

СОДЕРЖАНИЕ

О подготовке бакалавров на факультете наук о материалах МГУ.....	1
Сведения о защитах бакалаврских работ на ФНМ.....	2
Положение о защите квалификационных работ (квалификация – бакалавр материаловедения) на факультете наук о материалах МГУ им. М.В. Ломоносова.....	2
График проведения защит бакалаврских работ 2012 г.....	5
Процедура защит бакалаврских работ.....	5
Состав Государственной Аттестационной Комиссии по специальности 020900 – «химия, физика и механика материалов» (квалификация – бакалавр материаловедения) в 2012 г.....	6
Расписание защит квалификационных работ.....	7
Аннотации квалификационных работ	10

О ПОДГОТОВКЕ БАКАЛАВРОВ НА ФАКУЛЬТЕТЕ НАУК О МАТЕРИАЛАХ МГУ

Впервые защиты квалификационных бакалаврских работ на факультете Наук о материалах (ФНМ) Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова были проведены в июне 2006 года. Тогда степень бакалавра получили 4 человека. В 2007 году было защищено 16, в 2008 году было защищено 19, а в 2009 году была защищена 21 бакалаврская работа по специальности 020900 - «химия, физика и механика материалов». Квалификационные работы на соискание степени бакалавра выполняются в различных лабораториях химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова и в институтах Российской академии наук.

Как правило, работа на соискание степени бакалавра включает в себя синтез нового материала (химическая часть), исследование его функциональных свойств, например, механических, электрофизических, магнитных. Во многих работах содержатся также теоретические расчеты, предваряющие эксперимент, либо обосновывающие его результаты.

В состав Государственной Аттестационной комиссии по защите квалификационных бакалаврских работ входят преподаватели ФНМ, химического и физического факультетов, Института механики МГУ, а также представители других высших учебных заведений и институтов Российской академии наук, специалисты в области химии, физики и механики материалов.

При оценке квалификационных бакалаврских работ учитывается участие студента в конференциях, наличие публикаций в научных журналах, в которых студент является соавтором. Статьи, подготовленные при участии студентов ФНМ, публикуются в ведущих зарубежных и российских журналах. Важным фактором, способствующим развитию научной активности студентов ФНМ, является то, что научная работа входит в учебный план. Формой отчетности являются обязательные студенческие научные конференции, которые проводятся по окончании каждого семестра. При выполнении исследований студенты используют современное научное оборудование.

Ежегодно Государственная Аттестационная Комиссия отмечает общий высокий научный уровень представленных работ: разнообразие используемых подходов и методов исследования, широту затронутых проблем, эрудицию выпускников ФНМ, их высокую квалификацию, сформировавшуюся благодаря специфике существующего на факультете учебного плана. Квалификационные работы в большинстве своем содержат значительный объем научных исследований. Комиссия отмечает большое число публикаций (статей и тезисов докладов международных конференций) у выпускников по теме дипломных работ.

В 2011 году Государственной Аттестационной Комиссией были отмечены квалификационные работы на соискание степени бакалавра Соколиковой Марии Сергеевны, Полякова Александра Юрьевича, Ирхиной Анастасии Александровны, Самойловой Наталии Александровны

Дипломы с отличием получили 5 студентов: Бородинов Николай Сергеевич, Дзубан Александр Владимирович, Лебедев Дмитрий Николаевич, Курносков Никон Михайлович, Соколикова Мария Сергеевна.

СВЕДЕНИЯ О ЗАЩИТАХ БАКАЛАВРСКИХ РАБОТ НА ФНМ

	2007	2008	2009	2010	2011	2012
Общее число студентов на 4 курсе	17	20	22	23	20	16
Число студентов, имеющих публикации	14	20	22	22	20	14
Общее число публикаций, из них статей	146 28	197 47	224 38	143 29	125 19	65 8
Число оценок «отлично»	11	13	18	19	17	
«хорошо»	4	7	2	3	3	
«удовлетв.»	1		1	1	0	
Число работ, отмеченных ГАК	3	3	5	4	4	
Число дипломов с отличием	8	6	6	7	5	

