Первым химиком, проводившим термодинамические исследования в Московском университете, был, по-видимому, Иван Алексеевич Каблуков (1857-1942). Он изучал давления паров над водными и водно-спиртовыми растворами солей, их объемные свойства, исследовал фазовые равновесия и диаграммы солевых систем, ввел в теорию электролитов представления о сольватации ионов. Докторская диссертация И.А. Каблукова, защищенная им в 1881 г., называлась «Современные теории растворов (Вант-Гоффа и Аррениуса) в связи с учением о химическом равновесии». С 1884 г. он читал лекции по физической химии в Московском университете. Вот как отзывался о своем учителе один из его многочисленных учеников: «Каблуков сделал больше, чем кто бы то ни было другой, для распространения в России как физической химии вообще, так и химической термодинамики в частности» [А.Ф. Капустинский. Очерки по истории неорганической и физической химии в России. Изд. АН СССР, М.-Л. 1949, с. 100].

В 1915 г. лекции по химической термодинамике и приложениям математики к химии начал читать приват-доцент Московского университета А.В. Раковский (фото 1) , а в 1930 г. он, уже профессор, стал руководителем новой кафедры физической химии и входящей в ее состав лаборатории галургии – науки о физико-химических свойствах природных солей и технологии их переработки (фото 2а). Эта структура сохранилась и по окончании революционных экспериментов с образованием и высшей школой 1930-1932 гг., в ходе которых химию, а с нею студентов и сотрудников факультета, исключали из Московского университета, а ученые степени и звания отменяли. В 1933-34 гг. такая перестройка завершилась возвратом к старому, и к 1936 г. лаборатория галургии постепенно приобрела свое современное название лаборатории химической термодинамики (фото 2б).

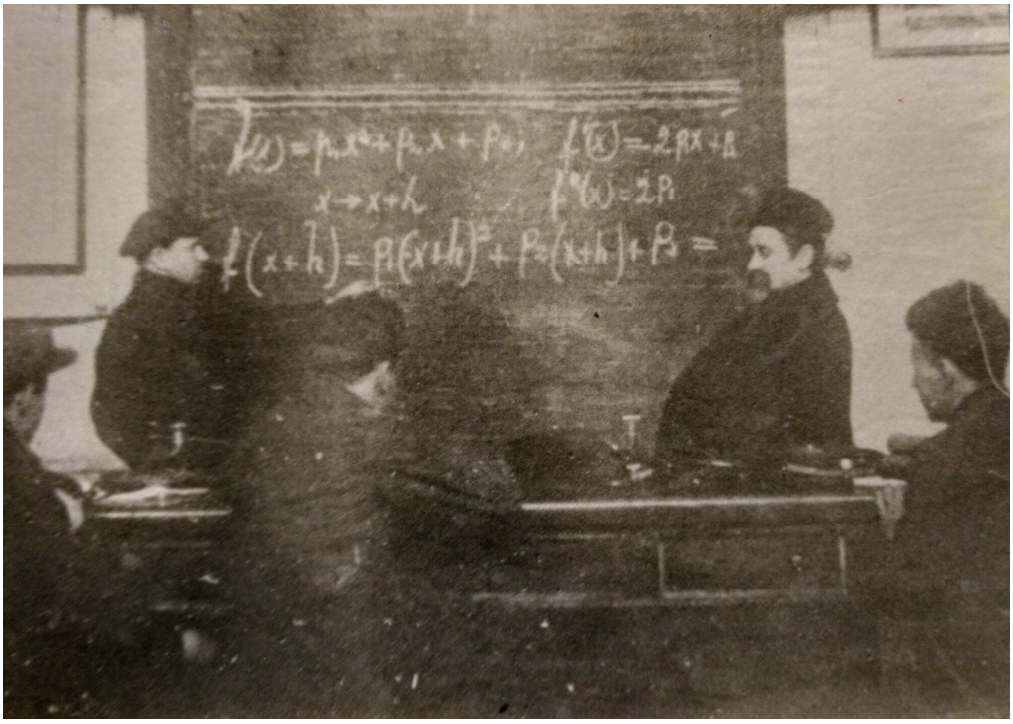


Фото 1. Занятия со студентами ведет проф. А.В.Раковский

ПРИКАЗ № 26

345

о I Московскому Государственному Университету от 26 февраля 1930г

I.

Заместителями Декана Химфака назначаются: Ф.М. Перельман и М. Попов. Секретарем И.Н. Тлц.

2.

Химическое Отделение Физико-Математич.факультета с I/X-29г. деляется в самостоятельный Химический факультет в составе следующих кафедр.

1. Общая и Неорганическая химия
2. Физическая химия
3. Органическая химия
4. Аналитическая химия
5. Биологическая химия
6. Физика
7. Математика
8. Политические предметы.

3.

На Химическом факультете учредить должности:
а/ руководителя военных предметов, в/ руководителя остранными языками.

4.

Поручить деканам Физ.Мат. и Химического Факультетов выработать оэкт выделения кафедры физики для Химического Факультета и оэкт представить на мое утверждение.

5.

При кафедрах, перечисленных в разделе 2, учредить следующие ециальные лаборатории.

По кафедре неорганич.химии:	I.	Лаб.	редких элементов
	2.	"	по цвет.металлургии
	3.	"	радиоактивн.веществ
По кафедре физической химии:	4.	"	технической электрохимии
	5.	"	контактных процессов основ.химич.промышленности.
	6.	"	галлургии
	7.	"	термохимии
	8.	"	фотохимии
	9.	"	технич.коллоидной химии
По кафедре органич.химии:	I0.	"	полупродуктов и красителей
	II	"	нефти
	I2.	"	целлюлозы
	I3.	"	переработки белковых веществ
	I4.	"	катализа органич.веществ.
По кафедре аналитич.химии:	I5	"	аналитической химии
По кафедре биологич.химии	I6	"	биохимии

6.

Инвентарное имущество каждой кафедры и Термической Лаборатории .проф.Лугинина остается в прежнем разделении. Инвентарное имуще- во быв.лаборатории Технической Химии, за исключением имущества

Фото 2а. Приказ №26 от 26.02.1930 г. об образовании химического факультета и выделении в его составе кафедры физической химии и лаборатории галургии

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ХИМИИ М.Г.У.

|Адрес: Москва, Моховая II, тел. I-88-9I|

Институт основан в 1934 году
Имеет 2 сектора: I|Физической Химии - Зав.Член кор.Акад.Наук проф. А.В. РАКОВСКИЙ.
2|Органической Химии- Зав. академик Н.Д.ЗЕЛИНСКИЙ.

Профиль:

Институт ведет научные исследования:

I. По физической химии - в области редких металлов, равновесий бинарных и тройных систем, термохимии твердых растворов и комплексных соединений, поверхностных явлений, кинетических явлений в гетерогенных системах и катализа.

II. По органической химии в области псевдогалоидов, механизма гетерогенных каталитических процессов, изучения нефтей металлоорганических соединений, химического строения белка.

Ведет подготовку аспирантов по специальностям: - неорганической, аналитической, органической, физической химии, электрохимии.

Институт расположен в 2 зданиях совместно с Химическим факультетом, с общей площадью 6.000 кв. метра. Своих общежитий Институт не имеет. В Институте I2 научных лабораторий:

I	Неорганическая	7	Электрохимии
2	Аналитическая	8	Органич. катализа
3	Термодинамическая	9	Нефти
4	Термохимическая им.проф.Лугинина.	I0	Органического синтеза
		II	Металлоорганическая
5	Кинетика	I2	Белковая
6	Неорганич.катализа		

Библиотека Института соедржит 5060 томов.

Бюджет Института в 1935 г.

Гос. средства - 354931 р.
Спец.средства - 493940 р.
Итого- 848871 р.

Фото 2б . Справка о Научно-Исследовательском Институте Химии (1934 г.); в составе института выделена лаборатория термодинамики, но слово «химическая» еще отсутствует, оно появится в документах и статьях, начиная с 1936 г.

Основатель лаборатории Адам Владиславович Раковский (1879-1941) был талантливейшим человеком, ученым и педагогом, много сделавшим для химической науки, образования и промышленности. Не умаляя заслуг других крупных ученых-химиков, работавших в Московском университете до него, следует отметить, что А.В. Раковский первым в России стал последовательно применять гиббсовскую термодинамику, как в преподавании, так и в своих научных трудах. «В мое время физическая химия сводилась только к развитию, главным образом, «идей Аррениуса и Оствальда». А.В. первый вводит в курс основу физической химии – термодинамику и ее новейшую основу – строение материи » – писал профессор М.М. Попов [Адам Владиславович Раковский. ВХО им. Д.И.Менделеева. Москва. 1949 г., с.14]. Заслугой А.В. Раковского совместно с его учеником, Я. И. Герасимовым, является издание в 1932 г. на русском языке первого в России учебника по химической термодинамике Дж. Р. Парктингтона, основанного на работах Гиббса. «Обаятельный в личных отношениях, всецело преданный науке и глубоко понимавший практическое значение ее, необыкновенно трудолюбивый и усидчивый, блестящий лектор и оратор, А. В. мог служить для нас примером ученого и практического деятеля», писал о нем Е.С. Пржевальский [Адам Владиславович Раковский. ВХО им. Д.И.Менделеева. Москва. 1949 г., с.5].

Научная работа

В начальный период существования лаборатории в ней было немного штатных сотрудников. В публикациях того времени встречаются фамилии А.В. Раковского, Д.Н. Тарасенкова, Я.И. Герасимова, Л.Л. Клячко-Гурвича, А.В. Бабаевой, А.В. Командина, а в 40-е годы к ним добавились А.К. Бонецкая, А.А. Зильберман-Грановская, К.А. Дулицкая, А.В. Никольская, Ю.П. Симанов (фотографии некоторых сотрудников лаборатории тех лет показаны ниже, фото 3, 4). Объектами экспериментов были водные растворы хроматов, сульфатов, нитратов и водно-спиртовые растворы солей, главным образом растворимость солей и фазовые диаграммы соответствующих систем при атмосферном давлении и температурах до 100°. Были изучены свойства 27-ми тройных систем и одной четверной системы. Результаты применялись при разработке промышленных методов разделения и очистки солей, чем непосредственно занимался и А.В. Раковский. В конце 30-х годов возникла потребность в развитии производств, основанных на пирометаллургических процессах. Соответственно изменились вещества и методы исследования. Измеряли давления насыщенных паров галогенидов, в основном хлоридов, и оксигалогенидов тугоплавких металлов при более высоких температурах, чем прежде.

Д.Н.Тарасенков

А.В. Бабаева

А.А. Зильберман-Грановская

А.К. Бонецкая

А.В. Командин

Л.Л. Клячко-Гурвич

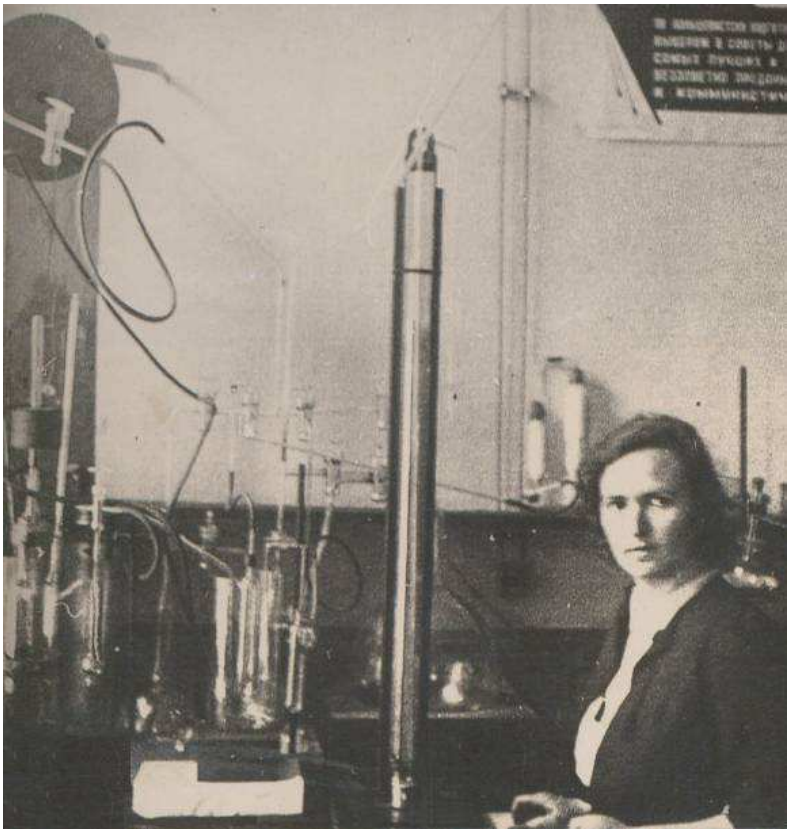
Фото 3. Сотрудники лаборатории 30-40-х гг. XX столетия

Фото 4. Сотрудники, аспиранты и дипломники лаборатории (конец 40-х). В нижнем ряду слева направо А.В. Командин, Я.И. Герасимов, Л.Л. Клячко-Гурвич, в верхнем ряду вторая справа Т.Н.Резухина

А.В. Раковский скончался за несколько дней до начала войны. С ее началом большая часть сотрудников факультета и лаборатории была эвакуирована из Москвы в Ашхабад. Работой оставшихся в Москве руководил

Д.Н. Тарасенков, а эвакуированной частью – Яков Иванович Герасимов (1903-1983). Большинство работ выполнялось в это время непосредственно по заданиям оборонных предприятий. Оставшийся в Москве А.В. Командин участвовал в проекте по созданию антиобледенителя «Термол», а эвакуированный в Ашхабад Л.Л. Клячко-Гурвич в марте 1942 г. вместе с З.А. Иофа был награжден Почётной грамотой Верховного Совета ТССР за образцовое выполнение правительственного задания по разработке технологического процесса производства свинцовых аккумуляторов на базе местного сырья.

