

СТРУКТУРА ЦФ РАН

ЦФ РАН был организован 8 октября 1996 г. Постановлением Президиума РАН на базе Отдела фотохимии ИХФ АН СССР, созданного в 1987 году приказом-распоряжением Минхимпрома СССР и АН СССР.

ЦФ РАН работает в области структуры, динамики и фотоники супрамолекулярных систем и наноструктурированных материалов. Деятельность Центра направлена на проведение фундаментальных, прикладных исследований и подготовку специалистов.

Научные исследования ЦФ РАН проводятся по трем основным направлениям:

- 1) синтез, исследование и моделирование спектральных и фотохимических свойств молекул, комплексов молекул и молекулярных агрегатов;
- 2) исследование и моделирование структуры и оптических свойств микро- и наночастиц и упорядоченных ансамблей на их основе;
- 3) получение и моделирование наноструктурированных материалов и устройств фотоники (хемочипов, светодиодов, фотонных кристаллов и т.д.) (таблица 1).

Таблица 1. Основные направления научной деятельности (темы научных направлений) ЦФ РАН

44. Фундаментальные основы химии.	45. Научные основы создания новых материалов с заданными свойствами и функциями, в том числе высокочистых и наноматериалов.	
1	2	3
Синтез, исследование и моделирование спектральных и фотохимических свойств молекул, комплексов и агрегатов на их основе.	Получение, исследование и моделирование структуры и оптических свойств микро- и наночастиц и упорядоченных ансамблей на их основе.	Дизайн, моделирование и исследование наноструктурированных материалов и устройств фотоники (хемочипов, светодиодов, фотонных кристаллов и т.д.).
Распределение лабораторий по темам		
Квантовой химии и молекулярного моделирования Фотоники красителей Сенсорики Синтеза и	Самоорганизации наночастиц и фотоники ансамблей наночастиц Квантовой химии и молекулярного	Сенсорики Фотохромных систем

супрамолекулярной химии фотоактивных соединений Фотохромных систем Динамики люминесцирующих супрамолекулярных систем	моделирования Структуры и динамики молекулярно-организованных систем Фотохромных систем	
--	---	--

В Центре работает 1 академик РАН, 4 члена-корреспондента РАН, 12 докторов наук (средний возраст – 65 лет), 30 кандидатов наук (из них 13 защитили диссертации в период 2006-2010 гг., средний возраст 47 лет).

В настоящее время в ЦФ РАН 8 лабораторий: Лаборатория самоорганизации наночастиц и фотоники ансамблей наночастиц, Лаборатория квантовой химии и молекулярного моделирования, Лаборатория структуры и динамики молекулярно-организованных систем, Лаборатория фотоники красителей, Лаборатория синтеза и супрамолекулярной химии фотоактивных соединений, Лаборатория сенсорики, Лаборатория фотохромных систем, Лаборатория динамики люминесцирующих супрамолекулярных систем.

Прикладные исследования ЦФ РАН ведутся в быстро развивающейся области техники – печатной электронике – разработке и производству источников света, фотовольтаических батарей, интегральных схем, сенсорных устройств на гибкой основе. Основные исследования Центра в этой сфере направлены на разработку высокочувствительных флуоресцентных хемосенсорных материалов на гибкой основе для контроля летучих веществ.

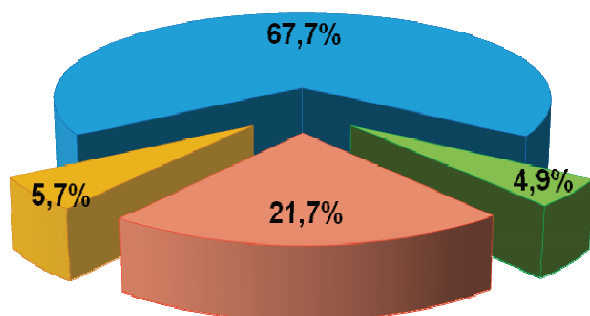
Бюджет Центра фотохимии состоит из базового финансирования РАН и дополнительного финансирования. Доля дополнительно привлеченных средств, как правило, значительно превышает объем ежегодно получаемых от РАН средств (рис. 1).