ПОЛОЖЕНИЕ О ЗАЩИТЕ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ РАБОТ (КВАЛИФИКАЦИЯ – БАКАЛАВР МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ) НА ФАКУЛЬТЕТЕ НАУК О МАТЕРИАЛАХ МГУ ИМ. М.В. ЛОМОНОСОВА

Квалификационные работы на степень бакалавра могут быть выполнены студентами факультета наук о материалах в различных научных лабораториях факультетов МГУ, в институтах РАН или (частично) в ведущих зарубежных университетах. Руководитель квалификационной работы должен иметь научную степень доктора или кандидата наук. В случае выполнения работы в сторонних институтах или за рубежом, необходим соорганизатор из числа преподавателей или сотрудников МГУ.

К защите квалификационных работ допускаются студенты 4 курса, полностью завершившие выполнение учебного плана.

Защиты квалификационных работ проводятся в период с 11 по 25 июня. График проведения защит утверждается ректоратом МГУ не позднее, чем за 10 дней до начала работы ГАК.

Тематика квалификационной работы должна соответствовать образовательному направлению «химия, физика и механика материалов».

Точное название работы и сведения о руководителях (ФИО, ученая степень, должность, звание, место работы) должны быть представлены секретарю ГАК за 3 месяца до начала защит. Сведения о рецензенте (ФИО, ученая степень, должность, звание, место работы) должны быть представлены секретарю Государственной Аттестационной Комиссии в виде подписанного соответствующими лицами документа не позднее, чем за 1 месяц до защиты. Краткая аннотация работы (объемом не более 1 стр.), список опубликованных и принятых к печати работ (включая тезисы докладов на конференциях) в электронном виде необходимо представить секретарю ГАК не позднее, чем за 1 месяц до защиты.

В качестве рецензента работы должен выступать специалист по теме квалификационной работы из числа кандидатов или докторов наук, не имеющий с выпускником совместных публикаций и не работающий в том научном подразделении (лаборатории), где выполнялась работа. На заседании Административного совета обсуждаются и утверждаются точное название работы (не позднее, чем за 2,5 месяца до начала защит дипломных работ) и кандидатура рецензента (не позднее, чем за 3 недели до начала защит дипломных работ). Административный совет ФНМ имеет право назначить другого рецензента.

Для допуска к защите квалификационной работы необходимо представить следующие материалы: не менее 2 переплетенных экземпляров квалификационной работы, отзывы руководителя и рецензента в письменной форме с обязательным указанием оценки в пятибалльной шкале (требования к отзывам руководителя и рецензента представлены в Приложении), 15 экземпляров иллюстративного материала, соответствующих презентации, а так же диск, содержащий все указанные документы в виде pdf-файлов. Материалы необходимо представить секретарю Государственной Аттестационной Комиссии не позже, чем за 3 дня до начала первого заседания по защите квалификационных работ. Студенты, не представившие все указанные документы в срок, к защите квалификационной работы не допускаются.

Продолжительность каждой защиты – не более 30 минут. Время, предоставляемое для доклада – до 10 минут, остальное время отводится на вопросы и ответы, отзывы рецензента и руководителя и обсуждение работы. Защита квалификационной работы происходит в присутствии руководителя и рецензента.

Оценка квалификационной работы производится путем тайного голосования членов Комиссии с учетом оценок научного руководителя и рецензента.

В случае неявки на заседание ГАК без уважительных причин студент подлежит отчислению. При отсутствии выпускника по уважительным причинам защита переносится на более поздний срок в период работы Комиссии. При неудовлетворительной оценке работа может быть вторично защищена при условии ее существенной переработки, достаточность которой оценивается экспертной группой ГАК.

Любые изменения в данное Положение подлежат утверждению Ученым советом ФНМ и могут производиться не позднее, чем за месяц до начала работы ГАК.

Рекомендации по оформлению квалификационных работ

1. Название темы квалификационной работы должно быть сформулировано четко, кратко и конкретно на основании выполненного выпускником объема работ. Следует избегать чрезмерно общей формулировки названия.