В 1943 г. после возвращения из эвакуации научным руководителем лаборатории становится Я.И. Герасимов, который к этому времени был уже известным термодинамиком, особенно в среде металлургов, благодаря опубликованной в 1933-1934 гг. совместно с А.Н. Крестовниковым трехтомной монографии «Химическая термодинамика в цветной металлургии». Возобновились экспериментальные работы в лаборатории. Более актуальными стали данные о свойствах тугоплавких оксидов, и кислородсодержащих солей – ферритов, вольфраматов, молибдатов. Изменились экспериментальные методики. На смену измерениям «упругости паров» U-образными ртутными манометрами пришли методы гетерогенных равновесий, такие, как восстановление оксидов водородом с определением количества образовавшейся воды. На фотографии (фото 5) изображена сотрудница лаборатории К.А. Дулицкая, изучавшая упругость пара (давления насыщенного пара) водно-спиртовых систем.



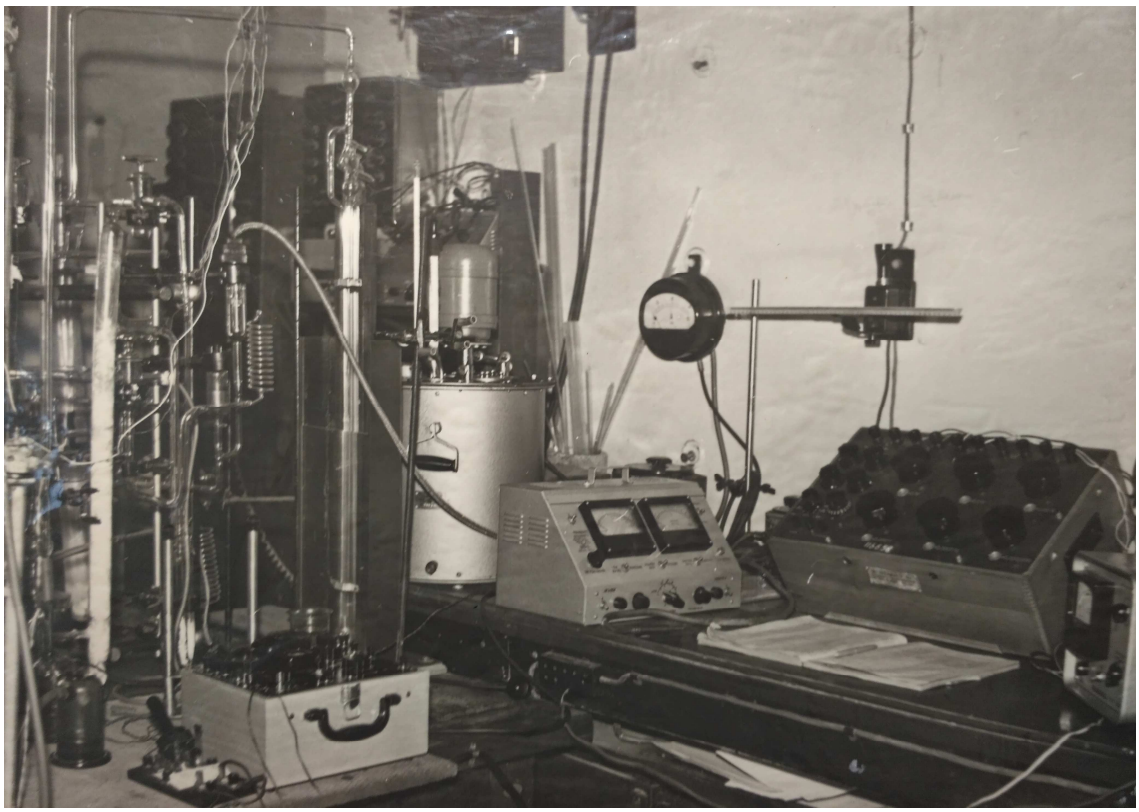


Фото 5. На верхней фотографии сотрудница лаборатории К.А. Дулицкая проводит измерения упругости пара водных растворов метанола (1945 г.); внизу – общий вид установки

В 50-х годах химический факультет, без преувеличения, получает «второе дыхание». Это связано не только с переездом в новые корпуса на Ленинских Горах в 1953 г., но и с общей политикой руководства страны. В мае 1958 года на пленуме ЦК КПСС принято постановление «Об ускорении развития химической промышленности, особенно производства синтетических материалов и изделий из них для удовлетворения потребностей населения и нужд народного хозяйства». В эти годы увеличивается прием студентов на химический факультет, наблюдается рост интереса молодежи к химии в целом, и химической термодинамике, в частности. Выделяются новые ставки для научных работников и преподавателей, организуются межкафедральные лаборатории по отдельным проблемам, например, по химии и физике полупроводников (1962), которой на химфаке руководила академик Александра Васильевна Новоселова (1900 – 1986). На факультете в это время были первоклассные стеклодувная и механическая мастерские, хорошее снабжение лабораторий и учебных практикумов научным оборудованием и химическими реактивами. Число сотрудников и дипломников лаборатории увеличилось по сравнению с предшествующими годами в несколько раз. Такой рост в сочетании с разнообразием выбора актуальных направлений работы не мог не сопровождаться изменением внутренней структуры лаборатории. В ней формируются научные группы, тематики которых зависят уже в значительной степени от интересов и возможностей их научных руководителей.

Общая задача лаборатории в 50–60-е годы оставалась прежней – получение новых данных о термодинамических свойствах веществ, но конечные

цели работы, объекты и методы исследования существенно изменились. Для новых технологий, связанных с развитием атомной энергетики, ракетной техники, полупроводниковой электроники и даже традиционных областей промышленного производства потребовались новые материалы с особыми свойствами. В эти годы в лаборатории были освоены и созданы новые методы исследования и экспериментальные установки, такие как эффузионный метод измерения давлений пара и летучести тугоплавких металлов и сплавов, метод электродвижущих сил с твердым электролитом для изучения кислородсодержащих соединений и фторидов, комплекс методов для синтеза и исследования при высоком вакууме свойств фоточувствительных полупроводников – арсенидов и антимонидов щелочных элементов.

В составе лаборатории 50-60-х годов были научные группы под руководством с.н.с. А.В. Никольской (фото 7), доц. А.В. Командина, доц. Т.Н. Резухиной, с.н.с. А.Г. Аникина, с.н.с. А.М. Евсеева (фото 6).

Фото 6. Группа А.М.Евсеева в 60-70-е гг.: слева направо второй асп.П.И.Ожегов, А.М.Евсеев, Г.В.Евсеева, асп. В.Г.Червин, асп. А.В.Родионов, Л.В.Зенкевич (фото 1967 г.)

Группа Анны Васильевны Никольской (1906-1995), в работе которой непосредственно участвовал и заведовавший лабораторией Я.И. Герасимов, занималась изучением гетерогенных равновесий, а с 1954 г., здесь начинают использовать метод электродвижущих сил (ЭДС). Первая в лаборатории кандидатская диссертация с определением термодинамических свойств твердых сплавов методом ЭДС была выполнена аспирантом из Белоруссии А.А. Вечером в 1959 г. (Алим Александрович Вечер несколько десятилетий возглавлял кафедру физической химии БГУ). Позднее этот метод успешно применялся для изучения оксидных систем. В составе группы в 50-60-е гг. работали И.А. Васильева, В.П. Васильев, В.А. Гейдерих, во второй половине 70-годов они сами стали руководить научными группами.

Фото 7. На фото слева направо сидят: В.А.Морозова, А.В. Никольская, Я.И. Герасимов, стоят: В.П. Васильев, Я.И. Герасимов, В.А.Гейдерих, А.В. Сомов,

Сотрудниками группы Тамары Николаевны Резухиной (1922-1993) в 50-60-е гг. были Ю.Н. Симанов, В.А. Морозова, Р.Д. Куршакова, В.А. Левицкий. Изучали гетерогенные равновесия и термодинамические свойства фаз в оксидных системах на основе редкоземельных элементов. В 1958 г. Т.Н. Резухина защитила докторскую диссертацию на тему «Термодинамические свойства некоторых оксидных соединений и сплавов тугоплавких металлов». С 1959 г. здесь впервые в лаборатории освоили исследование свойств высокотемпературных сплавов методом ЭДС с твердыми электролитами.

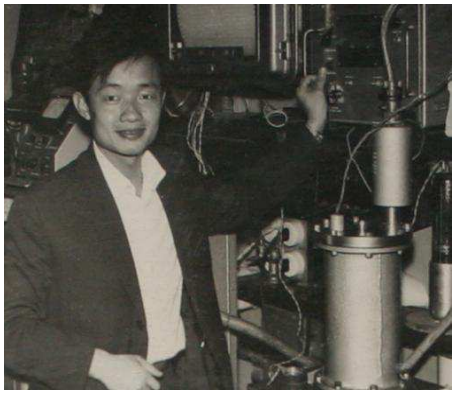
Группу Александра Михайловича Евсеева (1928-1993) вначале составляли Г.Д. Пожарская (Евсеева) и Л.В. Зенкевич, позднее к ним присоединился бывший аспирант А.М. Евсеева, м.н.с. Г.Ф. Воронин. Наряду с экспериментальными исследованиями металлических систем, здесь первыми в лаборатории стали применять методы статистической термодинамики и термодинамические расчеты с использованием появившихся тогда в университете больших ЭВМ. В 1962 г. А.М. Евсеев защитил докторскую диссертацию «Исследования в области термодинамики металлических сплавов».

Научные интересы группы Алексея Герасимовича Аникина (1912-1993) были сосредоточены, в основном, на разделении и очистке веществ, т.е. продолжали традиционные для лаборатории исследования, но с использованием других методов, таких как зонная плавка и центрифугирование. В 1968 г. результаты этих работ были обобщены в докторской диссертации А.Г. Аникина «Вопросы термодинамики и кинетики кристаллизационного разделения органических веществ». А.Г. Аникин ушел с факультета в 1984 г.

А.В. Командин и работавшая с ним А.К. Бонецкая с конца 30-х гг. изучали объемные свойства и диэлектрическую проницаемость органических жидкостей. Эти работы продолжались вплоть до 1959 г.

В 1966 м.н.с., к.х.н. Геннадий Федорович Воронин начал руководить научной группой, в составе которой помимо аспиранта из Вьетнама была м.н.с. Н.М. Мухамеджанова (фото 8). Позднее здесь работали Т.И. Горшкова, М.А. Быков, С.А. Дегтярев, В.А. Лысенко, С.Л. Ягужинский, Н.А. Кульчицкий. Основными объектами исследования были соединения на основе щелочных металлов. Использовались оригинальные экспериментальные установки с молекулярными пучками, например такие, как селектор молекулярных скоростей. Большое внимание уделялось развитию расчетных методов химической термодинамики, а с появлением вычислительной техники, программированию термодинамических расчетов. Группа активно сотрудничала с рядом организаций, заинтересованных в результатах ее работы. Г.Ф. Воронин защитил докторскую диссертацию на тему «Термодинамические исследования промежуточных фаз в сплавах» в 1971 г.

М.н.с., к.х.н. Мухамеджанова Н.М. (1986 г.)



Стажер Шиу Нгуен Тхак (1978 г.)

Фото 8. Первые сотрудники группы Г.Ф.Воронина (70-е гг.)

Фото 9. Проф. Г.Ф. Воронин и С.А. Дегтярев за обсуждением полученных результатов

Фото 10. С.н.с., к.х.н. Л.С.Николаева

В 1973 г. проф. А.М. Евсеев возглавил межкафедральную лабораторию химической кибернетики и до 1985 г. продолжал руководить сотрудниками лаборатории химической термодинамики В.П. Дмитриевым и Л.В. Зенкевич. После его кончины часть сотрудников из лаборатории химической кибернетики перешла в лабораторию химической термодинамики, образовав новую группу, которую возглавила ст.н.с., к.х.н. Лора Сергеевна Николаева (фото 10). В составе группы были Ю.А. Кирьянов, В.А. Султанова, Е.А. Паршикова (фото 11) и Н.Н. Гоменюк. Основными объектами изучения стали биохимические системы, представляющие интерес для разработки медицинских препаратов, препятствующих свертыванию крови.

Фото 11. Инж. Е.А.Паршикова

Фото 12. Доц., к.х.н. И.А.Васильева (1968 г.)

Доцент Ира Алексеевна Васильева (1929-2008) (фото 12) с сотрудницами Ж.В. Грановской (Доброхотовой), Э.Ю. Кушнир, А.Ф. Майоровой, С.Н. Мудрецовой, Л.И. Пожильцовой, Л.П. Огородовой, И.С. Сухушиной изучали оксидные системы методом ЭДС с кислород-ионным электролитами на основе оксидов тория и циркония. Так сложилось, что штатными сотрудниками этой группы были исключительно представители прекрасной половины общества, но среди дипломников и аспирантов били и молодые люди, и девушки. Существует легенда, что представители французской делегации, в конце 70-х посетившие лабораторию, были искренне восхищены красотой сотрудниц группы Иры Алексеевны, но еще большее их удивление и восторг вызвала картина, когда эти изящные и очаровательные женщины в туфельках на шпильках лихо перетаскивали многокилограммовые устройства для поддержания и регулировки температур (в обиходе называемые «вариаками»).

