

Виртуально-сетевой центр  
перспективных исследований  
"Зеленая химия для устойчивого развития:  
от фундаментальных принципов к новым  
материалам"

Я.О. Межуев  
Зав. каф. биоматериалов



**Виртуально-сетевой центр ставит целью** позиционирование РХТУ в качестве лидера инновационного образовательного и исследовательского процесса, обеспечивающего рывок в создании новых материалов в соответствии с принципами зеленой химии, подготовку конкурентоспособных в мировой шкале бакалавров, магистров, специалистов, аспирантов и докторантов, обладающих углубленными фундаментальными знаниями и компетенциями, отвечающими глобальной концепции устойчивого развития.

# Предпосылки для создания центра:

---



- 1) Необходимость интеграции передовых достижений науки в образовательные программы для повышения уровня подготовки бакалавров, специалистов, магистров, аспирантов и докторантов;
- 2) Необходимость расширения сферы научного сотрудничества РХТУ им. Д.И. Менделеева и привлечения материальной базы других организаций для получения прорывных научных результатов в рамках совместных проектов;
- 3) Необходимость увеличения высокорейтинговой публикационной активности сотрудников РХТУ им. Д.И. Менделеева.

# Миссия центра:

---



- 1) Создание междисциплинарных научных коллективов (в том числе, с привлечением международного сотрудничества) для выполнения масштабных научных исследований;
- 2) Интеграция научного потенциала сотрудников различных организаций на базе единой коллаборации;
- 3) Повышение высокорейтинговой публикационной активности РХТУ;
- 4) Привлечение финансирования под крупные проекты и научные программы;
- 5) Непрерывное развитие учебных курсов по принципу «Образование на базе науки»
- 6) Расширение компьютерных и программных ресурсов.
- 7) Организация научных мероприятий по актуальным научным тематикам;
- 8) Повышение международного авторитета РХТУ им. Д. И. Менделеева как центра научного и технологического превосходства в области химии и химической технологии.

# Направления работы центра:



**Ответственный координатор центра: д.х.н. Я.О. Межуев**

- «Зеленая химия и химическая технология для достижения целей устойчивого развития»

*Координатор направления член-корр. РАН, проф. Н.П. Тарасова*

- "Квантовая кристаллография и свойства молекулярных и кристаллических систем"

*Координатор направления проф. В.Г. Цирельсон (РХТУ)*

- "Физико-химические закономерности получения макромолекул и полимерных композиционных материалов медико-биологического назначения"

*Координатор направления проф. Я.О. Межуев (РХТУ)*

-«Высокопроизводительные параллельные вычисления: расширение классов материалов с улучшенными характеристиками»

*Координатор направления проф. Э.М. Кольцова (РХТУ)*

-«Органические и гибридные материалы для сенсорики, генерации, преобразования и сохранения энергии»

*Координатор направления проф. В.Ф. Травень (РХТУ)*

- "Суперкомпьютерное молекулярное моделирование механизмов функционирования биокатализаторов"

*Координатор проф. М.Г. Хренова (ФИЦ Биотехнологии / МГУ)*

- "Природа химических связей в атомно-молекулярных системах и материалах с органическими компонентами"

*Координатор проф. Е.В. Барташевич (ЮУрГУ)*

# Принципы организации работы центра:



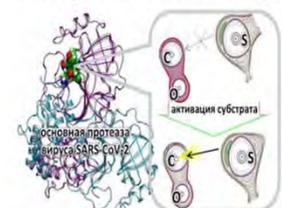
- 1) Участие на добровольной основе, закрепленное договорами о сотрудничестве между РХТУ им. Д.И. Менделеева и работодателем коллаборанта центра для сотрудников сторонних организаций;
- 2) Коллективное управление центром на паритетной основе координаторами научных направлений при модерации ответственным координатором центра;
- 3) Привлечение материальной базы сторонних организаций для выполнения научных исследований участниками центра;
- 4) Реализация совместных научных проектов и привлечение финансирования участниками центра на паритетной основе;
- 5) Публикация научных статей участниками центра по совместно полученным научным материалам.

