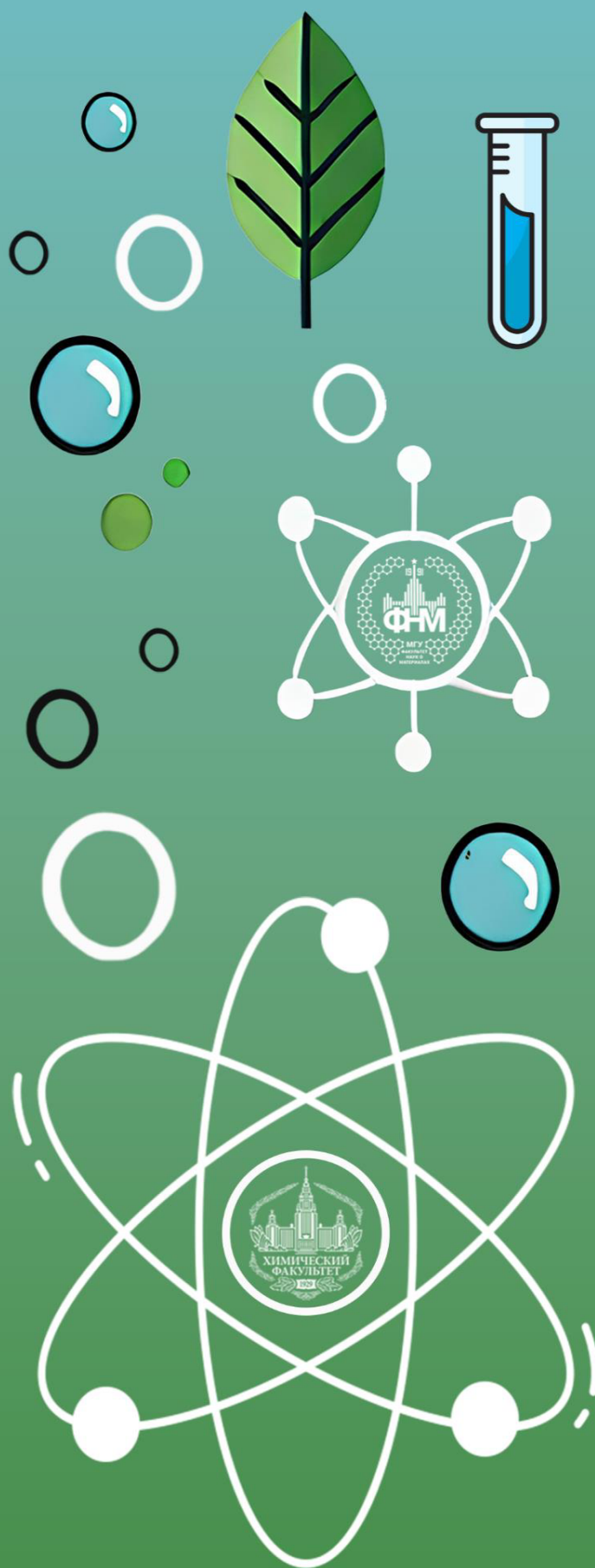
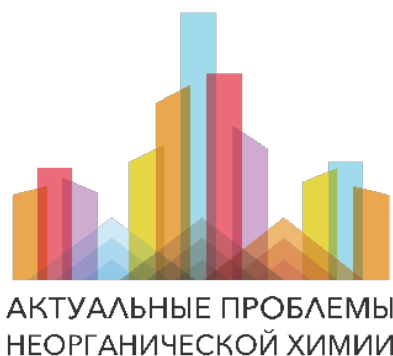


[illegible]

Дом отдыха «Красновидово»
15-17 ноября 2024 года



Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова
Научный совет по неорганической химии РАН



**XXIII Всероссийская школа-конференция молодых
ученых
«Актуальные проблемы неорганической химии:
химия и экология»
СБОРНИК ТРУДОВ**

ПРОВОДИТСЯ ПРИ ФИНАНСОВОЙ ПОДДЕРЖКЕ

Министерства науки и высшего образования Российской
Федерации, грант № 075-15-2021-1353

Центра НТИ “Центр технологий снижения антропогенного
воздействия”,

а также компаний

АО СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ
ООО СЕРВИСЛАБ

при технической поддержке компании MESOL

Красновидово,
15-17 ноября 2024 г.