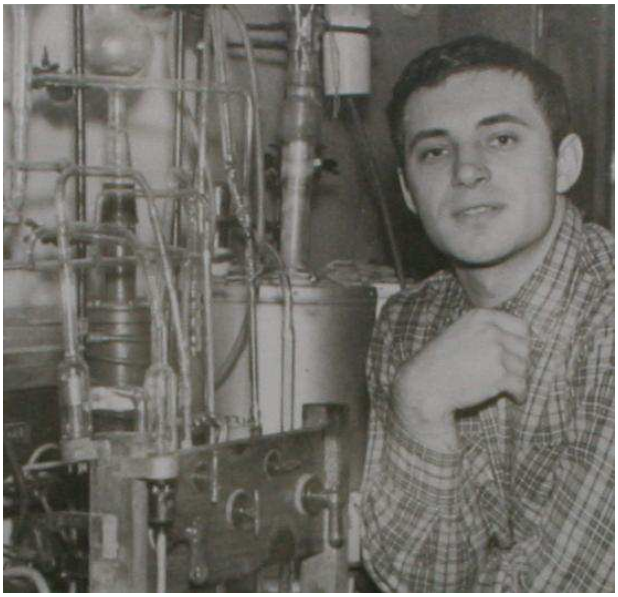
Группа д.х.н. Всеволода Андреевича Гейдериха (1933-1996) изучала металлические сплавы. Начиная с 1977 г. основным методом исследования стал метод мгновенного измерения ЭДС (в англоязычной литературе touch-method). Принципиальным отличием его от обычных вариантов метода ЭДС является получение термодинамических свойств не в условиях равновесного состояния системы, а существенно вдали от него. Такой подход неизбежно связан с необходимостью доказательства корректности получаемых величин, что предполагает значительный объем проводимых экспериментальных измерений. Выполнение их было бы невозможно без кропотливой повседневной работы сотрудников группы (Г.А. Винокуровой, В.И. Горячевой. и

И.Б. Куценка, см. фото 13), дипломников и аспирантов. Во второй половине 80-х в работах группы частично участвовал с.н.с. И.А. Мержанов, взявший на себя труд оформления расчетной части работы.

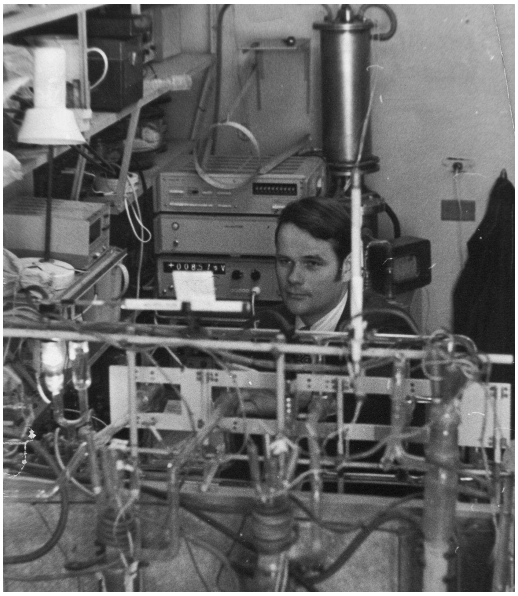
Фото 13. Группа В.А.Гейдериха (конец 80-х). Слева направо: нс Горячева В.И., внс В.А.Гейдерих, снс И.Б.Куценок, дипломница И.Соломонова

Изучению сплавов на основе элементов III группы методом ЭДС с жидким электролитом была посвящена деятельность группы, которую возглавил Валерий Петрович Васильев (в группу входили в разные годы М.Н. Мамонтов, В.И. Морозова, Л.А. Храмцова, М.А. Быков). Результаты почти полувекового исследования этого класса веществ В.П. Васильев обобщил в своей докторской диссертации «Термодинамические свойства и фазовые диаграммы некоторых полупроводниковых и металлических систем» в 2006 г. С начала 90-х большую часть времени В.П. Васильев стал проводить в зарубежных командировках, и эта группа распалась.

Ученик Т.Н. Резухиной с.н.с., к.х.н. Владимир Анатольевич Левицкий (1938-1982) руководил группой, которая развивала метод ЭДС с фторионным электролитом (фото 14, а). После скоропостижной кончины Владимира Анатольевича сотрудники группы С.Г. Попов, Ю.Х. Хекимов, П.Б. Нарчук, Г.А. Чесноков перешли в другие организации, но пришли новые молодые сотрудники С.В. Куцев, М.Л. Ковба, А.В. Згурский, И.А. Успенская. Группу возглавил с.н.с., к.х.н. Юрий Язепович Сколис (фото 14 б). Объектами исследования стали, в основном, керамики, фторидные и оксифторидные фазы. Вскоре группа сократилась до 2-х человек, а с увольнением Ю.Я. Сколиса измерения термодинамических свойств сверхпроводящих и равновесных с ними оксидных фаз на основе разных РЗЭ продолжал с.н.с., к.х.н. М.Л. Ковба (рис.14 в). Со смертью М.Л. Ковбы в 2014 г. эти работы в лаборатории прекратились.



(а) М.н.с., к.х.н. В.А.Левицкий (1968 г.)



(б) С.н.с., к.х.н. Ю.Я.Сколис (1982 г.)

Фото 14. Сотрудники группы В.А.Левицкого Слева направо: инж. Л.А.Храмцова, инж. Ф.М.Путилина, с.н.с., к.х.н., М.Л.Ковба (1986 г.)

В 1984 г. после ухода с факультета А.Г. Аникина группу возглавила с.н.с. Г.М. Дугачева. Ст.н.с., к.х.н. Наталья Васильевна Авраменко занялась самостоятельными термоаналитическими исследованиями различных органических систем. Многолетнее научное сотрудничество Н.В. Авраменко с проф., д.х.н. М.В. Коробовым в 2003 г. привело к образованию еще одной научной группы, занимающейся изучением систем на основе различных форм углерода.

С конца 60-х до начала 80-х годов исследования проводились по трем основным госбюджетным темам «Химия и термодинамика редких элементов и многокомпонентных систем», «Теоретическое и экспериментальное изуче-

ние строения веществ», «Разработка теории и методов получения и анализа особо чистых веществ». Это был период интенсивного накопления данных о термодинамических свойствах различных систем – керамик, сплавов, органических и неорганических веществ. Лаборатория активно сотрудничала с институтами РАН, отраслевыми институтами, крупными отечественными предприятиями (ЗИЛ, МЭЛЗ).

Одним из направлений работ лаборатории в это время было участие в создании новых и совершенствовании существующих приборов, в частности, полупроводниковых электронных приборов, которые начали быстро вытеснять вакуумные электронные лампы, фотоэлементы, умножители и многие другие громоздкие и энергоемкие изделия электронной техники. Основными партнерами и заказчиками были ВНИИФТРИ (Всероссийский Научно-Исследовательский институт Физико-Технических и Радиотехнических Измерений ФГУП) и ИПФ (Институт Прикладной физики РАН). Сотрудники этих организаций участвовали в постановке задач и анализе результатов, но, что было особенно ценным, нередко помогали изготовить в своих мастерских отдельные детали экспериментальных установок, требующие особого оборудования и квалификации мастеров.

Во ВНИИФТРИ в качестве хранителя национального стандарта частоты и времени тогда применялись квантовые генераторы частоты с атомными пучками цезия. Проблема заключалась в загрязнении прибора цезием, из-за чего приходилось периодически его останавливать и чистить. В лаборатории химической термодинамики были выполнены теоретические и экспериментальные исследования, позволяющие увеличить направленность излучения эффузионных источников пучков, а для уменьшения фона разработан поглотитель паров цезия на основе медно-галлиевого сплава. Созданная при этом теория диаграмм направленности эффузионных источников химически реагирующих молекулярных пучков позволила объяснить непонятные результаты, которые в течение нескольких лет получали масс-спектрометристы, изучавшие диаграммы направленности у веществ, которые содержали в парах ассоциированные молекулы. Частично результаты этих исследований обобщены в работах [Воронин Г.Ф., Кульчицкий Н.А. Диаграммы направленности молекулярных пучков – молекулярная эффузия цезия в присутствии химических реакций на стенках канала // *ЖФХ*, 1977, том 51, № 12, с. 3089-3092], [Voronin G.F. Use of Directional Patterns of Molecular Beams in Masspectrometric Investigations of Vapours of Complex Molecular Composition // *Int. J. Mass Spect. and Ion Phys*., 1982, V. 43, p. 1-15].

Партнеров из ИПФ и некоторых других организаций интересовали фоточувствительные материалы, как новые, так и уже применявшиеся при производстве фотоэлементов и фотоумножителей: условия их получения, стабильность характеристик во времени, ее зависимость от химического состава, температуры, толщины слоя, материала подложки, внешней атмосферы. Конкретными объектами исследования были свойства, процессы образования и разрушения полупрозрачных пленок соединений сурьмы и мышьяка со щелочными элементами (многощелочные фотокатоды), и соединения $A^{III}B^{V}$, та-

кие как арсенид галлия с адсорбированным на нем цезием (фотокатоды с отрицательным электронным сродством). Полученные в лаборатории данные позволили оптимизировать некоторые технологические операции и найти условия, при которых фотокатоды являются термодинамически устойчивыми. Например, было показано, что фотокатоды с отрицательным электронным сродством на основе арсенида галлия в условиях синтеза и эксплуатации не являются системами термодинамически устойчивыми, но их можно стабилизировать окислением.

В составе Научного Совета АН СССР по полупроводниковому материаловедению работала секция химической термодинамики полупроводников, представители лаборатории входили и в состав Научного Совета АН СССР по материалам электронной техники. Эти организации были инициаторами многих конференций, симпозиумов, совещаний, школ по химической термодинамике полупроводниковых материалов, проводившихся в разных городах СССР и за рубежом. В 1981 г. за цикл исследований по химической термодинамике полупроводников Я.И. Герасимову и Г.Ф. Воронину в составе авторского коллектива присуждена государственная премия СССР.

Теоретические работы этого периода были направлены, главным образом, на анализ взаимосвязей фазовых диаграмм с термодинамическими свойствами фаз и возможностей совместного использования этих данных для расчета термодинамических функций веществ. Был предложен новый вид термодинамических функций – парциальных термодинамических функций гетерогенных смесей. Показана их связь с диаграммами состояний и термодинамическими свойствами фаз, особенности зависимости от химического состава, которые необходимо учитывать при измерениях и расчетах термодинамических свойств гетерогенных систем. Систематизированы методы расчетов термодинамических свойств фаз в гетерогенных системах с использованием данных об условиях фазовых равновесий (фазовых диаграммах). Из множества возможных задач выделены задачи термодинамически корректные (для их решения не обязательно использовать априорные выбранные модели зависимости термодинамических свойств фаз от параметров состояния). Выяснено, какие дополнительные данные позволяют перевести некорректные задачи в корректные. Предложен новый метод аппроксимации сплайнами зависимостей термодинамических свойств двухкомпонентных растворов от концентрации, позволяющий описывать сразу и интегральные и парциальные функции растворов. Эти результаты опубликованы, в частности, в работах [Воронин Г.Ф. Парциальные термодинамические функции гетерогенных смесей и их применение в термодинамике сплавов. Современные проблемы физической химии. Москва. Изд-во МГУ, 1976г., т.1, с.29 - 48], [Degtyarev S.A., Voronin G.F.1 Solution of ill-posed problems in thermodynamics of phase equilibria. The ZrO_2 - Y_2O_3 system // *Calphad*, 1988, V.12, № 1, p. 73-82], [Воронин Г.Ф. Расчеты термодинамических свойств сплавов с использованием диаграмм фазовых состояний. Математические проблемы фазовых равновесий. Новосибирск, «Наука» СО, 1983, с. 5 - 40].

С накоплением данных о термодинамических свойствах веществ и быстро растущей потребностью в них появилась необходимость их совместного анализа, упорядочения и публикации результатов в справочниках, предназначенных для специалистов определенного профиля, аналогично тому, как это делалось ранее с термодинамическими свойствами конкретных «рабочих тел», например воды, в обычной, технической термодинамике. В 60-80-е гг. сотрудники лаборатории участвовали в издании 10-томного справочника «Термические константы веществ», а в 70-е – справочника «Физико-химические свойства полупроводниковых веществ».

В 70-х годах на химическом факультете раз в месяц собирался организованный лабораторией научный семинар по расчетным методам химической термодинамики и их применениям для построения фазовых диаграмм. Активное участие в его работе принимали Дина Семеновна Каменецкая и Илья Львович Аптекарь – образованные и опытные специалисты в этой области химической термодинамики. Большую роль в распространении и развитии химической термодинамики, и особенно ее расчетных методов, сыграл новосибирский ИНХ СО РАН и его директор, бывший аспирант лаборатории химической термодинамики, Федор Андреевич Кузнецов (1932-2014), регулярно проводившие конференции и школы, участники которых собирались со всего Советского Союза. Для обучения термодинамике и ее применениям в химии студентов, аспирантов и молодых сотрудников ежегодно с 1980 по 1987 г. организовывали под Москвой выездные «Школы молодых ученых».