# Примеры последних совместных публикаций:



1. Tarasova N., Krivoborodov E., Egorova A., Zanin A., Glukhov L., Toropygin I., Mezhuev Y. // *Pure Appl. Chem.* 2020. V. 92. № 8. P. 1297-1304. (Q2)
2. Tarasova N., Krivoborodov E., Zanin A., Mezhuev Y. // *Pure Appl. Chem.* 2021. V. 93. № 1. P. 29-37. (Q2)
3. Tarasova N., Zanin A., Krivoborodov E., Mezhuev Y. // *RSC Advances.* 2021. V. 11. № 15. P. 9008-9020. (Q1)
4. Khrenova M. G., Tsirelson V.G., Nemukhin A.V. // *PCCP.* 2020. V. 22. P. 19069-19079. (Q1)
5. Shteingolts S.A., Stash A.I., Tsirelson V. G., Fayzullin R. R. // *Chem. Eur. J.* 2021. (in print) [doi.org/10.1002/chem.202005497](https://doi.org/10.1002/chem.202005497) (Q1).

**Определен молекулярный механизм необычной субстратной специфичности основной протеазы вируса SARS-CoV-2**



Ученые из ФИЦ Биотехнологии РАН совместно с командой российских ученых предложили новый подход для количественного описания активации соединения в активном центре фермента. Этот подход успешно применен для определения молекулярного механизма необычной субстратной специфичности основной протеазы вируса SARS-CoV-2 и может быть использован для поиска перспективных терапевтических средств борьбы с коронавирусом, образующих ковалентные комплексы с данным ферментом.

Ферменты – белковые макромолекулы, эффективно проводящие определенную химическую реакцию (природные катализаторы) – обладают так называемой субстратной специфичностью, то есть способностью эффективно проводить реакцию со строго определенным исходным веществом (субстратом). Процесс химического превращения субстрата происходит в области фермента, называемой активным центром, и ранее существовало лишь качественное представление о роли фермента в активации соединения в активном центре. Предложенный подход позволяет визуализировать процесс активации и количественно охарактеризовать его.

Проведенное исследование подробно описано в авторитетном научном журнале Английского королевского химического общества *Physical Chemistry Chemical Physics*. Была замечена научным сообществом и включена редакцией журнала в тематическую коллекцию «2020 RSCPP HOT Articles».

Реализация такой методики стала возможной благодаря совместным усилиям ученых, специализирующихся в молекулярном моделировании ферментативных реакций из МГУ, ИБХФ РАН и ФИЦ Биотехнологии РАН и специалистов в области квантовой химии из РХТУ.

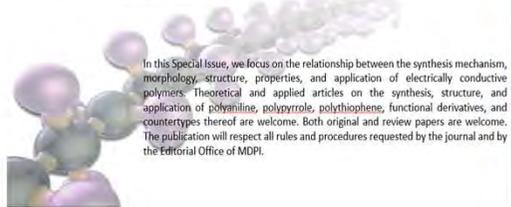


Indexed in: WEB OF SCIENCE, IMPACT FACTOR 3.426

**Oxidative Polymerization in the Synthesis of Electrically Conductive Polymers and Their Composites**

**Special Issue Information**

Web: [https://www.mdpi.com/journal/polymers/special\\_issues/Oxidative\\_Polym\\_Conductive](https://www.mdpi.com/journal/polymers/special_issues/Oxidative_Polym_Conductive)  
 Deadline: 30 September 2021  
 Guest Editor: Dr. Yaroslav O. Mezhuev



In this Special Issue, we focus on the relationship between the synthesis mechanism, morphology, structure, properties, and application of electrically conductive polymers. Theoretical and applied articles on the synthesis, structure, and application of polyaniline, polypyrrole, polythiophene, functional derivatives, and counterions thereof are welcome. Both original and review papers are welcome. The publication will respect all rules and procedures requested by the journal and by the Editorial Office of MDPI.

**Special Issue Editor**

Dr. Yaroslav O. Mezhuev E-Mail Website SciProfiles

Guest Editor

Institute of Chemistry and Problems of Sustainable Development, Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow 125047, Russia

Interests: kinetics and mechanisms of the synthesis of macromolecules; oxidative polymerization; electrically conductive polymers: polyaniline, polypyrrole and others; synthesis of nanoparticles and nanocomposites; hydrogels; systems with controlled release of biologically active substances.