Рис. 1 Структура источников финансирования ЦФ РАН.

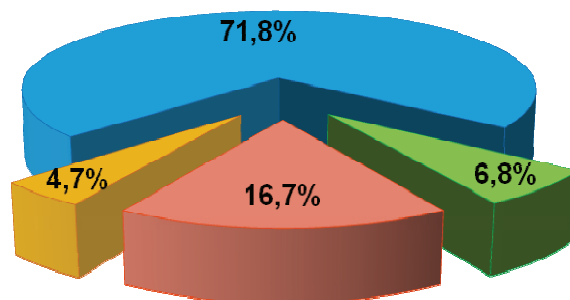
Год	Бюджет Базовый	Бюджет Программы РАН	Внебюджет ПД (Контракты)	Внебюджет ЦС (Гранты РФФИ)	Аренда и т.д.	Бюджет Гранты
2008	22 222 053	5 829 147	69 336 670	4 992 899		
2009	23 138 000	6 577 000	99 789 158	9 425 000		
2010	22 801 000	4 105 000	85 733 000	5 323 700		

2011	26 297 000	4 075 000	51 323 729	7 015 209		
2012	31 360 670	3 320 000	17 830 000	8 175 517	1 967 467	5 000 000

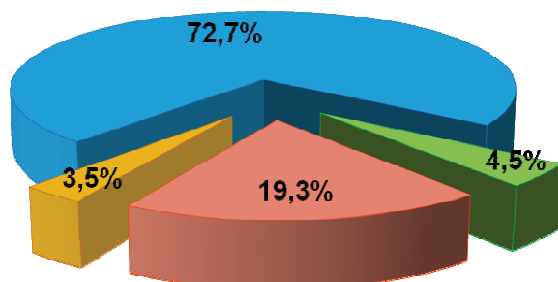
2008



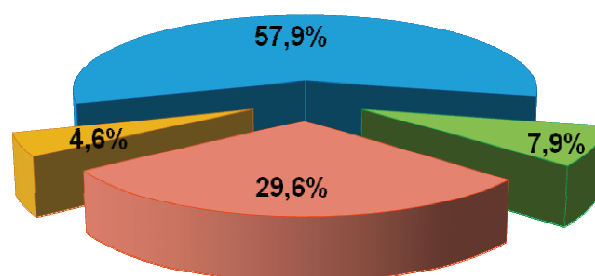
2009



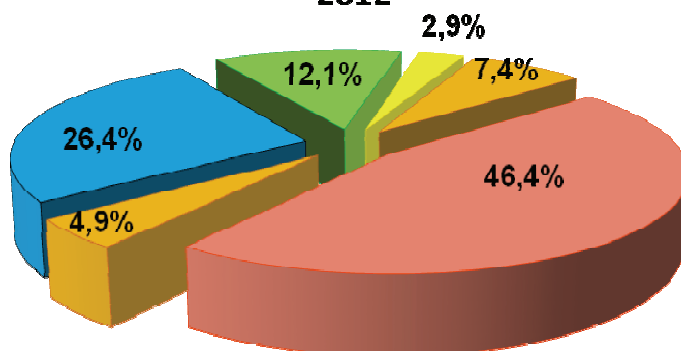
2010



2011

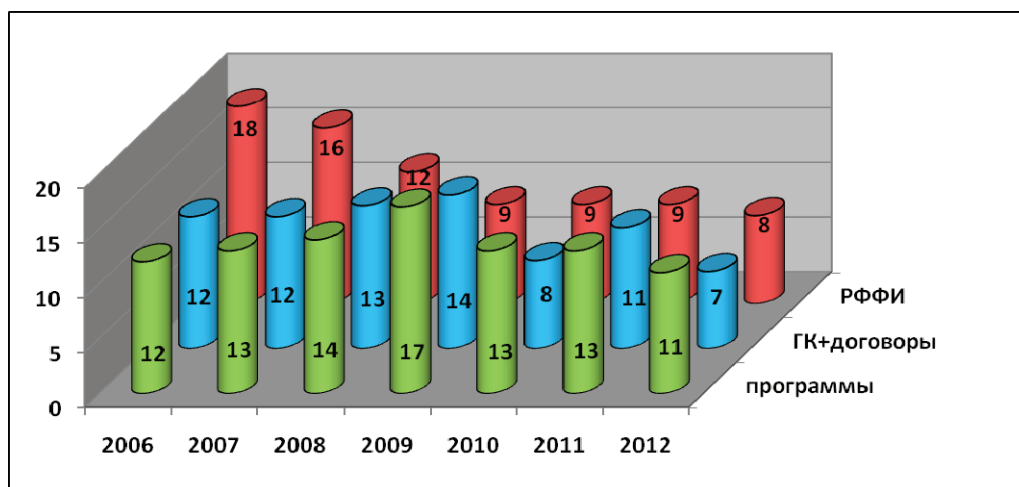


2012





Структура количества конкурсных источников финансирования.



Структура ЦФ РАН

Ученый совет ЦФ РАН:

- разрабатывает и уточняет основные направления научных исследований.

Уточнялись и конкретные направления, например, в 2008 г. в связи с расширением исследований по нанотехнологиям Ученый совет ЦФ РАН принял решение увеличить объем исследований в области самоорганизации молекул и наночастиц.

- корректирует структуру Центра.

В связи с уточнением в 2009 году тематики исследований ЦФ РАН были реорганизованы две лаборатории: Лаборатория фотохимии супрамолекулярных систем и Лаборатория аналитического приборостроения. На базе названных лабораторий созданы Лаборатория сенсорики и Лаборатория самоорганизации наночастиц и фотоники ансамблей наночастиц.

- ежегодно рекомендует к утверждению программы и планы научно-исследовательских работ, обсуждает и утверждает важнейшие результаты деятельности для представления в годовой отчет РАН (заведующие лабораториями и руководители групп представляют важнейшие результаты полученные за прошедший год, например, в 2010 г. наилучшим был признан результат проф. Базилевского В.М.), отчеты директора и руководителей научных подразделений о результатах научно-исследовательских работ.