Во второй половине 80-х темой, объединившей усилия большинства сотрудников лаборатории, стало изучение высокотемпературных сверхпроводников. Работы по высокотемпературной сверхпроводимости начались в лаборатории в 1986 г. почти сразу же после сообщений об обнаружении этого явления в смешанном купрате бария и лантана. Этому способствовали исключительная активность соседей-физиков, которые хотя и специализировались на сверхпроводимости, но оказались не подготовленными к получению таких сложных керамических материалов, и наоборот, наличие необходимого оборудования и значительный опыт подобных синтезов у химиков. Физики охотно измеряли при гелиевом охлаждении магнитные свойства и проводимость синтезируемых химиками образцов. Это сотрудничество было взаимно полезным и продолжалось многие годы. В подобных случаях, очевидно, что первое слово за химиками, синтезирующими новые соединения. Но, не редко в лаборатории и на этом этапе работы удавалось оценить вероятность ее успеха, теоретически прогнозируя термодинамические свойства интересующего соединения и условия его равновесия с другими фазами. В лаборатории были синтезированы десятки фаз в сверхпроводниковых системах на основе оксидов РЗЭ и ртути, включая и твердые растворы, и определены энтальпии и энтропии их образования (эти работы вели ст.н.с, к.х.н. Ю.Я. Сколис, с.н.с, к.х.н. М.Л. Ковба,

Фото 15. Доц., к.х.н. А.Ф.Майорова

доц., к.х.н. А.Ф. Майорова (фото 15), с.н.с., к.х.н. С.Н. Мудрецова, аспиранты и дипломники лаборатории).

Были разработаны термодинамические модели упорядочения дефектов в структурах $YBa_2Cu_3O_{6+z}$ (Y123) и $Y_2Ba_4Cu_7O_z$ (Y247), адекватно описывающие экспериментальные данные, в том числе и параметры фазовых переходов с образованием сверхпроводящих состояний, рассчитаны равновесия в системе $YBa_2Cu_3O_6$ - $YBa_2Cu_3O_7$ при разных температурах и парциальных давлениях кислорода, включая области метастабильных состояний фаз Y124 Y247 (проф., д.х.н. Г.Ф. Воронин, ст.н.с., к.х.н. С.А.Дегтярев). При анализе множества опубликованных данных о термодинамических свойствах фазы Y123 (это ~3000 измерений, полученных в 220 экспериментах, выполненных разными методами и опубликованных в 57 статьях) применялась оригинальная статистическая модель, предложенная доц., к.х.н. Е.Б. Рудным, позволяющая оценивать как случайные, так и систематические погрешности измерений. Некоторые этапы этого цикла исследований выполнялись совместно с зарубежными коллегами. Так, эксперименты с расплавами в системе Y-Ba-Cu-O проводили сотрудники Национальной лаборатории Оак Риджа (Oak Righe), а руководили ими и обрабатывали результаты опытов в лаборатории химической термодинамики МГУ. Итогам термодинамических исследований фазы Y123 в прошлом столетии посвящен один из проектов ИЮПАК 2000 г., в котором наряду с российскими участниками (Г.Ф. Воронин и Е.Б. Рудный) были представители США, Канады (С.А.Дегтярев) и Швейцарии (на фото 16 проф. Г.Ф. Воронин и С.А. Дегтярев на конференции НТМС-2006 после доклада о результатах выполнения проекта). Наиболее полно результаты проведенных исследований представлены в работах [Voronin G.F. Thermodynamic characterization of high-temperature superconductors in the yttrium-barium-copper-oxygen system. The Y123 solid solution (Technical report) // *Pure and Applied Chemistry*, 2000, V.72, № 3, p. 463-477], [Voronin G.F. Thermodynamics of high-temperature superconducting materials // *Pure and Applied Chemistry*, 1992, V.64, № 1, p. 27-36], [Воронин Г.Ф., Дегтярев С.А., Сколис Ю.Я. Термодинамические свойства и устойчивость фаз в системе Y-Ba-Cu-O // *ДАН*, 1991, , т.319, № 4, с. 899-905], [Maiorova A.F., Mudretsova S.N., Kovba M.L., Skolis Y.Y., Gorbatcheva M.V., Maso G.N. Thermal analysis of mercury superconductor $HgBa_2CuO_{4+x}$ and its precursor Ba_2CuO_{3+y} // *Thermochimica Acta*, 1995, V.269, p. 101-107], [Лысенко В.А., Кузьменко В.В., Успенская И.А., Воронин Г.Ф. Равновесия сверхпроводящих фаз с расплавом в системе иттрий-барий-медь-кислород // *Журн. Росс. Хим. Об-ва им.Д.И.Менделеева*, 2001, т. 45, № 3, с. 86-92].

Фото 16. Проф. Г.Ф. Воронин и С.А. Дегтярев на конференции НТСМ (г.Вена, 2006)

События конца 80-х – начала 90-х годов в стране серьезно отразились, как на организации, так и на содержании работ лаборатории. Из-за резко ухудшившегося снабжения всем необходимым, включая и материальное обеспечение сотрудников, практически полного отсутствия заинтересованности в научных результатах со стороны прежних партнеров, которые сами испытывали аналогичные трудности, основной задачей было сохранение имеющегося и поиск путей выживания в новых условиях. Сразу же пришлось отказаться от большинства традиционных экспериментов. Например, опыты с синтезом и измерениями свойств тугоплавких веществ, особенно методом ЭДС с твердыми электролитами, продолжаются непрерывно несколько суток, поэтому многие годы в лаборатории существовали ночные дежурства. Организовать их в создавшихся условиях стало невозможным. Некоторые из сотрудников поехали работать за границу, перешли на работу в другие более благополучные организации или стали новоявленными бизнесменами. Последний вариант существования использовался некоторое время и в лаборатории. По инициативе и при содействии нескольких молодых сотрудников лаборатории она стала участником малого предприятия совместно с бизнесменом из Германии, который приехал в Россию для продажи западных товаров, в частности персональных компьютеров и другого офисного оборудования. Лаборатория предоставила ему во временное пользование комнату, в которой разместился его кабинет и несколько новых IBM персональных компьютеров, принтеры и ксерокс. Взамен бизнесмен оплатил «евроремонт» это-

го помещения и предоставил неограниченную возможность работать на своих компьютерах сотрудникам лаборатории. Предприятие просуществовало 2 года. Очень скоро выяснилось, что для лаборатории такая форма кооперации была удачным выходом из создавшегося положения. Новейшая по тем временам вычислительная техника и программное обеспечение, которые с большим энтузиазмом и быстро освоили в лаборатории все, кто мог и хотел это сделать, заложила основы компьютерной грамотности сотрудников и выпускников лаборатории. Это же привлекало в лабораторию молодых людей, студентов и аспирантов (на фотографии 17 молодые сотрудники лаборатории осваивают новый IBM компьютер). Вскоре появились первое разработанное в лаборатории программное обеспечение термодинамических расчетов. Компьютеризация отразилась и на содержании учебных курсов, дипломных работ, а позже, и диссертаций.

Фото 17. Молодые сотрудники группы Г.Ф. Воронина (м.н.с. В.А. Лысенко и инж. С.А. Ягужинский); 1990 г.

Активно искались и другие пути выхода из кризиса. Например, в 1992 г. по инициативе и при активном участии сотрудников лаборатории был создан «Фонд поддержки фундаментальных научных исследований», официально зарегистрированный в Министерстве Юстиции в качестве общественной некоммерческой организации, «созданной для содействия развитию фундаментальных научных работ в области естественных наук». Реализовать эту программу не удалось, в частности потому, что вскоре появились такие серьезные конкуренты, как РФФИ и CRDF, а некоторые из организаторов фонда переселились заграницу.

Работы, выполнявшиеся в лаборатории в конце прошедшего столетия, послужили хорошей основой для термодинамического моделирования реальных процессов, включая экспериментальное определение, оценки и оптимизацию термодинамических данных, расчеты сложных равновесий в многокомпонентных системах, программирование расчетных методов для решения научных, практических и учебных задач, в новом столетии.

В настоящее время основными направлениями научных исследований лаборатории являются:

- экспериментальное изучение термодинамических свойств веществ методами калориметрии, гетерогенных равновесий, потенциометрии;
- расчеты химических и фазовых равновесий, фазовых диаграмм простых и многокомпонентных систем в стабильных и метастабильных состояниях;
- термодинамическое моделирование технологических процессов производства и применения новых веществ и материалов, условий стабильности их свойств и взаимодействий с окружением;
- создание новых и развитие существующих методов оценки термодинамических свойств веществ;
- создание локальных баз самосогласованных термодинамических данных для науки и технологии веществ и материалов;
- развитие методов программирования термодинамических моделей сложных систем, создание программ для термодинамических расчетов.

В начале XXI века получили дальнейшее развитие тенденции, сформировавшиеся в 80-90-е годы XX столетия. В первую очередь, это ориентация на выполнение работ, имеющих конкретное практическое применение, и привлечение молодежи к участию в таких проектах, что позволяет решить сразу несколько проблем, с которыми приходится сталкиваться в настоящее время всем научно-образовательным организациям. Кооперация с представителями реального сектора экономики позволила существенно разнообразить тематики проводимых исследований, расширила кругозор и потенциальные возможности работающих в лаборатории, улучшила финансирование научной работы, частично решила проблему трудоустройства выпускников лаборатории по профилю их подготовки. Большинство аспирантов и дипломников, закончивших обучение в лаборатории в последние годы, работают по специальности в российских или зарубежных научных организациях. Но и среди тех, кто работает в коммерческих структурах, многие так или иначе связаны с химией и лабораторией.

С 2000 по 2015 г. сотрудники лаборатории участвовали в выполнении более сорока договоров о НИР и НИОКР с крупнейшими отечественными и зарубежными компаниями, такими как ОАО «УКХ Уралхим», АО «Уралкалий», ООО «РУСАЛ ИТЦ», ЗАО «Таркетт», НПО «РЕНАМ», ООО «НПФ «Материа Медика Холдинг», BHP «Billiton», «Saint-Gobain» и др. (краткие сведения об основных партнерах лаборатории приведены в виде сноски[1]).

---

[1] АО «ОХК «УРАЛХИМ» (http://www.uralchem.ru/about/) – одна из крупнейших компаний на рынке минеральных удобрений в Российской Федерации, СНГ и Восточной Европе. Компания является российским лидером в производстве аммиачной селитры, а также занимает второе место в России по объемам производства аммиака и азотных удобрений. В продуктовую линейку холдинга наряду со стандартными удобрениями (аммиачная селитра и карбамид) входят инновационные продукты, разработанные с учетом последних тенденций развития мирового рынка минеральных удобрений.
«РУСАЛ» (http://www.rusal.ru/about/facts/) – крупнейший в мире производитель алюминия и один из крупнейших производителей глинозема. На долю компании в 2015 году приходилось около 7% мирового производства алюминия и около 7% мирового производства глинозема.

Одно из направлений исследований, которое в настоящее время интересует российских производителей – выделение и разделение редкоземельных элементов (РЗЭ) из отходов производства (фосфогипса и красных шламов). В результате демпинговой финансовой политики китайского бизнеса в сфере продаж РЗЭ, производство этих металлов и их соединений не только в России, но и за рубежом, сократилось в десятки-сотни раз. Однако современные технологии остро нуждаются в РЗЭ; их используют при изготовлении энергосберегающих ламп, мобильных телефонов, плазменных экранов и других товаров. Поэтому крупные компании заинтересованы в развитии новых технологий и создании новых рабочих мест в этой сфере производства. Разработки термодинамических моделей для оптимизации процессов разделения РЗЭ ведутся в лаборатории совместно с компаниями УРАЛХИМ и РУСАЛ. В отличие от традиционного подхода, практикуемого во многих исследовательских коллективах, занимающихся подобными проблемами, сотрудники лаборатории стремятся к построению таких аналитических зависимостей энергий Гиббса, которые не только воспроизводят уже имеющиеся данные по кривым распределения РЗЭ, но и позволяют прогнозировать условия фазовых и химических равновесий в широком интервале температур и составов. Для оценки параметров таких зависимостей приходится целенаправленно ставить специальные эксперименты, получать данные для построения моделей и проверки их корректности. Как известно, история развивается по спирали; спустя многие годы мы вернулись к методам давления пара и изотермической растворимости, которые активно использовались на заре становления лаборатории галургии (и химической термодинамики). Конечно, уровень развития техники эксперимента сейчас совсем другой, но, как и много десятилетий назад, приходится придумывать оригинальные конструкции, паять стеклянные детали установок, тратить много времени и сил на отработку методик. На фотографии 18 доц., к.х.н. Н.А. Коваленко совместно с мнс С.В.Курдаковой проводит измерения на разработанной и собранной им установке для измерения давления насыщенного пара статическим методом.

BHP Billiton, «Би-Эйч-Пи Биллитон» (http://www.bhpbilliton.com/) – одна из крупнейших в мире горнодобывающих компаний. Основными направлениями деятельности являются добыча нефти и газа (в том числе сланцевых), меди, железной руды и угля. В списке крупнейших публичных компаний мира Forbes Global 2000 за 2015 год компания BHP Billiton заняла 50-е место.

«Сен-Гобен» (Saint-Gobain) (http://www.saint-gobain.ru/ru/about) – мировой лидер в создании комфортного пространства для проживания, работы и отдыха человека. Входит в ТОП-100 крупнейших индустриальных корпораций мира и наиболее инновационных компаний мира согласно рейтингу Thomson Reuters 2015. Начиная с 2009 года, «Сен-Гобен» ежегодно присуждается премия «За высокие достижения в области достижения в области устойчивого развития» согласно стандарту ENERGY STAR®.