**Special Issue Information**

Dear Colleagues,

The field of oxidative polymerization combines the practical and fundamental aspects of the synthesis, properties, and application of polyconjugated systems and electrically conductive polymers. Studies of the structure, morphology, physical conductivity, mechanical, magnetic, and other properties of polyconjugated systems are the leading edge of physical chemistry of macromolecules. The synthesis of nanoparticles with controlled morphology as well as nanocomposites based on electrically conductive polymers opens up new horizons for their application in tailored composite materials, in molecular electronics, medicine, biology, and other fields.



23 СЕНТЯБРЯ В 22:42 ХИМИЯ И НАУКИ О МАТЕРИАЛАХ

**Новый метод позволяет определить субстратную специфичность белка коронавируса**

Обсудить | 1



Gatti/Acta Cryst B



ДМИТРИ ВЕКШИН  
 кандидат физико-математических наук, доктор наук  
 по специальности физика  
 доктор физико-математических наук

В настоящее время и особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации...

В настоящее время и особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации...

**Пандемия коронавируса ускорила расширение рамок зеленой химии.**

Пандемия коронавируса ускорила расширение рамок зеленой химии. В настоящее время и особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации, особенно в последние дни развития Российской Федерации...

STRUCTURAL SCIENCE  
 CRYSTAL ENGINEERING  
 MATERIALS  
 ISSN 2052-5206

**Looking at local classical and quantum forces in stable crystals using multipole-model refined electron densities and orbital-free DFT approximations**

Carlo Gatti\*

CNR-SCITEC, via Golgi section, via Golgi 19, Milano, Italy 20134, Italy \*Correspondence e-mail: c.gatti@scitec.cnr.it

Two distinct approaches, that of energy and that of force, are adopted in quantum mechanics to get insights on chemical processes. In the second one, the net forces acting on the electrons and nuclei in a system (Ehrhrest and Hellmann-Feynman forces, respectively) are determined and a local version of the approach, in terms of force density fields rather than forces, has also been proposed for electrons. This is the path followed by Tsernelson & Stash (2020) in this issue of *Acta Crystallographica Section B*, to study for the first time the spatial distribution of the electronic forces of different nature acting in stable crystals. Interestingly, by relying on approximations taken from orbital-free DFT, all components of the inner-crystal force can be easily retrieved from multipole-model refined experimental electron densities and their derivatives. No less important is that these calculations are becoming easily doable for any X-ray density crystallographer thanks to a new version of the computer program *WinXPRO*, purposely developed in the study which is discussed in this commentary.

Keywords: forces in crystals; orbital-free DFT; quantum crystallography; atoms in molecules topology.



Dr. Yaroslav O. Mezhuev, PhD, DSc  
 Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moskva, Russian Federation  
 Synthesis of polymer nanoparticles, mechanisms of toxicity of polymer nanoparticles, preparation of nanosized forms of biologically active substances, synthesis of hydrogels, kinetics and mechanism of oxidative polymerization, preparation of electrically conductive nanocomposites and their application as drug carriers.



Dear Professor Tsirelson

Thank you so much for your work as a reviewer for our journals in 2019.

With the volume and accessibility of scientific research increasing across the world, it has never been more important to uphold our role as a high quality publisher.

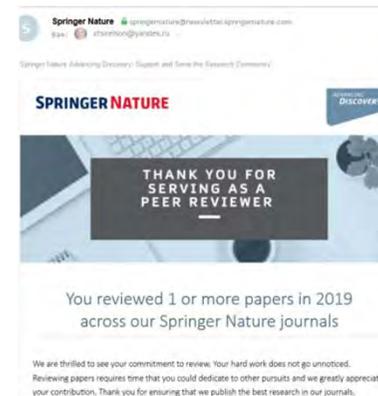
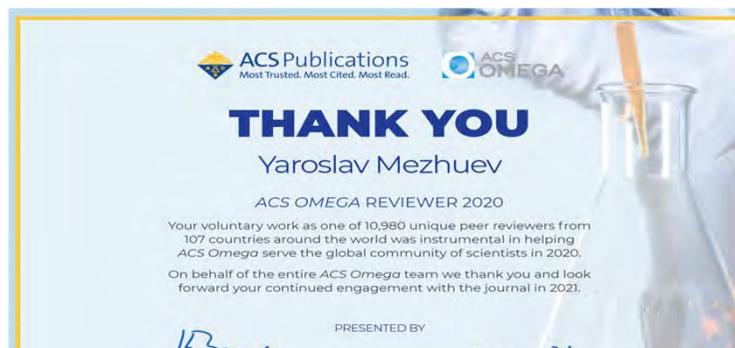
Our reputation for quality makes a real difference to the scientists who publish with us, and your contributions mean we are not only able to maintain, but also build upon it.

