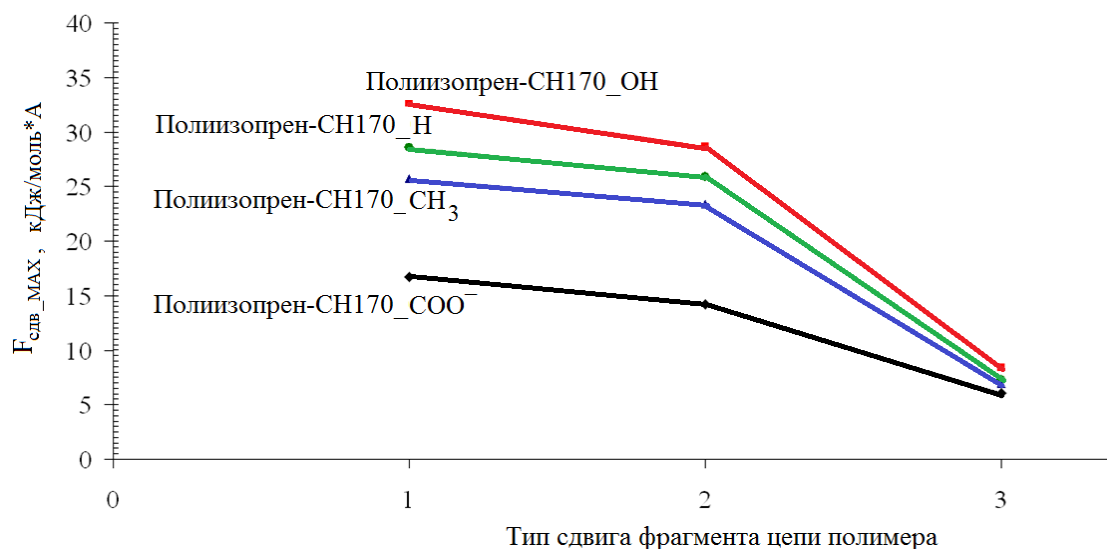


Рис.6. Силы микроскопического трения в межфазных слоях адсорбционных комплексов полиизопрен – модифицированные углеродные частицы.

Из полученных результатов видно, что рассчитанные силы сдвигового трения минимальны, когда контактирующие с фрагментом полиизопрена поверхности углеродных частиц модифицированы карбоксилатами ( $-\text{COO}^-$ ), модификация поверхностными метильными группами ( $-\text{CH}_3$ ) также дает положительный эффект. Для углеродной частицы, модифицированной химически связанными гидроксильными группами ( $-\text{OH}$ ), наблюдается наиболее затрудненное трение в межфазном слое полимер-наполнитель, больше чем у исходной немодифицированной углеродной частицы, покрытой водородными атомами ( $-\text{H}$ ). Таким образом, рассчитанные силы сдвигового трения указывают на те же закономерности, которые были получены при расчете и энергий взаимодействия между частицами  $E_{\text{связ.}}$ , а именно, агрегация поверхностно модифицированных частиц углерода изменяется в ряду поверхностно-активных групп:  $-\text{COO}^- < -\text{CH}_3 < -\text{CH} < -\text{OH}$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами квантовой механики проведены компьютерные исследования адгезионных взаимодействий в адсорбционных комплексах углеродных частиц. В ходе расчетов были определены энтальпии связывания частиц наполнителя друг с другом и с молекулами различных дисперсионных жидких сред (спирты, ацетон и вода). Компьютерные эксперименты моделировали процесс коллоидного размола углеродных частиц наполнителей полимерных композитов в различных диспергирующих средах. При этом было показано, что адсорбционные комплексы агрегируются, удерживаясь рядом посредством межмолекулярных взаимодействий гидрофобного характера. Взаимодействие активных групп на поверхности углерода с молекулами дисперсионных жидких сред может тормозить процесс агрегирования. Установлено, что меньшие по размеру агрегаты углеродных частиц будут образовываться в присутствии дисперсионных сред (спиртов) с малыми размерами молекул.