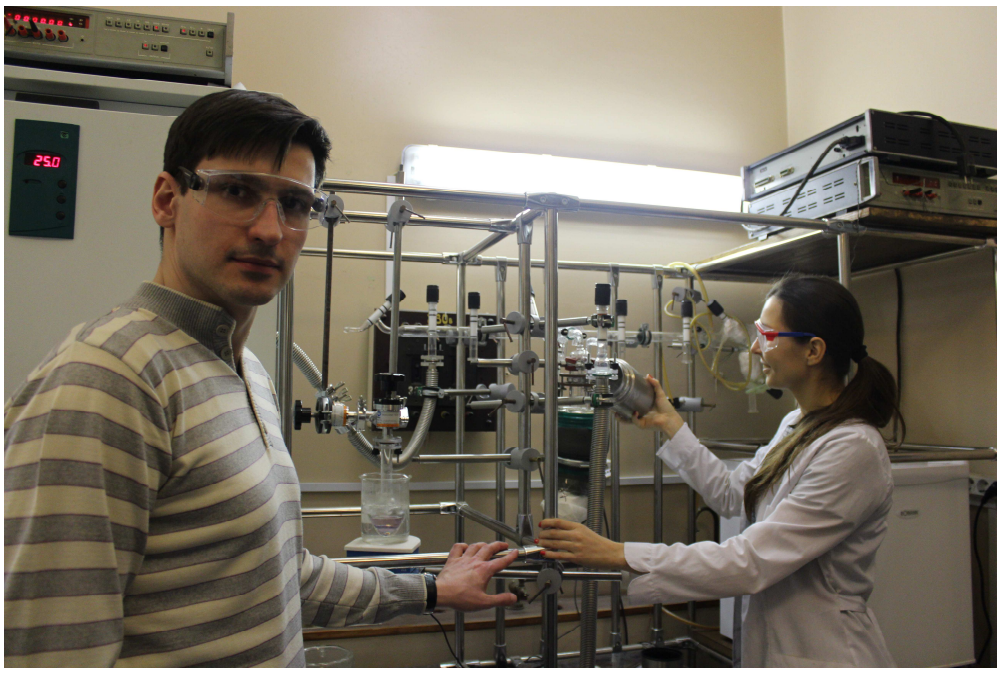


Фото 18. Измерения давления насыщенного пара растворов проводят доц., к.х.н. Коваленко Н.А. и мнс С.В.Курдакова

Многие десятилетия, начиная с 1954 г., в лаборатории развивались различные варианты электрохимических методов определения термодинамических свойств фаз – с твердыми кислород-, фтор-ионными и жидкими электролитами. В настоящее время интерес к электрохимическим методам сохранился, однако в связи с изменением объектов исследования центр тяжести сместился в сторону более низкотемпературных измерений: основными системами стали растворы электролитов. При изучении водных растворов электролитов часто применяют метод ЭДС с ионоселективными электродами (ИСЭ) на Na^+, K^+, Ca^{2+}, NH_4^+, Cl^-, NO_3^- с полимерными и стеклянными мембранами. Использование ИСЭ для определения среднеионных коэффициентов активности является не тривиальной задачей; в мире немного научных коллективов, которые применяют ИСЭ для определения термодинамических свойств электролитов. Поэтому в лаборатории уделяется много времени и сил методической части работы. На фотографии 19 м.н.с., к.х.н. Н.М. Константинова проводит опыты с водно-спиртовыми солевыми системами в рамках совместных исследований с компанией УРАЛХИМ. Основная цель таких работ – создать термодинамическую модель для оптимизации условий кристаллизационного разделения солей (хлоридов, нитратов, карбонатов) щелочных металлов. На основе результатов потенциометрических измерений рассчитываются парциальные свойства солевых компонентов, необходимые для построения термодинамической модели процесса разделения. Результаты работ представлен в серии публикаций последних лет, в частности [Uspenskaya I., Konstantinova N., Veryaeva E., Mamontov M. Electromotive Force and Measurements in several System. Ch.5. Electromotive Force Measurements and Thermodynamic Modelling of Sodium Chloride in Aqueous-Alcohol Solvents. 2011. InTech Croatia, ISBN 978-953-307-728-4, 173].

Фото 19. М.н.с., к.х.н. Н.М.Констнинова проводит потенциометрические измерения

Термоаналитические исследования начались в лаборатории в начале 80-х, с приобретением лабораторией первых дифференциальных сканирующих калориметров производства Mettler (Швейцария) и NETZSCH (Германия). В 2005-2009 г. по программе развития МГУ были закуплены дифференциальные сканирующие калориметры обычного и высокого давления (DCS 203 Maya, 204 F1, 204 HP Phoenix) и термовесы TG 209 F1 фирмы NETZSCH (Германия). Эти приборы принадлежат Центру Коллективного Пользования (ЦКП МГУ) и обслуживаются сотрудниками лаборатории химической термодинамики. На фотографии 20 н.с., к.х.н. М.А.Быков проводит измерения.

Фото 20. Нс М.А. Быков проводит термоаналитические измерения солевых систем в рамках совместного проекта с ОАО УКХ УРАЛХИМ

Результаты, полученные термоаналитическими методами, применяют для решения разнообразных задач: оценки свойств индивидуальных веществ (характеристик фазовых превращений, теплоемкости), построения фрагментов фазовых диаграмм систем разной размерности и природы, создания кинетических моделей процессов. В некоторых случаях эти данные можно использовать непосредственно, но ценность получаемой термоаналитической информации возрастает, если использовать ее при общем термодинамическом описании процесса. Эксперимент ставится выборочно, если отсутствуют данные, необходимые для определения параметров аналитических зависимостей, описывающих термодинамические свойства как функции переменных *T,p,x*, или для проверки корректности предлагаемых моделей. В последние годы были проведены комплексные исследования нескольких десятков двух- и трехкомпонентных систем, представляющих интерес для разработки новых видов удобрений и солевых композиций функционального назначения (антиобледенителей, жидкостей глушения нефтяных скважин и др.). Компонентами таких систем являются H_2O, $(NH_2)_2CO$, $NH(CONH_2)_2$, $NH_4SO_3NH_2$, $NH_4SO_3CH_3$, $NaSO_3CH_3$, NH_4NO_3, $(NH_4)_2SO_4$, HCOOK, $ZnCl_2$, NaCl, KCl, $NaNO_3$, KNO_3, Na_2CO_3, $NaHCO_3$, HNO_3, HCl, $Zn(NO_3)_2$, $Ca(NO_3)_2$, $CaCl_2$, $MgCl_2$, $Ca(SO_3CH_3)_2$, $Zn(SO_3CH_3)_2$. Обширный цикл работ был посвящен возможности выделения и разделения солей щелочных металлов с помощью различных органических реагентов (спиртов, полиэтиленгликолей, краун-эфиров и других растворителей). В качестве примера публикаций по этой тематике можно привести работу [Kosova D.A., Voskov A.L., Kovalenko N.A., Uspenskaya I.A. A Water - Urea - Ammonium Sulfamate system: Experimental Investigation and Thermodynamic Modelling // Fluid Phase Equilibria, 2016, V.425, p. 312-323].

В группе проф., д.х.н. Михаила Валерьевича Коробова (фото 21, а) и ст.н.с., к.х.н. Наталии Васильевны Авраменко (фото 21, б) термоаналитические измерения проводят на дифференциальном сканирующем калориметре METTLER. Группа занимается экспериментальными термодинамическими исследованиями систем углеродный наноматериал (наноалмазы, оксиды графита или фуллерены) – растворитель. Поведение таких систем описывается в рамках обычных термодинамических представлений, однако, интерес вызывают аномалии, такие, например, как ферромагнитизм полимеризованных фуллеренов или непривычные температурные зависимости растворимости и сорбции у некоторых углеродных «нано». Помимо методов ДСК, при проведении исследований используются и другие методы: РФА, УФ-видимой и ИК-спектроскопии, динамического светорассеяния, малоуглового нейтронного рассеяния, ЯМР и ЭПР. Из наиболее значимых работ, полученных в последнее время, следует отметить статью [Korobov M.V., Volkov D.S., Avramenko N.V., Belyaeva L.A., Semenyuk P.I., Proskurnin M.A. Improving the Dispersity of Detonation Nanodiamond: Differential Scanning Calorimetry as a new method of controling the aggregation state of nanodiamond powders // Nanoscale, 2013, V.5, p.1529-1536].

Фото 21. С.н.с., к.х.н., Н.В. Авраменко (б) с проф. Д.х.н. М.В. Коробовым (а)

За последние два десятилетия в лаборатории разработан ряд новых методик и создана оригинальная аппаратура для определения термодинамических свойств различных веществ: индивидуальных соединений, смешанных солей и оксидов, сплавов, гидратов и сольватов, металлоорганических комплексов и растворов электролитов (неэлектролитов) в воде и смешанных растворителях. Изучено более ста систем разной компонентности, перспективных для получения новых видов удобрений и функциональных материалов, разработки новых технологий разделения и очистки веществ, переработки техногенных отходов.

В настоящее время сотрудники, аспиранты и дипломники лаборатории имеют возможность проводить необходимые исследования с использованием практически всех существующих экспериментальных методов химической термодинамики. Такие методы, как потенциометрия, различные варианты метода давления пара, дифференциальная сканирующая калориметрия, термогравиметрия, измерение объемных свойств растворов реализованы непосредственно в лаборатории. Измерения теплот смешения и растворения, а также изобарной теплоемкости методом адиабатической калориметрии выполняются в рамках сотрудничества с другими организациями и структурными подразделениями МГУ (НИТУ МИСиС, СПбГУ, геологический факультет МГУ, лаборатория термохимии химического факультета МГУ). Сочетание разных методов изучения свойств фаз с последующим построением их термодинамических моделей и расчетом фазовых и химических равновесий расширяет границы практического использования этих данных, позволяет достойно представлять результаты работы научного коллектива лаборатории профессиональному сообществу.

Сохранение и развитие экспериментальных методов химической термодинамики, расширение спектра применяемых методов исследования является одной из основных задач лаборатории, без этого нельзя воспитать будущих грамотных термодинамиков. Но, современную химическую термодинамику уже невозможно представить без использования вычислительных методов. При этом сотрудники лаборатории выступают не просто пользователями, но и активными разработчиками новых методов расчета и оригинальных программных продуктов. К основным теоретическим разработкам последних

лет можно, без сомнения, отнести метод «выпуклых оболочек»[2] и его программную реализацию для расчета фазовых равновесий. Теоретические основы и возможности метода описаны в работах [Воронин Г.Ф. Новые возможности термодинамических расчетов и построения фазовых диаграмм гетерогеннных систем // *ЖФХ*, 2003, т.77 А, № 10, с. 1685-1694], [Воронин Г.Ф. Выпуклые функции в термодинамике гетерогенных систем // *ЖФХ*, 2005, т.79 А, № 12, с. 1890-1902].

Сокращение временного разрыва между новейшими разработками и их внедрением – еще одна важнейшая задача лаборатории. Ярким примером этого является введение понятий выпуклости и вогнутости характеристических функций в практику преподавания химической термодинамики и расчетов фазовых диаграмм. На основе ранее разработанных в лаборатории методов анализа гетерогенных равновесий и современных методов выпуклого программирования созданы программные комплексы для расчета фазовых диаграмм (PhD, TernAPI). Они достаточно хорошо известны и у нас и за рубежом, используются как в научных работах, так и в преподавании химической термодинамики.

Программный комплекс PhDi предназначен для расчёта фазовых диаграмм однокомпонентных, бинарных и квазибинарных систем по термодинамическим свойствам фаз методом выпуклых оболочек, предложенным проф. Г.Ф. Ворониным в 2003 – 2005 гг. При заданной температуре и давлении фазовые равновесия рассчитываются с помощью построения выпуклых оболочек на множестве точек, представляющих энергии Гиббса фаз в пространстве компонентного состава системы. Из выпуклой оболочки множества выделяется выпуклая функция, построенная на множестве соответствующих термодинамических потенциалов фаз, которая является характеристической функцией всей равновесной системы. Выпуклость такой функции гарантирует выполнение условий стабильности для соединений и растворов, термодинамический потенциал которых имеет с ней общие точки. Для построения выпуклых оболочек используются методы вычислительной геометрии, благодаря чему отпадает необходимость решать уравнения, системы уравнений или минимизировать характеристические функции, что обычно приходится делать при использовании других методов расчета равновесий. Программный комплекс содержит базу данных ряда систем, содержащую термодинамические свойства всех составляющих эти системы фаз. Возможности программного комплекса и примеры его применения приведены, например, в работе [Belov G.V., Emelina A.L., Goriacheva V.I., Uspenskaya I.A., Voronin G.F. PhDi-software package for calculation of binary phase diagrams // *J. Alloys&Comp*. 2008, V.452, № 1, p. 133-135].

---

[2] Во времена Гиббса выпуклого анализа еще не было, и ему приходилось подробно описывать форму «поверхности рассеянной энергии» гетерогенных систем, так он называл выпуклую оболочку энергии Гиббса.

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2014617822

Программа расчета фазовых диаграмм бинарных систем

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» (МГУ) (RU)*

Авторы: *Белов Глеб Витальевич (RU), Воронин Геннадий Федорович (RU), Куценок Илья Борисович (RU)*

Заявка № 2014615781
Дата поступления 17 июня 2014 г.
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ *04 августа 2014 г.*

Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

Б.П. Симонов

Программный комплекс TERNAPI предназначен для расчёта фазовых диаграмм тройных и квазитройных систем методом выпуклых оболочек. При разработке алгоритма расчета был получен ряд оригинальных решений, не имеющие аналогов в научной литературе (см, например, [2015 Voskov A.L., Dzuban A.V., Maksimov A.I. TernAPI program for the calculation of ternary phase diagrams with isolated miscibility gaps by the convex hull method // *Fluid Phase Equilibria*, 2015, V.388, p. 50-58]). Основными преимуществами TERNAPI по сравнению с существующими программными комплексами являются: высокая надёжность автоматического нахождения равновесного состояния системы, т.е. устойчивость к «сваливанию» в локальный минимум энергии Гиббса; быстрый расчёт изобарно-изотермических сечений фазовых диаграмм тройных систем (1-30 сек); возможность задания термодинамических моделей фаз в свободной аналитической форме с использованием специального языка, основанного на YAML и Ruby; наличие встроенного набора термодинамических моделей растворов (идеальный раствор смешения, полиномы Редлиха-Кистера, NRTL, UNIQUAC); наличие встроенной базы данных SGTE Unary с термодинамическими свойствами простых веществ. Несомненным достоинством TERNAPI является развитый графический интерфейс, позволяющий строить, например, рассчитанные поверхности энергии Гиббса фаз и системы в целом (выпуклую оболочку), поверхности ликвидуса, поли- и изотермические сечения фазовых диаграмм тройных и квазитройных систем.