Ученый совет ЦФ РАН регулярно:

- заслушивает научные доклады (заведующие лабораториями и руководители групп представляют важнейшие результаты в исследованиях по своим темам, достигнутые за определенный период времени, например, за прошедший год были заслушаны научные доклады по теоретическим исследованиям за 5 лет. В результате было выявлено недостаточное согласование исследований теоретиков и даны рекомендации теоретическим группам более тесно сотрудничать друг с другом, а также создать объединенный теоретический семинар (семинар создан, руководитель проф. Багатурьянц А.А.);

- представляет сотрудников к присвоению ученых званий (доцента - Петрову Н.Х. в 2010 г.);

- рекомендует к защите диссертаций на соискание степени кандидата наук (за отчетный период прошли предзащиты 13 кандидатских диссертаций, самый плодотворный период пришелся на 2010 г. - наилучшие предзащиты Рудяк В.Ю., Ионова И.В., Минибаев Р.Ф., все успешно защитились);

- выдвигает кандидатов в члены-корреспонденты РАН (в 2008 г. звание члена-корреспондента РАН присвоено Громову С.П.);

- избирает научных сотрудников, принимаемых по конкурсу (всего за отчетный период принято на работу по конкурсу 7 сотрудников, из них 2 в.н.с., 3 с.н.с., 1 н.с., 1 зав. лаб. В 2007 г. - 1 в.н.с., 1 с.н.с., 1 н.с., 1 зав. лаб., в 2008 г. - 1 с.н.с., 2009 г. - 1 в.н.с., ученый секретарь, 2010 г. - 1 с.н.с.);

- избирает тайным голосованием научных сотрудников, делегируемых в состав Общего собрания РАН и Общего собрания ОХНМ РАН (Громов С.П., Петров Н.Х.).

В ЦФ РАН проводится **Общеинститутский семинар** (в среднем 1 раз в месяц) где заслушиваются представления к печати публикаций сотрудников и проводятся выступления приглашенных ученых по наиболее актуальным научным вопросам (например, в 2010 г. на семинаре выступили ак. Кульчин Ю.Н., ак. Музафаров А.М., проф. Чалых А.Е.).