УДК 546
ББК 24.1

XXIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых «**Актуальные проблемы неорганической химии: химия и экология**» посвящена важнейшим аспектам современного этапа развития химической науки и химической промышленности, связанным с необходимостью защитить окружающую среду от различных видов загрязнений и других антропогенных воздействий, разрушающих биосферу и представляющих угрозу существованию цивилизации. Для достижения экологического благополучия необходим комплексный подход, основанный на принципах зеленой химии и концепции устойчивого развития, что включает переход к ресурсосберегающим экологически безопасным технологиям, разработку новых эффективных способов утилизации отходов химического производства, а также отработанного ядерного топлива; создание новых экологически безопасных материалов, в том числе, наноматериалов; разработку новых эффективных способов мониторинга загрязнений. Эти актуальные проблемы и пути их решения будут представлены в лекциях ведущих российских ученых МГУ, вузов России, и других научных центров.

Наряду с лекционной частью конференция традиционно включает стендовую сессию работ молодых ученых и конкурс на лучшие доклады, победители которого выступают с краткими устными сообщениями о результатах своей работы.

XXIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Актуальные проблемы неорганической химии: химия и экология». XXIII Всероссийская конференция (15-17 ноября 2024 г., Красновидово) [Электронный ресурс]: Сборник трудов / Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

ISBN 978-5-6052004-5-1



© Авторы научных статей, 2024

Программный комитет

Сопредседатели:

Калмыков Степан Николаевич

д.х.н., вице-президент РАН,
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Шевельков Андрей Владимирович

д.х.н., член-корр. РАН,
Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Члены программного комитета:

Антипов Евгений Викторович

д.х.н., член-корр. РАН, Химический факультет
МГУ имени М.В. Ломоносова

Гудилин Евгений Алексеевич

д.х.н., член-корр. РАН, ФНМ МГУ
имени М.В. Ломоносова

Казин Павел Евгеньевич

д.х.н., проф., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Кауль Андрей Рафаилович

д.х.н., проф., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Лукашин Алексей Викторович

д.х.н., член-корр. РАН, ФНМ МГУ
имени М.В. Ломоносова

Романчук Анна Юрьевна

к.х.н., с.н.с., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Румянцева Марина Николаевна

д.х.н., проф., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Организационный комитет

Председатель:

Морозов Игорь Викторович

д.х.н., проф., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Члены

организационного
комитета:

Волкова Татьяна Борисовна

к.х.н., ООО “МЕСОЛ”

Глазунова Татьяна Юрьевна

к.х.н., ст. преп., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Зейнетдинова Галия Ряшитовна

Химический факультет МГУ

имени М.В. Ломоносова

Лиханов Максим Сергеевич

к.х.н., н.с., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Полевик Алексей Олегович

асп., инж., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Пушихина Ольга Сергеевна

инж., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Фёдорова Анна Александровна

к.х.н., доц., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Ответственный

секретарь:

Маханёва Анастасия Юрьевна

асп., инж., Химический факультет МГУ
имени М.В. Ломоносова

Контакты

Сайт конференции:

www.apinch.ru

Электронный адрес:

apinch.inorg@gmail.com
head@inorg.chem.msu.ru

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Пятница 15 ноября

12:40	Отъезд от здания Химического факультета
15:30 – 17:00	Регистрация, заселение, кофе, чай
17:00	Торжественное открытие конференции
17:20 – 18:00 <u>Лекция 1</u>	к.х.н., доц. Осмоловская Ольга Михайловна руководитель научной группы синтеза и исследования наночастиц и наноструктурированных материалов, Институт химии Санкт-Петербургского государственного университета <i>Процесс ориентированного присоединения как ключ к дизайну наноразмерных сорбентов и фотокатализаторов для очистки сточных вод</i>
18:05 – 18:45 <u>Лекция 2</u>	д.х.н., проф. Коробов Михаил Валерьевич кафедра физической химии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Углеродные наноматериалы: история появления и сегодняшние практические применения</i>
18:50 – 19:10	Перерыв, кофе, чай
19:15 – 19:55 <u>Лекция 3</u>	д.х.н., чл.-корр. РАН Шевельков Андрей Владимирович кафедра неорганической химии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Природоподобные сульфиды меди как экологически чистые термоэлектрические материалы</i>
20:00 – 21:30	Ужин