Кроме того, на основе квантово-механического моделирования было установлено, что агрегация частиц углерода изменяется в ряду поверхностной модификации группами следующим образом:  $-\text{COO}^- \leftarrow -\text{CH}_3 \leftarrow -\text{CH} \leftarrow -\text{OH}$ . Таким образом, для уменьшения агрегации частиц углеродного наполнителя и получения меньших размеров их агрегатов необходимо модифицировать его поверхность карбоксильными ионами. При необходимости увеличения размера агрегатов углеродного наполнителя следует модифицировать его поверхность гидроксилами.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Власов А.Н., Волков-Богородский А.Б., Яновский Ю.Г. Влияние размера включений на механические свойства эластомерных композитов // ДАН. – 2012. – Т.443. – №4. – С.435-437.
2. Яновский Ю.Г., Козлов Г.В., Карнет Ю.Н. Фрактальное описание значимых наноэффектов в среде полимерных композитов с наноразмерными наполнителями. Агрегация, межфазные взаимодействия, усиление // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т.15. – №6. – С.25-41.
3. Яновский Ю.Г., Валиев Х.Х., Корнев Ю.В., Карнет Ю.Н., Бойко О.В., Косичкина К.П., Юмашев О.Б. Роль масштабного фактора при изучении механических свойств композиционных материалов с нанонаполнителями // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2010. – Т.16. – №2. – С.291-304.
4. Яновский Ю.Г., Корнев Ю.В., Юмашев О.Б., Семенов Н.А., Жогин В.А. Способ получения частиц наноразмеров из минерала шунгит / Патент РФ № 2442657, получен 20.02.2012.
5. Яновский Ю.Г., Власов А.Н., Никитина Е.А., Карнет Ю.Н. Анализ теоретической прочности межфазных слоев адсорбционных комплексов полимерных композитных сред // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2007. – Т.13. – №1. – С.33-41.
6. Яновский Ю.Г., Григорьев Ф.В., Никитина Е.А., Власов А.Н., Карнет Ю.Н. Наномеханические свойства нанокластеров полимерных композитов // Физическая мезомеханика. – 2008. – Т.11. – №3. – С.61-74.
7. Yanovskii Yu.G., Kozlov G.V., Zaikov G.E. A nanofiller particles aggregation in elastomeric nanocomposites: the irreversible aggregation model // J. of the Balkan Tribological Association. – 2014. – Vol.20. – N1. – P.93-100.
8. Власов А.Н., Волков-Богородский Д.Б. Параметрический метод асимптотического усреднения для нелинейных уравнений термоупругости // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2014. – Т.20. – №4. – С.491-505.
9. Yanovsky Yu.G., Kozlov G.V., Karnet Yu.N. Mechanism underlying the formation of interphase regions in elastomer dispersely filled composites and its description within the framework of fractal approach // Nanomechanics Science and Technology. An International Journal. – 2011. – Vol.2. – N3. – P.171-183.
10. Яновский Ю.Г., Никитина Е.А., Никитин С.М., Карнет Ю.Н. Нанокompозиты на основе полимерных матриц и минерала шунгита. Квантово-механическое исследование механических свойств, прогнозирование эффекта усиления // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т.15. – №4. – С.145-169.

11. Яновский Ю.Г., Образцов И.Ф., Никитина Е.А. Квантово-механический подход в механике гетерогенных сред // Экологический вестник научных центров Черноморского Экономического Сотрудничества (ЧЭС). – 2003. – №1. – С.84-90.
12. Программный компонент NDDO/sp-spd высокоточных полуэмпирических расчетов в SP- и SPD-базисах, включающий в себя набор программ для получения структурных, электронных, энергетических, деформационных и спектроскопических характеристик атомно-молекулярных систем до 1000 атомов / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №209614949, 2009 год.

*Поступила в редакцию 22 декабря 2014 года.*

---

Сведения об авторах:

Яновский Юрий Григорьевич – д.т.н., проф., дир., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия

Никитина Екатерина Александровна – к.х.н., с.н.с., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия; e-mail: [nikitina.ekaterina@gmail.com](mailto:nikitina.ekaterina@gmail.com)

Никитин Сергей Михайлович – к.х.н., с.н.с., НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцина МГУ им.М.В.Ломоносова, г. Москва, Россия; e-mail: [nikitin.sergey@gmail.com](mailto:nikitin.sergey@gmail.com)

Карнет Юлия Николаевна – к.ф.-м.н., уч.секр., ФГБУН Институт прикладной механики РАН, г. Москва, Россия; e-mail: [iam@iam.ras.ru](mailto:iam@iam.ras.ru)