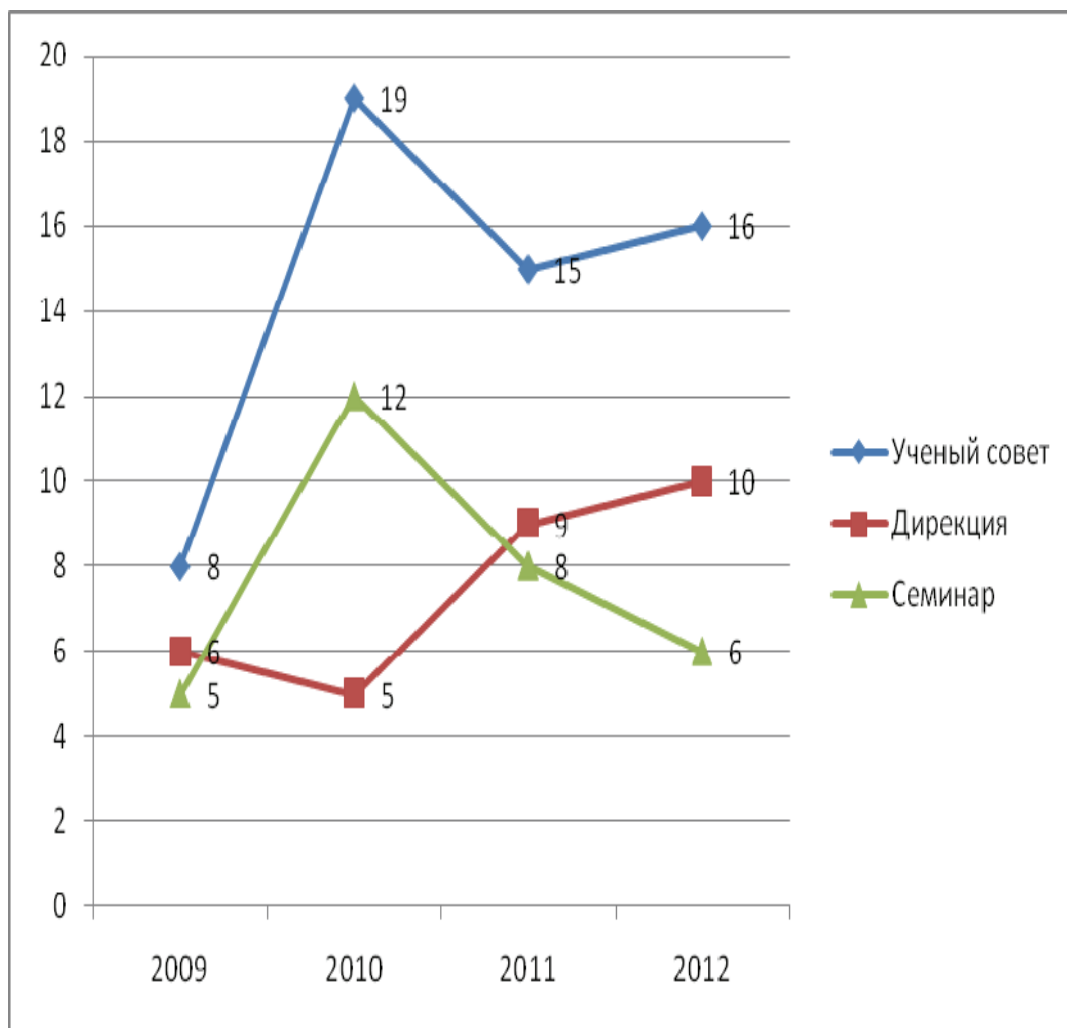
Наиболее важные организационно-административные вопросы решает **Дирекция ЦФ РАН** (8 членов, проводится в среднем 1-2 раза в месяц, в 2011 г. утвержден новый состав).

Для более активного вовлечения молодых ученых в научную жизнь ЦФ РАН в начале 2011 г. был организован **Совет научной молодежи**.