Суббота 16 ноября

9:00 – 9:40	Завтрак
9:45 – 10:25 <u>Лекция 4</u>	д.х.н., проф. Перминова Ирина Васильевна кафедра медицинской химии и тонкого органического синтеза Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Экоадаптивная химия сложных природных систем</i>
10:30 – 11:10 <u>Лекция 5</u>	к.х.н., с.н.с. Романчук Анна Юрьевна кафедра радиохимии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Миграция радионуклидов в окружающей среде: зачем и как мы ее изучаем</i>
11:15 – 11:35	Перерыв, кофе, чай
11:40 – 12:20 <u>Лекция 6</u>	к.х.н., доц. Путляев Валерий Иванович кафедра неорганической химии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Материалы для регенерации твердых тканей организма</i>
12:25 – 13:05 <u>Лекция 7</u>	проф. Гриненко Вадим Александрович Институт Цунг-Дао Ли, Шанхай <i>Применение мюонов в исследовании конденсированного состояния вещества</i>
13:10 – 14:10	Обед
14:15 – 14:55 <u>Лекция 8</u>	д.х.н., проф. Румянцева Марина Николаевна кафедра неорганической химии Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова <i>Материалы для полупроводниковых газовых сенсоров для систем мониторинга атмосферного воздуха</i>
15:00 – 15:25	Перерыв
15:30 – 19:00	Стендовая сессия работ молодых ученых
20:00 – 22:00	Банкет

Воскресенье 17 ноября

9:00 – 9:40	Завтрак
9:45 – 10:25 <u>Лекция 9</u>	д.ф.-м.н., проф. Ампилов Юрий Петрович кафедра сейсмометрии и геоакустики Геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, заслуженный деятель науки РФ <i>Перспективы возобновляемой энергетики в России: аргументы «за» и «против»</i>
10:30 – 11:10 <u>Лекция 10</u>	д.х.н., проф. РАН Вацадзе Сергей Зурабович зав. лабораторией супрамолекулярной химии (№2) ИОХ им. Н.Д. Зелинского РАН <i>Изучение механизмов гомогенного катализа с помощью меченых катализаторов и меченых реагентов</i>
11:15 – 11:35	Перерыв, кофе, чай
11:40 – 12:20 <u>Лекция 11</u>	д.х.н., проф. Добровольский Юрий Анатольевич зав. лабораторией ионики твердого тела Института проблем химической физики РАН, президент ООО «Центр Водородных технологий» <i>Водород в энергетике, технике и политике</i>
12:25 – 13:25	Доклады победителей. Награждение победителей и призеров стендовой сессии. Заккрытие конференции. Общее фото.
13:30 – 14:20	Обед
15:00	Отъезд участников из Дома отдыха

Полякова Д.С., Орлова А.В. Координационные соединения тербия и европия с производным биспидина для люминесцентной термометрии и катализа в растворе
Родригес Пинеда Р.А., Караваев И.А., Савинкина Е.В., Бузанов Г.А., Кубасов А.С. Координационные соединения нитрата и перхлората кобальта(II) и нитрата серебра(I) с некоторыми амидами - прекурсоры при синтезе наночастиц соответствующих оксидов методом SCS
Семешкина Д.Д., Долженко В.Д. Влияние условий кристаллизации на состав комплексов лантаноидов и никеля с L-фенилаланином
Сорокин А.А., Шаульская М.Д., Гребенюк Д.И., Цымбаренко Д.М. Новый металл-органический каркас на основе 1,4-циклогександикарбоксилата тербия как перспективный влагочувствительный материал
Устюжанинов А.Н., Бурлакова М.А., Цымбаренко Д.М. Синтез координационных полимеров на основе полиядерных гидроксотрифторацетатов РЗЭ
Хлопкина Е.В., Сергеева П.А., Терещенко Д.С., Морозов И.В., Козлякова Е.С., Лермонтова Э.Х., Дзубан А.В., Белова Е.В. Полиморфные модификации [Cu(TFA) ₂ pyz ₂] _n : кристаллическое строение и магнитные свойства
Царькова Ю.И., Горбунова Е.А., Дубинина Т.В. Определение констант фотодеградации 1,3-дифенилизобензофурана под действием синглетного кислорода и выходов его генерации для фталоцианиновых фотосенсибилизаторов
Яковлева С.А., Чикинёва Т.Ю., Зиновьева И.В., Заходяева Ю.А. Разработка глубоких эвтектических растворителей на основе алкилфосфин сульфида и производных фенола
Секция V
Агапов С.А., Строганова Е.А., Кузнецов А.Н. Низкоразмерные смешанные халькогениды никеля-индия и никеля-сурьмы
Астахов Н.В., Бердоносков П.С. Нуль- и одномерный магнетизм на примере фаз BaNi ₂ (SeO ₃) ₃ •3H ₂ O, A ₂ B(SeO ₃) ₂ Cl ₂ (A = Sr, Ba, Pb, B = Mn, Co, Cu)
Беларева М.А., Бердоносков П.С. Синтез селенит-галогенидов РЗЭ-Fe(III)/Co(II) как возможных низкоразмерных магнетиков
Вайтиева Ю.А., Иванов С.А., Чаркин Д.О., Аксенов С.М. Новые данные о строении и топологических особенностях сульфатов редкоземельных элементов с общей формулой Ln ₂ (SO ₄) ₃ •8H ₂ O
Васильева Д.Н., Козлова Т.О. Роль второго катиона металла в процессе формировании новых двойных ортофосфатов церия(IV) из церийфосфатных растворов
Воробьёва А.А., Болталин А.И., Морозов И.В., Волкова О.С., Цымбаренко Д.М., Лысенко К.А. Магнетизм полиморфных модификаций галогенидов рения(V) и вольфрама(V)