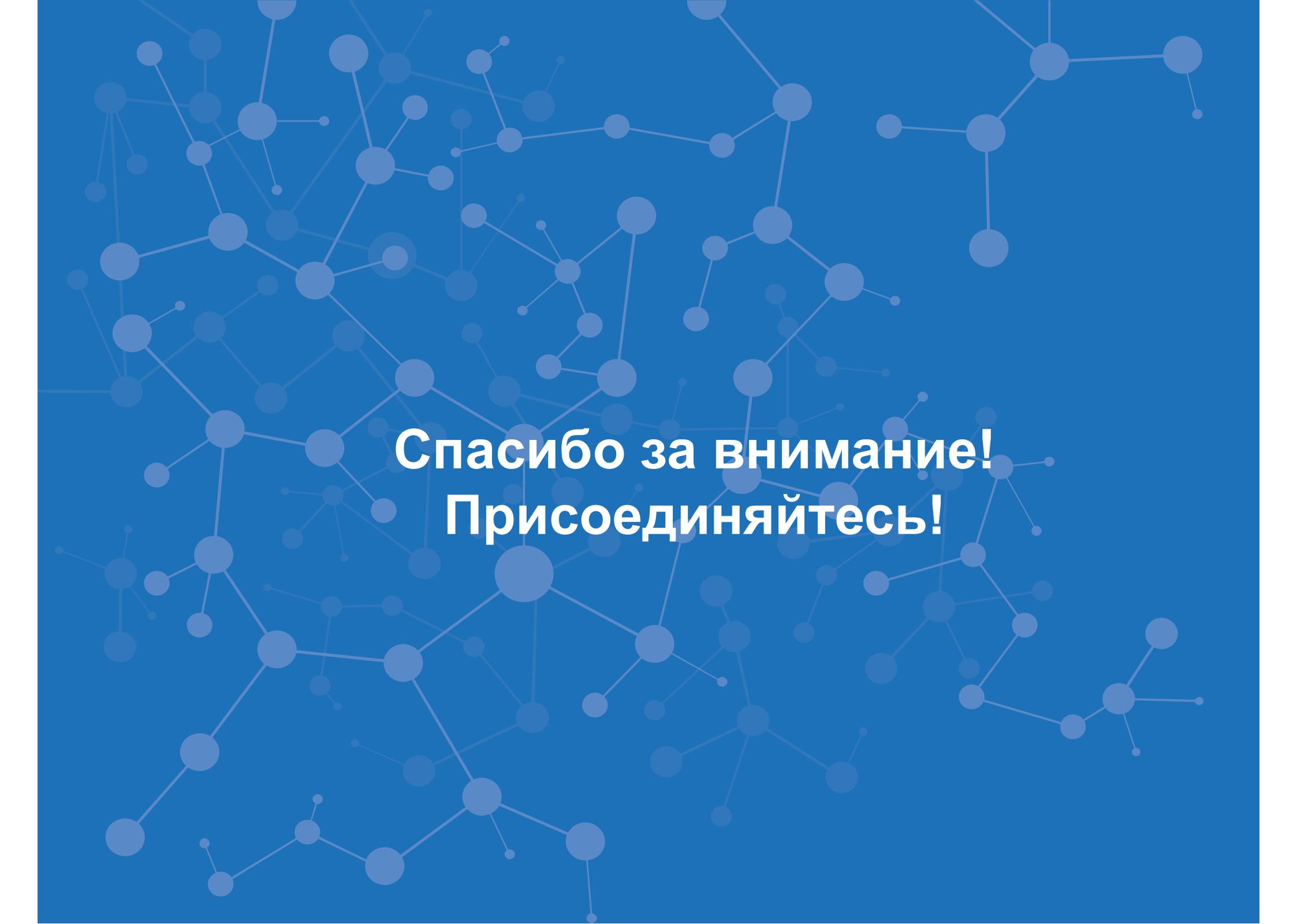
**Your personal reviewing figures for 2019:**

Total number of reviews completed: 2

By journal:

[Physical Chemistry Chemical Physics 2](#)





**Спасибо за внимание!  
Присоединяйтесь!**