Рис. 2 Структура ЦФ РАН



Рис. 3 Динамика заседаний административно-научных структур ЦФ.



Результаты научной деятельности – публикации, патенты, доклады на конференциях.

Ежегодно сотрудниками ЦФ РАН выпускается в среднем около 56 статей, всего за период существования ЦФ вышло около 800 статей. Средняя цитируемость в год – 203, индекс Хирша — 27 (см.таблицу). В ЦФ также, в результате проведения прикладных разработок (в основном, это работы по государственным контрактам), появляются охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), ежегодно в среднем регистрируется 2-3 патента на изобретения и другие РИД (рис. 4а).

ФИО	долж.	Цит.	Хирш.	кол-во	цит. Ср. на статью	цит. Ср. В год
Алфимов МВ	завлаб	3970	27	526	7.55	120.3
Авакян ВГ	внс	339	11	60	5.65	10.27
Айт АО	снс	40	3	14	2.86	1.54
Аристархов ВМ	снс	16	2	16	1	0.62
Атабекий ЛС	снс	168	7	26	6.46	5.6
Багатурьянц АА	завлаб	810	15	121	6.69	24.55
Базилевский МВ	внс	1623	22	130	12.48	49.18
Барачевский ВА	завлаб	692	11	182	3.8	20.97
Ведерников АИ	внс	765	15	99	7.73	40.26
Горелик АМ	снс	15	3	14	1.07	0.52
Громов СП	завлаб	2483	24	252	9.85	75.24
Дмитриева СН	снс	114	7	27	4.22	6.71
Егоров ВВ	внс	100	7	14	7.14	5.88
Желтиков АМ	снс	5420	35	565	9.59	216.8
Захарова ГВ	снс	312	9	42	7.43	9.75
Иванов АА	снс	823	16	87	9.46	58.79
Комарова КГ (Vladimirova)	снс	23	3	4	5.75	3.83
Кошкин АВ	снс	81	5	15	5.4	6.75
Лебедев-Степанов ПВ	завлаб	29	3	12	2.42	2.42
Лившиц ВА	завлаб	215	9	25	8.6	13.44
Лобова НА	снс	262	10	34	7.71	20.15
Митрохин ВП	снс	158	8	19	8.32	15.8
Молчанов СП	снс	6	2	6	1	0.24
Петров НХ	завлаб	346	10	34	10.18	10.81
Плотников ВГ	внс	209	6	44	4.75	6.33
Разумов ВФ	внс	686	14	114	6.02	22.13
Рыкова ЕА	снс	110	5	31	3.55	4.78
Сажников ВА	внс	78	6	25	3.12	2.44
Сафонов АА	снс	95	4	11	8.64	5.59
Ушаков ЕН	снс	595	17	47	12.66	20.52
Фомина МВ	снс	96	5	16	6	4.17
Чибисов АК	завлаб	1295	20	115	11.26	40.47
Ярославцев АБ	снс	808	12	204	3.96	26.93
Среднее знач. Хирш			10.69697			

Сотрудники Центра фотохимии ежегодно принимают участие в среднем в 30 Международных и Всероссийских конференциях, в результате этого ежегодно публикуются от 70 до 120 тезисов (рис. 4б).

Рис. 4а Количество публикаций и патентов.