Гиппиус А.А., Богач А.В., Миронов А.В., Шилов А.И., Кулик А.Д., Морозов И.В. <i>Синтез, кристаллическое строение и свойства пниктидов семейства $122 \text{Ba}(\text{Cr}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$</i>
Загидуллин К.А., Чаркин Д.О., Киреев В.Е., Крупеников Н.А., Дмитриев Д.Н., Аксенов С.М. <i>Аммонийные комплексы 18-краун-6 с тетраэдрическими моноанионами: рентгеноструктурный и термический анализ</i>
Иванов С.А., Чаркин Д.О., Киреев В.Е., Аксёнов С.М. <i>Синтез и кристаллическая структура $[\text{CN}_3\text{H}_6\text{-18-Краун-6}]_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$</i>
Игнатов Е.К., Лиханов М. <i>Направленный синтез соединений со структурой типа IrIn_3 в системах Co-M-Ga-Zn ($\text{M} = \text{Re}, \text{Mn}$)</i>
Ильина Е.В. <i>Стронций-замещенные фосфаты, допированные катионом Eu^{3+}</i>
Кабанов Р.В., Бережная Т.С., Чебышев К.А. <i>Замещение молибдена на вольфрам в молибдате $\text{La}_{2.5}\text{Eu}_{2.5}\text{Mo}_{2.75}\text{O}_{16+\delta}$</i>
Киреев В.Е., Вайтиева Ю.А., Волков С.Н., Аксенов С.М. <i>Синтез и кристаллическая структура новых фторооксоборатов серебра</i>
Копылова Ю.О., Волков С.Н., Арсентьев М.Ю., Топалов Э.В., Чаркин Д.О., Аксенов С.М., Бубнова Р.С. <i>Новая модификация метаборной кислоты, $\delta\text{-HBO}_2$</i>
Леденёв М.М. <i>Исследование процессов формирования кристаллофосфоров на основе алюмината бария-иттрия, активированных ионами европия (III)</i>
Лукачева С.М., Захарова Е.Ю., Маханёва А.Ю., Казаков С.М., Нестеренко С.Н., Банару А.М., Лысенко К.А., Кузнецов А.Н. <i>«На несколько никелей больше»: искаженный структурный мотив типа HoCoGa_5 и топологические гетерокластеры в тройном интерметаллиде $\text{Ti}_{2-x}\text{Ni}_3\text{Ga}_9$</i>
Маханёва А.Ю., Захарова Е.Ю., Нестеренко С.Н., Лысенко К.А., Хрусталёв В.Н., Кузнецов А.Н. <i>Загадки архитектуры Cu-содержащих соединений: особенности строения новых четверных фосфид-платинидов в системах R-Pt-Cu-P ($\text{R} = \text{Ca}, \text{Eu}$)</i>
Медведев А.С., Власенко В.А., Перваков К.С. <i>Синтез и свойства железосодержащих сверхпроводников: $\text{ARbFe}_4\text{As}_4$ ($\text{A} = \text{Sr}, \text{Ca}$)</i>
Новиков А.П., Волков М.А., Герман К.Э., Григорьев М.С. <i>Межмолекулярные нековалентные взаимодействия в кристаллических структурах органических перренатов</i>
Пашков Г.А., Бердоносков П.С. <i>Синтез аналогов минерала атласовит $(\text{AM})\text{Cu}_6\text{MXO}_4(\text{SO}_4)_5\text{Cl}$, $\text{AM} = \text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$; $\text{M} = \text{Fe}, \text{Al}, \text{Cr}$; $\text{X} = \text{Sb}, \text{Bi}$</i>
Полевик А.О., Соболев А.В., Пресняков И.А., Лысенко К.А., Кульбачинский В.А., Шевельков А.В. <i>Синтетические оуэнситы с медью и железом: потенциальные термоэлектрические материалы с низкой теплопроводностью</i>