В 1999 г. в лаборатории была написана (на Бейсике!) первая программа для аппроксимации температурных зависимостей теплоемкостей веществ линейной комбинацией функций Эйнштейна-Планка; использовали ее всего несколько человек. В 2013 г. такое же решение было запрограммировано заново и стало значительно более удобным и доступным. Программу CpAppro стали использовать в учебном практикуме по физической химии, и число ее пользователей возросло в сотни раз. В 2016 г. в связи с запросами зарубежных коллег, создана еще более совершенная англоязычная версия программы Cp_Fit (ее можно найти на лабораторной странице в интернете http://td.chem.msu.ru/). Достоинствами программ CpAppro и Cp_Fit являются: возможность описания экспериментальных данных в широком интервале температур ограниченным числом параметров, ясный физический смысл аппроксимирующей функции и, как следствие, корректное предельное поведение и взаимная согласованность рассчитываемых термодинамических

свойств, возможность оценивать значения стандартных энтропий веществ при ограниченном температурном интервале измерений. Основы метода изложены в работе [Voronin G. F., Kutsenok I.B. Universal Method for Approximating the Standard Thermodynamic Functions of Solids // *J.Chem.Eng.Data*, 2013, V.58, № 7, p. 2083-2094].

На фотографии 22 показан рабочий момент – сотрудник практикума Е.Г.Скворцова объясняет студентам 313 группы задачу обработки первичных экспериментальных данных, полученных методом адиабатической калориметрии.

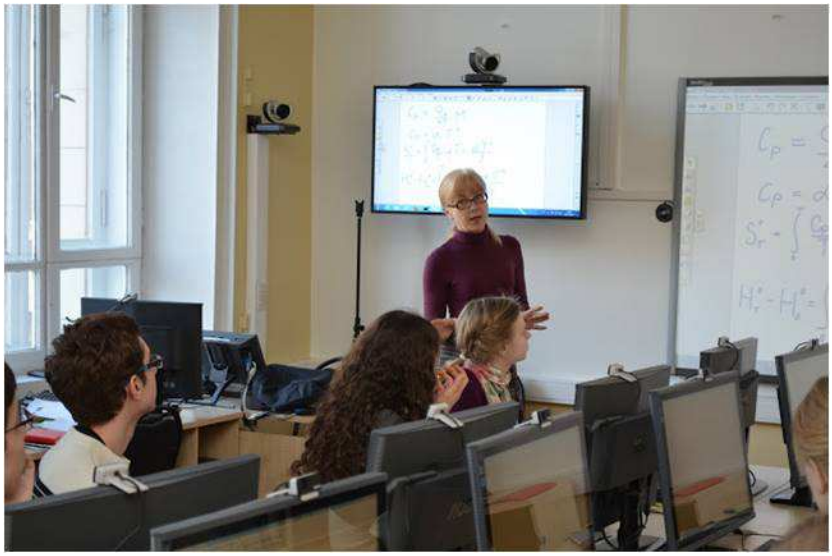


Фото 22. Расчетный практикум по общему курсу физической химии ведет сотрудник практикума Е.Г. Скворцова. Задача «Расчет термодинамических функций по результатам измерений теплоемкости» (313 группа, 2007 г.)

В группе с.н.с., к.х.н., Л.С. Николаевой разработана программа **BPEQUIL (Blood Plasma Equil),** предназначенная для математического моделирования комплексообразования в биохимических системах. С помощью этой программы рассчитаны химические равновесия в плазме крови, которые легли в основу планирования эксперимента по изучению эффективности антикоагулянтов плазмы крови на основе комплексов гепарина с компонентами плазмы, усиливающими его антикоагулянтное действие. Методом математического моделирования химических равновесий по экспериментальным данным pH-метрического титрования изучены химические равновесия в физиологических растворах высокомолекулярного гепарина (Na4hep) и глицина (HGly). Полученные результаты опубликованы, например, в работе [Николаева Л.С., Ляпина Л.А., Григорьева М.Е., Оберган Т.Б., Шубина Т.А. Антитромботический комплекс на основе гепарина, способ его получения и применение // *Бюл. "Открытия и изобретения"* 2016, № 30, с. 1-8].

За последние 15 лет (с 2000 по 2015 гг.) сотрудниками лаборатории получено много новых результатов, представляющих научный и практический интерес. Наиболее существенным достижением, несомненно, является разработка физико-химической модели системы вода – углекислый газ – аммиак,

необходимой для создания новой технологии получения карбамида (мочевины). Существующие сейчас процессы и технологии производства карбамида разработаны в 70-80-х годах прошлого века. В настоящее время во многих странах ведутся работы, направленные на создание более совершенных технологических схем и оптимальное использование оборудования. Для этого применяют современные методы физико-химического моделирования и оптимизации технологических процессов, основанные на научных данных о механизме происходящих в системе химических и фазовых превращений, о ее молекулярном строении, равновесных, кинетических и динамических характеристиках. Такой подход в отличие от ранее использовавшейся математической оптимизации с формально подбираемыми целевыми функциями (выход продукта, энергоемкость процесса и др.) дает возможность прогнозировать результаты процессов, происходящих при условиях, не достижимых в конкретных экспериментах, не прибегая при этом к многочисленным приближениям, влияние которых на конечный результат трудно или вообще невозможно предвидеть. Сотрудниками лаборатории химической термодинамики (см. фото 23) были предложены новые физически обоснованные математические описания термодинамических, кинетических, массообменных процессов и свойств системы вода – аммиак – углекислый газ, что является основой для последующего проектирования и расчета различных узлов технологического оборудования, для производственного процесса, при разработке АСУТП. Результаты исследований опубликованы в работах последних лет [Воронин Г.Ф., Генкин М.В., Куценок И.Б. Вириальные уравнения состояния газообразных аммиака, воды, диоксида углерода и их смесей при повышенных давлениях и температурах // *ЖФХ*, 2015, т.89, № 11, с. 1704-1722], [Voskov A.L., Voronin G.F. Thermodynamic Model of the Urea Synthesis Process // *J.Chem.Eng.Data*, 2016, V.61, № 12, p. 4110-4122].

Результаты совместных научных исследований лаборатории химической термодинамики и ОАО УКХ УРАЛХИМ (2007 - 2013 гг.) по 100% конверсии углекислого газа легли в основу соглашения о совместной **разработке технологии синтеза карбамида** с компанией Stamicarbon, мировым лидером в технологии производства карбамида (более 50% мирового рынка синтеза и 32% рынка гранулирования карбамида). В рамках реализации совместного проекта компания «УРАЛХИМ» построит по проекту Stamicarbon пилотную установку с использованием новых технологий на производственной площадке пермских «Минеральных удобрений». В случае положительных результатов работы пилотной установки, Stamicarbon приступит к базовому проектированию промышленного производства. В перспективе новая технология будет доступна для коммерческого применения во всем мире.

Фото 23. Сотрудники лаборатории, занимающиеся созданием термодинамической модели системы вода – аммиак – углекислый газ и расчетом нового типа реактора синтеза карбамида: проф., д.х.н. Г.Ф.Воронин, доц., к.х.н. Н.А.Коваленко. с.н.с., к.х.н. А.Л.Восков

Договорные работы с представителями производящих компаний дают весомый, но не единственный вклад в финансирование научных исследований. Сотрудники лаборатории активно участвуют в конкурсах, проводимых научными фондами. Тематики грантов РФФИ с момента основания фонда и до настоящего времени перечислены в Приложении.

В последние годы в качестве одного из формальных критериев успешности научного коллектива выступает число публикаций сотрудников в высокорейтинговых международных журналах. Работы, выполненные в лаборатории химической термодинамики, охотно публикуют в российских и зарубежных журналах из, так называемого, перечня «топ-25»: Journal of Chemical Thermodynamics, Pure and Applied Chemistry, Journal of Physical and Chemical Reference Data, Fluid Phase Equilibria, Journal of Chemical Engineering Data, Journal of Physical Chemistry (B и C), Chemical Physics Letters, Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Alloys and Compounds, Carbon, Nanoscale, Dalton Transactions, Diamond and Related Materials. Из российских журналов у сотрудников лаборатории наиболее популярны Журнал Физической Химии, Вестник Московского университета. Сер.2.Химия, Журнал Неорганической химии, Известия РАН. Неорганические материалы. При анализе публикаций лаборатории в последнее десятилетие, обращает на себя внимание две основные тенденции – рост числа публикаций в иностранных журналах и увеличение доли молодых сотрудников – соавторов публикуемых статей. Если первая тенденция отражает политику руководства университета, направленную на повышение международного рейтинга МГУ, то вторая тенденция – отражение внутренней политики руководства лаборатории, направленной на сохранение кадрового потенциала и преемственности московской научной школы химической термодинамики.

Выполнение большого объема исследований систем различной природы и компонентности – задача трудновыполнимая, если ее решать только си-

лами штатных сотрудников лаборатории, поэтому активное участие в работах по контрактам и грантам принимают аспиранты и студенты лаборатории. С начала 2000-х годов наблюдается устойчивая тенденция к увеличению числа студентов, специализирующихся в области химической термодинамики. За последние 15 лет в лаборатории защищены 53 дипломные и выпускные квалификационные работы, нам практически удалось выйти на уровень 60-х гг., когда за такой же период времени защитилось 67 человек (но следует помнить, что это было время резко возросшего интереса к химии, и в лаборатории работало 37 штатных сотрудников против нынешних 20-и). Многие выпускники после окончания МГУ продолжают обучение в аспирантуре (в настоящее время в лаборатории 10 аспирантов). За период с 2000 по начало 2016 г. в лаборатории защищено 10 кандидатских диссертаций, столько же, сколько за аналогичный период в конце XX века.

Молодежь лаборатории достойно представляет коллектив в различных научных организациях, на школах и конференциях. На верхнем фото 24 зав. лаб. проф. И.А. Успенская с группой аспирантов и студентов лаборатории на традиционной Международной конференции по химической термодинамике в России RCCT-2015 (г. Нижний Новгород, 2015 г.).

Фото 24. Молодые сотрудники и аспиранты лаборатории на международной конференции по химической термодинамике в России RCCT-2015 (г.Нижний Новгород). В верхнем ряду слева направо: Л.Г. Лебедев, Е.В. Белова, Н.Ю. Козин, И.А. Успенская, Д.А. Косова, А.Л. Восков, С.В. Курдакова, в нижнем ряду А.В. Дзубан, А.Г. Моисеев, А.И. Максимов

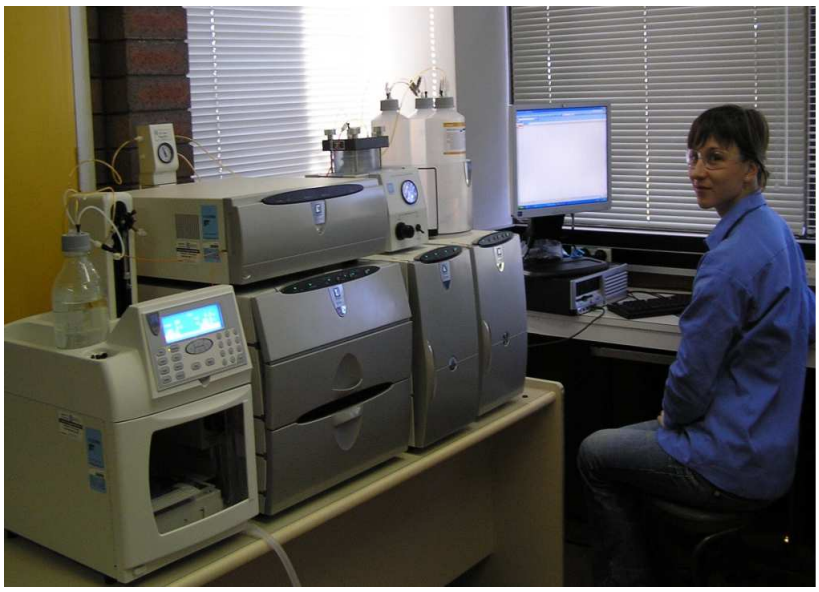
Активное участие в научных мероприятиях – давняя традиция лаборатории; ее сотрудники не только выступают с результатами своих исследованиях, но и организуют конференции, научные чтения, рабочие совещания. Ведущие ученые лаборатории представлены в программных и организационных комитетах конференций, проводимых другими ВУЗами и академическими институтами. В 2003 г. с успехом прошли Герасимовские чтения, посвященные 100-летию со дня рождения чл.-корр. РАН, проф. Я.И. Герасимова. Почтить память ученого и поделиться собственными достижениями собра-

лось более 100 представителей термодинамических школ. В 2004 г. химфак принимал участников RCCT-2004, сотрудники лаборатории термодинамики активно помогали команде термохимиков в организации и проведения этой международной конференции.