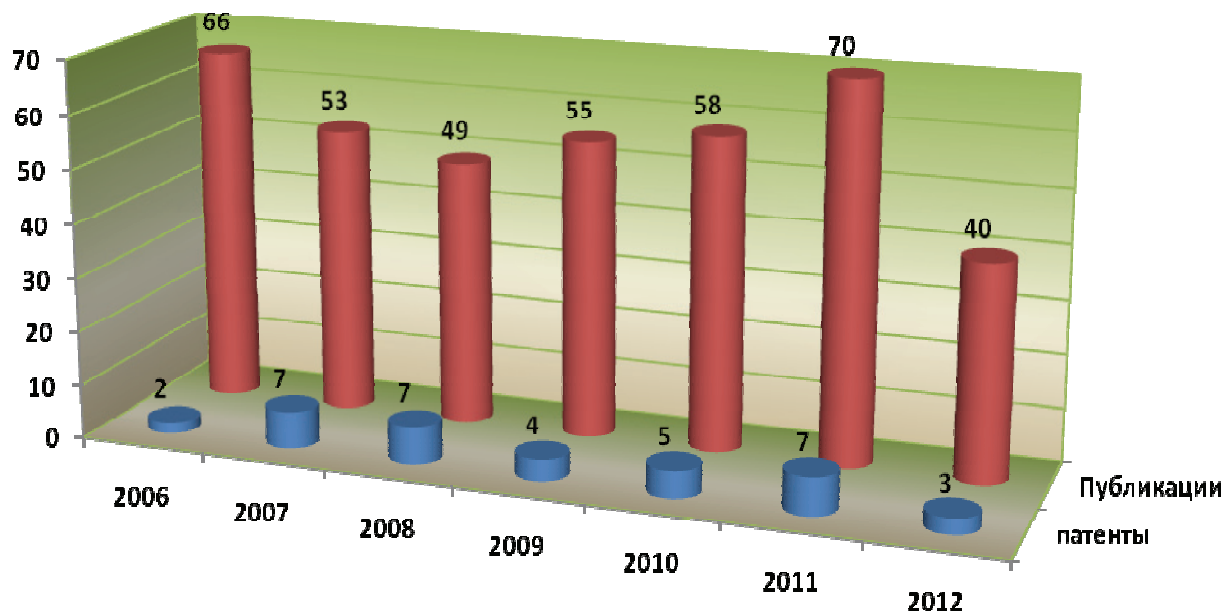
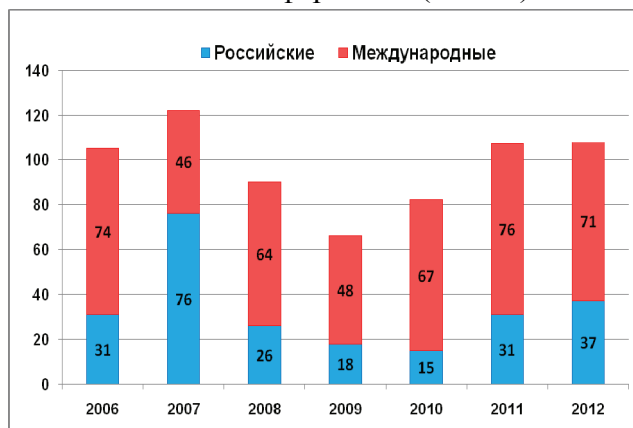


Рис. 4б Количество конференций и их тезисов.

Конференции (кол-во)



Тезисы конференций (кол-во)