	Рахманов Е.О., Шилов А.И., Дегтяренко А.Ю., Лысенко К.А., Кузнецов А.Н., Морозов И.В., Шевельков А.В. <i>BaAg_{1,8}Bi₂ и BaAu_{1,8}Bi₂ висмутсодержащие аналоги Fe-ВТСП семейства 122: синтез, структура, электронное строение</i>
	Тетерин Ю.А., Кузенкова А.С., Плахова Т.В., Шаульская М.Д., Цымбаренко Д.М., Романчук А.Ю. <i>Синтез и исследование растворимости двойной соли Np(V) состава Ca_{0,5}NpO₂CO₃</i>
	Фролов С.В., Быков А.В., Шестимерова Т.А., Гончаренко В.Е., Шевельков А.В. <i>Поиск и изучение новых хлоровисмутатов(III) гомопиперазина</i>
	Чегодин С.В., Киреев В.Е., Чаркин Д.О., Аксёнов С.М. <i>Структурные особенности семейства теллурид-галогенидов празеодима</i>
	Чепрасова Д.С., Лиханов М.С. <i>Синтез и изучение локальной структуры твердого раствора Co_{1-x}Mn_xGa₃</i>
	Шуев Н.В., Халания Р.А., Шевельков А.В. <i>Ab-initio предсказание и направленный синтез новых родственных интерметаллидов в системе R–Ni–Si</i>

Ab-initio предсказание и направленный синтез новых родственных интерметаллидов в системе R–Ni–Si

Шуев Н.В., Халания Р.А., Шевельков А.В.

Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия

nikita.shuev@chemistry.msu.ru

В рамках работы выполнены квантовохимические вычисления для группы теоретических соединений трех родственных структурных типов ZrCrSi_2 , $\text{Zr}_4\text{Co}_4\text{Ge}_7$ и $\text{Nb}_2\text{Cr}_4\text{Si}_5$ [1-3] в системе R–Ni–Si (R = Sc, Ti, V, Cr, Y, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W). На основании полученных данных провели оценку энергии образования и осуществили направленный поисковый синтез интересных соединений.

Структурные типы ZrCrSi_2 и $\text{Nb}_2\text{Cr}_4\text{Si}_5$ характеризуются пространственными группами *Pbam* и *Ibam* соответственно, а соединения структурного типа $\text{Zr}_4\text{Co}_4\text{Ge}_7$ кристаллизуются в тетрагональной сингонии с пространственной группой *I4/mmm*. Все три структурных типа являются родственными и содержат общие структурные фрагменты CuAl_2 и Mn_5Si_3 .

Квантовохимические вычисления проведены в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) с использованием метода псевдопотенциалов для остовных оболочек и базиса плоских волн для валентного пространства. При расчетах применяли обменно-корреляционный функционал PBEsol. Критерием сходимости выступало изменение энергии менее 10^{-5} эВ.

В качестве методики синтеза интересных соединений был выбран метод роста монокристаллов в расплаве индия с использованием алундового тигля в вакуумированной кварцевой ампуле. Соотношение исходных элементов R:Ni:Si:In (R = Sc, Ti, V, Cr, Y, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W) = 3:3:5:30.

Результаты квантовохимических вычислений и направленного синтеза теоретических соединений будут подробно обсуждены в докладе.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-13-00006.

[1] Я.П. Ярмолук и др. *Кристаллография* 27 (1982) 1090-1093.

[2] W. Jeitschko. *Naturwissenschaften* 55 (1968) 176.

[3] П.И. Крипьякевич и др. *Кристаллография* 13 (1968) 781-786.