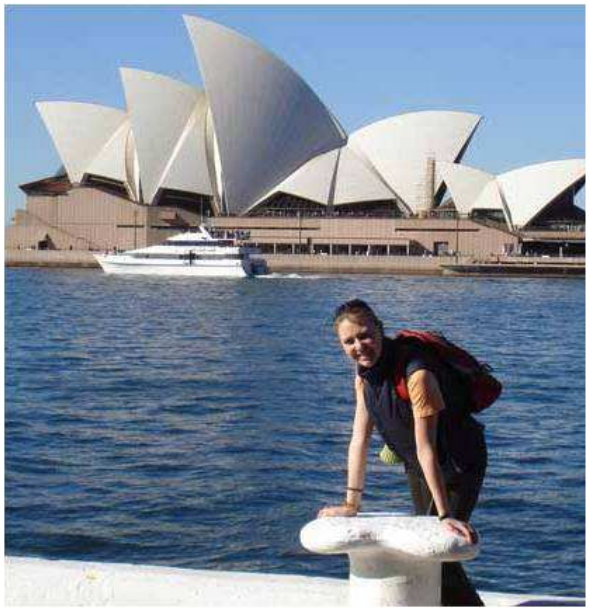
В советское время лаборатория химической термодинамики была вполне достойно представлена в мировом научном сообществе: заведующий лабораторией проф. Г.Ф. Воронин работал в составе комиссии ИЮПАК по высокотемпературной химии, в программных комитетов ряда международных зарубежных конференций (International Conference on High Temperature Materials Chemistry (HTMC), International IUPAC-Conference: High Temperature Materials Chemistry, International Ceramic Congress (CIMTEC)). Сотрудники лаборатории В.А. Левицкий, В.П. Васильев, А.Ф. Майорова, С.Н. Мудрецова неоднократно стажировались за границей. С началом «перестройки» стажировки и поездки на конференции стали доступны и молодым ученым. За последние 15 лет в рамках совместных научно-образовательных проектов студенты и аспиранты лаборатории стажировались в подразделениях R&D BHP Billiton в Австралии и ЮАР (г. Перт, Нью-Касл, Йоханессбург), Saint-Gobain (г.Париж, Франция), в техническом университете Technische Universität Bergakademie Freiberg (г. Фрейбург, Германия). На фотографиях 25 представители «золотого» выпуска 2009 г.[3] – дипломники Таня Бабкина (ныне сотрудница лаборатории), Денис Шишин (после защиты PhD в Ecole Politecnique работает в School of Chemical Engineering University of Queensland, Brisbane, Австралия), Лена Дунаева (ныне работает в R&D Saint-Gobain) и Аня Синельщикова (ныне научный сотрудник ИФХ РАН).

Активность молодежи находит достойную оценку на всех уровнях; они были победителями и призерами ежегодных Международных молодежных конференций «Ломоносов», работы студентов неоднократно получали награды на Менделеевских конкурсах молодых ученых-химиков (Е. Веряева, А. Грошева, 2005 г.), выигрывали конкурс молодых ученых (т.н., конкурс Дерипаски) (А. Восков, Е. Веряева, А. Грошева, М. Ефремова, 2007 г.). Аспиранты и молодые ученые лаборатории получали стипендии Президента РФ (А. Восков, 2009 г., А. Дзубан, 2013 г.), Ученого Совета МГУ (А. Восков, 2009 г., А. Дзубан, 2014 г.) и гранты Правительства Москвы (И. Пентин, 2005 г.). На конференциях RCCT и RTAC наша молодежь традиционно номинируется и получает награды за высокий уровень исследований в области термодинамики и термического анализа.

[3] В 2009 году лаборатория выпустила 9 дипломников (химфак и ФНМ), все окончили МГУ с красными дипломами; четверо связали свою судьбу с наукой и преподаванием в РФ, трое работают в научных исследовательских центрах за рубежом, двое – в R&D зарубежных компаний (Mars, Saint-Gobain) в РФ.



Таня Бабкина Денис Шишин



Лена Дунаева Аня Синельщикова (слева)

Фото 25. На фото дипломники лаборатории на стажировке в компании BHP Billiton (Австралия) в 2006, 2007 гг.

В 2017 г. молодые сотрудники лаборатории – Косова Д.А. и Коваленко Н.А. стали победителями конкурса исследовательских проектов «Неорганические удобрения и технологии будущего» в номинации «Лучший проект в области совершенствования/создания новых видов (составов) неорганических удобрений» и специальной номинация «Лучший Форсайт-проект» (уникальное новое видение и создание нового качества в технологиях создания и/или применения удобрений), соответственно. Награды призерам вручали заместитель министра сельского хозяйства Астраханцева Е.Ю. и генеральный директор АО «ОХК «УРАЛХИМ» Д.В. Коняев на закрытии (см. фото 26).

Фото 26. Вручение наград победителям конкурса проектов на выставке «Золотая осень-2017». Слева направо: генеральный директор АО «ОХК «УРАЛХИМ» Д.В. Коняев, проф. Успенская И.А., доц. Коваленко Н.А., заместитель министра сельского хозяйства Астраханцева Е.Ю.

Учебная работа

Адам Владиславович Раковский был не только основателем московской научной школы химической термодинамики; он стоял у истоков формирования традиций преподавания этой дисциплины в Московском университете. Заслуги А.В.Раковского в области образования достойно отражены в монографии А.Г. Морачевского «Очерки об ученых-химиках России и зарубежных стран» (изд-во СПбГУ, 2005, 138 с.). Адам Владиславович принимал самое активное участие в организации высшего химического образования в нашей стране, уделяя особое внимание физико-математической подготовке химиков. Раковский был сторонником и активным пропагандистом идей Дж.В.Гиббса, именно благодаря нему преподавание термодинамики в стенах Московского Университета с самого начала было ориентировано на использование математического аппарата. Лекции Адама Владиславовича пользовались большой популярностью; они отличались четкостью формулировок, строгостью и последовательностью изложения материала, и в то же время были доступны широкому кругу слушателей. В 1926 – 1933 гг. лекции Раковского были опубликованы в виде литографированных изданий. В 1933 г. издается «Курс общей и неорганической химии», соавторами которого стали А.В.Раковский, Э.Ф.Краузе и А.В.Богомолов. Взгляды Адама Владиславовича на роль химической термодинамики, ее месте в курсе физической химии нашли отражение в книге «Введение в физическую химию» (689 с.), изданной в 1938 г. Через год вышел менее объемный «Курс физической химии»,

рекомендованный в качестве учебника для студентов химических специальностей высших учебных заведений СССР. Открытость автора для новых идей и воззрений, его стремление оставаться в преподавании на переднем крае науки как нельзя лучше характеризует цитата из Предисловия: «Основная трудность составления курса физической химии – выбор материала из необозримой массы его. Каждый год этот материал увеличивается, и чтобы не расширять курса выше предельных размеров, надо год за годом от чего-то отказываться в пользу новых данных и новых точек зрения».

Раковский очень уважительно относился к педагогическому опыту своих коллег не только в России, но и за рубежом. По инициативе Адама Владиславовича были переведены на русский язык книги А.Смита «Введение в неорганическую химию» (три издания за период с 1928 по 1931 г.), А.Эйкена «Основные начала физической химии» (1929 г.), Дж.Партингтона «Химическая термодинамика». Последний учебник – первое в России учебное пособие по химической термодинамике. Раковский А.В. был не только научным редактором перевода, его дополнения и комментарии представляли самостоятельную ценность. Так, например, дополнение «Химическая кинетика и катализ» к книге А.Эйкена по объему составляло почти ¼ оригинального издания. Специалисты отмечали блестяще изложение позиций редактора перевода книги И.Д.Ван-дер-Ваальса и Ф.Констамма «Курс термостатики» (1936 г.) по основным проблемам теории растворов. Многочисленные комментарии и дополнения к книге «Химическая термодинамика» позволили Адаму Владиславовичу стать полноправным соавтором этого учебника. Учебник Раковского «Курс физической химии» оставался базовым для студентов-химиков Московского университета практически до начала 60-х; в 1964 году под редакцией Я.И.Герасимова вышел первый том двухтомного издания «Курс физической химии», в котором излагались теоретические основы и практические приложения химической термодинамики. Это учебник и сейчас представлен в списках литературы, рекомендуемой при изучении физической химии. Главы, посвященные термодинамике, писал чл.-кор. АН СССР проф. Я.И.Герасимов; его помощниками и внутренними рецензентами были ведущие преподаватели кафедры, работавшие в лаборатории – проф. Евсеев А.М., доц. И.А.Васильева, доц. Т.Н.Резухина.

К сожалению, сведения о спецкурсах и спецпрактикумах, которые осваивали студенты лаборатории до начала войны, отсутствуют; однако, судя по тому, что дипломники были полноправными соавторами научных публикаций, их специальная подготовка была на достаточно высоком уровне.

В послевоенные годы на кафедре физической химии начинает формироваться представительный блок специальных дисциплин. В мае 1948 года утверждены специальности и специализации МГУ; на химическом факультете – 4 специальности и 21 специализация. По специальности «Физическая химия» было выделено 7 специализаций: ***химическая термодинамика***, термохимия, неорганический катализ, химическая кинетика, коллоидная химия, электрохимия и история химии. Обучение заканчивалось присвоением квалификации «физико-химик» (приказ Минвуза СССР №739 от 26 мая 1948 г.).

Переезд в новое здание на Ленинских Горах позволил существенно расширить возможности лабораторий, как в части оснащения оборудованием, так и новых площадей. Растет популярность кафедры, а вместе с ней – и количество желающих выполнять дипломные работы в ее лабораториях, в т.ч., в лаборатории химической термодинамики. Если за период с момента основания до 1949 г. было выпущено 57 дипломников (в среднем, 2.85 человека в год), то за последующие 20 лет – уже 90. Пик популярности лаборатория в XX веке приходился на годы «большой химии» (60-е годы); эта тенденция, в целом, коррелировала с общекафедральной. Практически в каждой лаборатории кафедры студентам старших курсов предлагалось прослушать несколько спецкурсов, связанных с их специализацией. Не стала исключением и лаборатория химической термодинамики; с 1953 по 1974 г. в лаборатории начинают читаться новые спецкурсы: «Избранные главы термодинамики», «Термодинамика твердых тел переменного состава», «Расчетные методы в статистической термодинамике».

Курс «Избранные главы термодинамики» читается студентам и в настоящее время, но изменилось его содержание. В первой программе этого курса рассматривались такие вопросы, как, например, термодинамика реактивных двигателей и фазовые переходы второго рода, в то время как сейчас в рамках этой дисциплины изучаются разделы, посвященные термодинамике ядерных реакций, сверхпроводников, расчетам равновесий в различных силовых полях, методам оценки термодинамических свойств веществ различных классов и многое другое.

В начале 70-х становится очевидным, что невозможно обеспечить должный уровень экспериментальных исследований без специализированной практической подготовки студентов и знания ими теоретических основ используемых методов. По инициативе проф. Воронина Г.Ф. разрабатывается новый курс «Экспериментальные методы химической термодинамики» (1979 г.), который является обязательным для дипломников лаборатории и по сей день. Сейчас этот курс значительно переработан, в отличие от прошлого столетия его читает коллектив сотрудников лаборатории химической термодинамики (проф. Г.Ф.Воронин, вед.н.с. И.Б.Куценок, ст.н.с. М.Н.Мамонтов, доц. Н.А.Коваленко) и термохимии (доц. Л.А.Тифлова, ст.н.с. А.И.Дружинина, вед.н.с. Р.М.Варущенко). В течение семестра студенты слушают лекции по теоретическим основам различных методов (калориметрии сгорания и растворения, реакционной калориметрии, методам термического анализа, потенциометрии, различным вариантам метода давления пара); знакомятся с оригинальными техническими и инструментальными решениями, в том числе, полученными в лаборатории термодинамики. Параллельно теоретическому курсу проводится спецпрактикум, в рамках которого студенты получают навыки, необходимые для последующей научной работы. Сейчас спецпрактикум включает несколько блоков: (1) термоаналитический (проводится в рамках кафедрального спецпрактикума), (2) гетерогенных равновесий, (3) задачи по потенциометрии.

В 2015 г. был создан общекафедральный спецпрактикум, до этого времени все задачи студенты делали в своих лабораториях. Сотрудники лаборатории химической термодинамики обеспечивают выполнение блока задач «Термический анализ», в который входят: «Калибровка прибора ДСК по температуре и теплоте с использованием стандартов», «Измерение теплоемкости», «Измерение температур и теплот фазовых превращений», «Измерение температур стеклования полимеров». «Построение фазовой диаграммы бинарной системы (эксперимент и расчет)», «Построение формальной математической модели процесса по данным термогравиметрии». На фотографии 26 м.н.с Д.А. Косова проводит занятия по термическому анализу.

Первый сборник «Методических указаний к спецпрактикуму по химической термодинамике» был выпущен в 1982 г.; его авторы - сотрудники лаборатории: А.Г. Аникин, И.А. Васильева, Г.Ф. Воронин, В.А. Гейдерих, Г.М. Дугачева, Ю.Я. Сколис. В сборнике представлено 7 задач, соответствующих применявшимся тогда в лаборатории экспериментальным методам. Отдельный раздел посвящен методам обработки результатов измерений. Корректному представлению полученных данных в лаборатории всегда уделялось и уделяется большое внимание. Стандартные методы обработки экспериментальных данных включались в лабораторные лекции. С 2014 г. с.н.с., к.х.н. лаборатории А.Л. Восков подготовил и читает общий курс «Статистическая обработка эксперимента» для студентов ФНМ МГУ. Отдельные разделы этого курса преподаются студентам химического факультета в спецкурсе «Экспериментальные методы химической термодинамики».