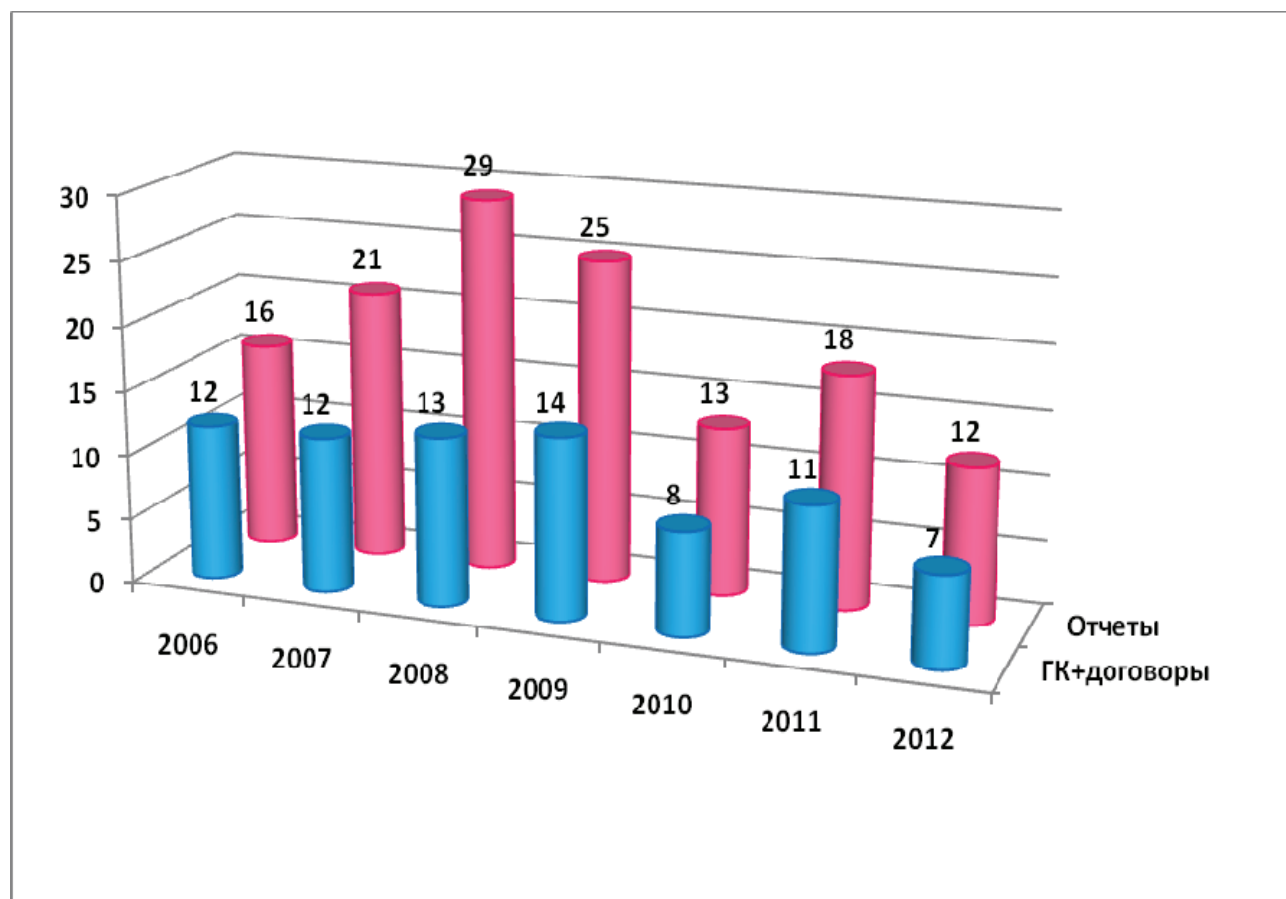


Государственные контракты.

Центр фотохимии РАН успешно проводит работы по государственным контрактам (в их числе и проекты ОКР) и договорам с различными государственными и коммерческими учреждениями (рис. 5). Самое большее число контрактов было выполнено в рамках Федеральной целевой программы (ФЦП) «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 годы и 2002-2006 гг».

Важнейшие результаты, полученные в рамках выполнения этих контрактов, относятся к разработке хемосенсорных наноструктурированных материалов и сенсорных элементов устройств оптического контроля летучих органических соединений в газовой фазе и химических веществ в растворах, а также к разработке органических светоизлучающих диодов (ОСИД), солнечных батарей и фотодетекторов.

Рис. 5 Количество гос. контрактов и договоров, а также отчетов по ним.



Наиболее значимые научные достижения сотрудников ЦФ РАН

за 2006 -2010 гг в области фундаментальных и прикладных исследований:

1. Разработана теория сольватации в бинарных смесях растворителей. В теории впервые явно учтены неоднородности состава и диэлектрической проницаемости, возникающие в таких смесях в присутствии дипольного или ионного субстрата. Теория применена для вычисления (с помощью методов молекулярной динамики и диэлектрической континуальной модели среды) потенциалов эффективного взаимодействия ионных пар в смешанном растворителе, а также распределений межйонных расстояний для этих систем. Теория хорошо описывает наблюдающиеся в эксперименте зависимости квантовых выходов процессов дезактивации флуоресцентных состояний красителя от состава бинарного растворителя (толуола и диметилсульфоксида).

2. Впервые продемонстрирована возможность управления эффективностью внутримолекулярных процессов и бимолекулярных стереоспецифических фотохимических реакций электронно-возбужденных молекул за счет образования фотоактивными молекулами комплексов «гость – хозяин» с кукурбитурилами или циклодекстринами. Этот эффект может быть использован для улучшения характеристик светоизлучающих материалов и высокоэффективного и селективного фотохимического синтеза.

3. Впервые обнаружена и исследована фототопохимическая реакция фотоциклоприсоединения, протекающая как превращение «монокристалл→монокристалл», т.е. без разрушения монокристалла. Были установлены основные закономерности целенаправленного дизайна светочувствительных монокристаллов, в которых реакция фотоциклоприсоединения может протекать не только эффективно, но и стереоселективно, и разработаны методы их получения (самосборки) в растворах. Результаты открывают новые возможности в разработке высокочувствительных светочувствительных материалов.

4. Впервые разработана физическая и компьютерная модели процессов самосборки микро- и наночастиц в испаряющейся микрокапле коллоидного раствора, охватывающая все стадии процесса испарения капли и формирования структуры твердого остатка и объясняющая образование таких наблюдаемых явлений, как различные упаковки частиц и изменение рельефа, движение границы капли по формируемому остатку, кольцевые структуры, доменные структуры в упаковке и различные системы трещин.

Модели базируются на результатах экспериментальных и теоретических исследований зависимости самосборки микро- и наночастиц от типа частиц (плотность, материал, размер, поверхностный электрический заряд), свойств подложки (материал, шероховатость, смачиваемость, угол оттекания, заряд подложки, температура), свойств растворителя (плотность, вязкость, давление насыщенных паров, температура), внешних условий (температура, влажность, асимптотическое давление паров растворителя), внешних силовых полей (акустического и инерции), а также их геометрических и масштабных параметров капли.

Полученные результаты позволяют прогнозировать морфологию и упаковку получаемых ансамблей наноструктур и управлять процессами формирования наноструктурированных материалов нового поколения с задаваемыми функциональными свойствами.

Полученные знания важны для развития технологий производства наноструктурированных материалов хемосенсоров, светодиодов, солнечных батарей и других устройств на гибкой основе.

5. Показано, что сорбированные или химически связанные с поверхностными группами кремнеземных или полимерных наночастиц молекулы флуорофоров (акридиновых красителей, стирильных красителей, флуоресцеина, родаминовых красителей, Нильского красного, дикетонатов дифторида бора и др.) формируют на поверхности наночастиц высокоселективные супрамолекулярные хеморецепторные центры. В состав рецепторных центров входит молекула флуорофора и поверхностные группы. Такие хеморецепторные центры образуют короткоживущие комплексы с молекулами летучих органических веществ. При образовании комплекса спектральные характеристики хеморецепторного центра изменяются, причем характер изменения свойств (изменение спектрального состава, тушение и т.д) зависит от состава и структуры молекул летучего вещества. Разработан комплекс программ компьютерного моделирования строения хеморецепторных центров и расчета спектральных характеристик хеморецепторного центра и его комплексов с молекулами летучих веществ.

Полученные результаты заложили теоретическую основу конструирования и технологии получения наноструктурированных хемосенсорных материалов для систем фотофлуоресцентного контроля широкого спектра летучих химических веществ.

6. Завершена опытно-конструкторская разработка флуоресцентных хемосенсорных наноструктурированных материалов и малобаритных высокочувствительных и селективных сенсоров для контроля летучих ароматических молекул (бензол, толуол, ксилол) в диапазоне концентраций 2-1000 мг./м³ в реальном времени. Сенсоры предназначены для контроля помещений в производствах нефтедобывающей и нефтеперерабатывающей промышленности.

7. Разработан комплекс компьютерных программ, обеспечивающих компьютерное моделирование структуры и свойств наноструктурированных флуоресцентных материалов для хемосенсорных, светоизлучающих, фотовольтаических устройств.

Комплексы программ используются в Центре фотохимии при разработке наноматериалов и российских университетах (Екатеринбургский Гос. университет, Иркутский Гос. университет, Санкт-Петербургский горный университет) при подготовке специалистов.