Дифференциальные сканирующие калориметры широко используются не только в занятиях спецпрактикума. На базе DSC 203 Maya разработаны новые задачи общего практикума по физической химии. В течение обоих семестров более 350 студентов химического, геологического и факультета почвоведения выполняют задачи по изучению фазовых равновесий. Эти задачи включены в первое издание практикума по физической химии, подготовленного сотрудниками кафедры. Первая часть практикума посвящена термодинамике [Агеев Е.П., *Успенская И.А., Богачёв А.Г.,* Жирякова М.В., Каргов С.И., *Коробов М.В.,* Ланин С.Н., *Майорова А.Ф.,* Мельханова С.В., Попов А.А., Рощина Т.М., Тифлова Л.А. Практикум по физической химии. Термодинамика. Учебное пособие для студентов учреждений высшего профессионального образования. М.: Издательский центр «Академия». 2010, 224 с.]

В 1980 г. была издана монография Я.И. Герасимова и В.А. Гейдериха «Термодинамика растворов», в которой был обобщен опыт преподавания авторами спецкурса с одноименным названием. Программа этого курса была существенно переработана в начале 2000-х; в настоящее время его читает проф. И.А.Успенская.

Фото 27. Специальный практикум по термическому анализу для дипломников кафедры физической химии; занятия ведет н.с., к.ф-м.н. Косова Д.А.

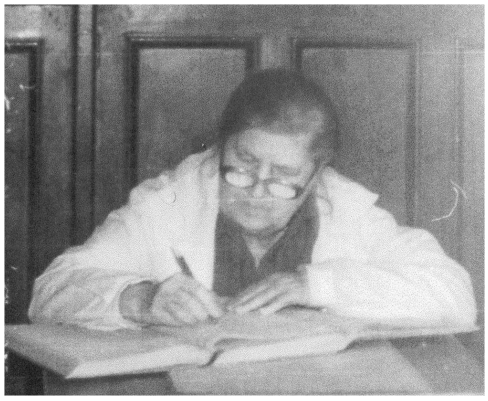
В начале 80-х годов в связи с развитием вычислительных методов и совершенствованием вычислительной техники актуальной стала задача разработки курса «Расчетные методы химической термодинамики» и соответствующего практикума. Впервые курс, в котором были представлены как теоретические основы расчетов фазовых и химических равновесий, так и конкретные их приложения, был прочитан проф. Ворониным в 1985 году. Среди первых слушателей курса были не только студенты и аспиранты, но и многие сотрудники лаборатории. Методическая разработка «Расчетный практикум по химичнексой термодинамике» (авторы Г.Ф.Воронин, М.А.Быков, Н.М.Мухамеджанова), изданная в 1986 г., долгое время оставалась практически единственным доступным учебным пособием для студентов факультета, желающих освоить современные расчетные методы термодинамики. В настоящее время этот курс сопровождается специальным расчетным практикумом, при выполнении которого студенты знакомятся не только с готовыми коммерческими программными продуктами (FACTSAGE, Thermocalc), но и активно используют оригинальное программное обеспечение, разработанное сотрудниками лаборатории химической термодинамики (PhDi, TERNAPI, Cp_Fit, Thermobase, Equicalc; две последние программы разработаны Г.В. Беловым совместно с сотрудниками ОИВТ РАН). Набор задач по расчетам фазовых диаграмм бинарных систем с помощью программного комплекса PhDi включен отдельным разделом в 1-й том издания «Практикум по физической химии. Термодинамика».

В связи с повышенным интересом молодежи к освоению расчетных методов химической термодинамики, с 2016 г. в лаборатории начал работать факультатив, в рамках которого студенты и аспиранты получают навыки программирования в среде MatLab, более подробно знакомятся с различными

термодинамическими моделями и их применениями. Занятия ведут аспиранты и молодые сотрудники лаборатории.

В истории лаборатории химической термодинамики нельзя не упомянуть и о людях, занимавшихся хозяйственным обеспечением работы лаборатории – это Анна Алексеевна Толмачева и Нина Николаевна Гоменюк (см. фото 28). Две скромные труженицы, без которых работа лаборатории была бы невозможной.

Н.Н Гоменюк



А.А Толмачева

Фото 28. Материально ответственные лаборатории химической термодинамики

В настоящее время в штате лаборатории 17 научных сотрудников и преподавателей, из них 4 доктора и 10 кандидатов наук.

Краткая информация о заведующих лабораторией

Первым заведующим лаборатории был проф. Адам Владиславович Раковский, который руководил ею до последних дней своей жизни (с 1923 по 1941 г.). С началом Великой Отечественной войны большую часть сотрудников лаборатории отправили в эвакуацию в Ашхабад (ее возглавлял проф. Я.И.Герасимов), а часть осталась в Москве. До 1943 г. эта группа сотрудников работала под началом проф. Дмитрия Никаноровича Тарасенкова, который совмещал свою деятельность в лаборатории с работой в ВВИА им. проф. Н. Е. Жуковского. С 1943 г. и до последних дней жизни Дмитрий Никанорович оставался преподавателем этой академии. В 1943 г. официальным заведующим лабораторией был назначен проф. Яков Иванович Герасимовов, возглавлявший коллектив до 1976 г. С 1976 г. по январь 2015 г. ее бессменным руководителем был проф. Геннадий Федорович Воронин. С 2015 г. по настоящее время заведующим лабораторией является проф. Ирина Александровна Успенская.

Раковский Адам Владиславович (24.12.1879 – 07.06.1941) родился в городе Межиречье Седлецкой губернии (Варшавское воеводство) в семье учителя. В 1898 году закончил классическую гимназию в городе Бела Седлецкой губернии, в 1903 году – естественное отделение физико-математического факультета Московского университета. Сразу же после окончания МГУ был зачислен на должность младшего ассистента Московской Центральной химической лаборатории Министерства финансов, которую возглавлял А.Г.Дорошевский. Учителями А.В. Раковского были известные русские химики – Н.Д. Зелинский и В.Ф. Лугинин. В 1914 г. защитил магистерскую диссертацию «К учению об адсорбции» (университет Св. Владимира, г. Киев). С 1915 года Раковский преподавал в Московском университете, сначала в должности приват-доцента (1915-1918 гг.), затем - профессора (с 1918 до 1941 г.), читал курсы по химической термодинамике и приложениям математики к химии. В 1915-1917 гг. принимал участие в организации химических заводов министерства финансов, заведовал Уротропиновым заводом. В 1917-19 гг. работал в должности директора Центральной лаборатории Министерства финансов и Московских химических заводов Министерства финансов (с 1918 - Комитета финансов). В 1920-22 гг. являлся членом Заводоуправления Московских химических заводов Химотдела ВСНХ, одновременно – членом коллегии Химической фармацевтической лаборатории Химотдела ВСНХ. В 1919 г. на базе Центральной лаборатории Комитета финансов организовал Институт чистых химических реактивов (ИРЕА). С 1919 по 1932 г. заведовал лабораторией неорганической химии ИРЕА. Раковский А.В. был консультантом Центроспирта и Минцветзолото. Адам Владиславович принимал самое активное участие в организации химического факультета Московского университета, с момента его основания в 1929 году он был назначен заведующим кафедры неорганической химии, а в 1930 году возглавил кафедру физической химии, которой руководил до конца своей жизни. В 1933 году проф. А.В. Раковский был избран членом корреспондентом по Отделению математических и естественных наук (физическая химия) Академии наук СССР. В 1935 г. за исследования по определению упругости паров хлоридов металлов с целью разработки нового металлургического процесса разделения полиметаллических руд А.В. Раковскому была присвоена докторская степень без защиты диссертации. В 1933-1937 гг. был деканом химического факультета и директором НИИ химии Московского университета.

Герасимов Яков Иванович (23.09.1903 – 17.03.1983) родился в городе Валдай Новгородской губернии в семье врача. В 1920 г. окончил школу в г. Рыбинске, а в 1925 г. – химическое отделение физико-математического факультета Московского университета. После окончания аспирантуры в Научно-исследовательском химическом институте при Московском университете и до конца своей жизни Яков Иванович работал на химическом факультете МГУ. В 1940 г. он защитил докторскую диссертацию по теме «Термическая диссоциация металлических сульфидов», 1942 году он получил звание профессора, в 1953 г. его избрали член-корреспондентом АН СССР по отделению Физикохимии и технологии неорганических материалов. В 1931-1934 гг. Я.И. Герасимов был сотрудником Государственного института цветных металлов, одновременно читал лекции в Химико-технологическом институте им. Д. И. Менделеева, Военно-воздушной академии им. Н. Е. Жуковского, Педагогическом институте им. К. Либкнехта, и других вузах Москвы. В 1941-1945 гг. вместе с химическим факультетом находился в эвакуации в Ашхабаде и Свердловске. Более 25 лет (с 1954 г.) Яков Иванович был главным редактором «Журнала физической химии»; опубликовал более двухсот работ, в том числе, в соавторстве с А.Н.Крестовниковым трехтомную монографию «Химическая термодинамика в цветной металлургии», которая по тем временам считалась энциклопедией практической химической термодинамики (в 1960-1973 гг. было опубликовано расширенное издание этой серии). Под руководством Я.И. Герасимова защищено около 40 кандидатских диссертаций, пятеро его учеников стали докторами наук. Яков Иванович был инициатором написания и редактором двухтомного несколько иностранных языков. За многолетнюю плодотворную работу в области просвещению и науки Я.И. Герасимов был награжден орденами Ленина (1951 г.), Октябрьской Революции (1973 г.), Трудового Красного Знамени (1978 г.) и медалями.

Воронин Геннадий Федорович родился 26 января 1935 года в семье военного летчика-испытателя. В 1958 г. с отличием окончил химический факультет МГУ, поступил в аспирантуру; был одним из первых после войны советских химиков, в ФРГ (Университет г. Штутгарт). В 1963 г. защитил кандидатскую диссертацию, в 1971 г. – докторскую на тему «Термодинамические исследования промежуточных фаз в сплавах»; в 1978 г. получил звание профессора. Область научных интересов: общая и прикладная химическая термодинамика, материаловедение, химия твердого тела, молекулярные пучки и газовая динамика. Г.Ф.Ворониным разработаны и введены

в практику термодинамических исследований оригинальные экспериментальные методики; среди них – методика контролируемого синтеза соединений с использованием электролиза с горячим катодом, измерение сверхнизких давлений паров щелочных элементов (метод "вспышки"), определение молекулярного состава паров веществ с помощью селектирования молекул по скоростям. Из теоретических работ основными являются термодинамическая теория взаимодействия молекулярных пучков сложного химического состава с поверхностями твёрдых тел, введение в практику термодинамических исследований нового класса термодинамических величин – парциальных функций гетерогенных смесей и создание эффективного метода расчета и построения фазовых диаграмм, основанного на прямом использовании свойств выпуклости характеристических функций многофазных систем («метод выпуклых оболочек»). Г.Ф.Воронин – автор и соавтор около 200 печатных научных публикаций, в том числе учебного пособия «Основы термодинамики» и трех книг «Термодинамика и структура жидких металлических сплавов» (совместно с А.М.Евсеевым), «Термодинамика и материаловедение полупроводников» 1992 г. (коллектив авторов); «Электрохимические методы исследования в термодинамике металлических систем» (совместно с А.Г.Морачевским, В.А.Гейдерихом, И.Б.Куценком). Пятнадцать его учеников стали кандидатами наук. В 1981 г. в составе коллектива авторов он стал лауреатом Государственной премии СССР в области науки и техники за цикл работ по исследованиям полупроводниковых материалов. В 1995 г. удостоен звания «Заслуженный деятель науки и техники Российкой Федерации». С 1993 г. Г.Ф. Воронин представлял российскую науку в ИЮПАК (IUPAC) в качестве член Комиссии по высоким температурам и химии твердого тела.

Успенская Ирина Александровна родилась 8 декабря 1961 года в семье военнослужащего. В 1984 г. с отличием окончила химический факультет и поступила в аспирантуру. Вся дальнейшая судьба Успенской И.А. неразрывно связана с МГУ, в стенах которого она прошла пусть от старшего лаборанта до заведующего лабораторией и заместителя декана химического факультета. В 1998 г. Ирина Александровна успешно защитила кандидатскую диссертацию «Термодинамические свойства и фазовые равновесия в системе оксид циркония - оксид иттрия», в 2013 г. – докторскую по теме «Термодинамические модели солевых водно-органических систем в процессах разделения и очистки веществ». Область научных интересов: прикладная химическая термодинамика и материаловедение. Пятеро ее учеников стали кандидатами наук. Много внимания уделяет вопросам преподавания и методической работе. И.А. Успенская – автор и соавтор около 50 печатных научных публикаций, в том числе учебников и учебных пособий «Основы физической химии», «Основы физической химии. Теория и задачи» и «Задачи по

физической химии» (в соавторстве с В.В. Ереминым, С.И Карговом, Н.Е. Кузьменко и В.В. Луниным), «Практикум по физической химии. Термодинамика» (в составе коллектива сотрудников кафедры физической химии). С 2007 г. по настоящее время является членом Ученого Совета химического факультета МГУ, входит в состав Диссертационного Совета по специальности 02.00.04 Физическая химия. С 2015 г. является членом бюро секции физической и коллоидной химии РХО им. Д.И.Менделеева и заместителем Председателя Федерального Учебно-методического Объединения по Укрупненной Группе Специальностей и Направлений 040000 Химия, ответственным за разработку Федеральных Образовательных Стандартов и Примерных Основных Образовательных Программ по Химии (уровни подготовки – бакалавриат, специалитет, магистратура, аспирантура).