2. Объем работы – не более 50 стр. машинописного текста, не считая приложений (Times New Roman 12 points, 1.5 интервала).

3. Работа должна включать ВВЕДЕНИЕ с постановкой задачи работы, ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ по данной проблеме, ТЕОРЕТИЧЕСКУЮ (для теоретических работ – МЕТОДИЧЕСКУЮ) ЧАСТЬ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНУЮ (для теоретических – РАСЧЕТНУЮ) ЧАСТЬ, ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ, отдельно должны быть выделены ВЫВОДЫ работы. Обзор литературы не должен превышать 30% от объема всей работы, не считая приложений.

4. Рисунки и таблицы должны быть пронумерованы и иметь подписи (рисунки – внизу, таблицы – вверху).

5. Цитируемая литература приводится под заголовком СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ в конце квалификационной работы.

Ссылки на литературу должны содержать фамилии и инициалы авторов, название статьи, журнала, год, том, номер, страницы, а для книг – фамилии и инициалы авторов, точное название книги, город, издательство, год, страницы. Все ссылки печатаются на языке оригинала и нумеруются. Номера ссылок в тексте должны следовать строго по порядку и быть заключены в квадратные скобки.

Пример

Имамов Р.М., Пинскер З.Г. Исследование полупроводника AgTlTe_2 методом электронной дифракции // Кристаллография. 1964. Т.9. С.743-747.

6. Иллюстративный материал (презентация) должен соответствовать работе, представленной на защиту, отражать ключевые моменты работы, включать логическую схему работы. Объем иллюстративного материала ограничивается 10 страницами.

Требования к отзыву научного руководителя

В отзыве научного руководителя должны быть отражены следующие показатели профессиональной подготовки выпускника:

- 1) умение формулировать и ставить задачи своей деятельности при выполнении квалификационной работы, собирать и анализировать литературу;
- 2) умение эффективно использовать экспериментальные методы и аппаратуру, необходимые для выполнения работы;
- 3) владение современными методами анализа и интерпретации полученной научной информации;
- 4) умение формулировать объективные выводы и рекомендации по итогам проведенной работы.

В отзыве руководитель должен отметить достоинства и недостатки студента, главным образом характеризуя его отношение к выполнению работы, а также обязательно указать оценку, которой он оценивает работу студента и приобретенные знания и практические навыки.

Требования к отзыву рецензента

Рецензирование квалификационной работы может осуществляться специалистами в данной области (за исключением сотрудников той же лаборатории, в которой выполнялась дипломная работа), имеющими степень кандидата или доктора наук.

В отзыве рецензента квалификационной работы должно быть отражено:

- 1) актуальность тематики работы;
- 2) степень информативности обзора литературы и его соответствие теме работы;
- 3) соответствие поставленной задаче используемых экспериментальных и расчетных методов;
- 4) использование в работе знаний по общим фундаментальным и специальным дисциплинам;
- 5) четкость и последовательность изложения материала;
- 6) качество и полнота обсуждения полученных результатов;
- 7) обоснованность выводов;
- 8) оригинальность и новизна полученных результатов;
- 9) качество оформления работы.

В заключение рецензент должен отметить достоинства и недостатки работы, сделать критические замечания по существу работы и рекомендовать общую оценку работы.

ГРАФИК ПРОВЕДЕНИЯ ЗАЩИТ БАКАЛАВРСКИХ РАБОТ 2012 г.

18 июня 2012, понедельник

11.00 – 11.05. Вступительное слово председателя ГАК, который объявляет о начале защит бакалаврских дипломных работ, знакомит с процедурой защит дипломных работ, обращает внимание присутствующих на необходимость строгого соблюдения процедуры проведения как самих защит, так и оценки дипломников.

11.05 – 12.35 Защиты дипломных работ

12.35 – 13.05 Перерыв (чаепитие членов ГАК и студентов)

13.05 – 14.35 Защиты дипломных работ

14.35 – 15.05 Обсуждение работ и голосование

15.05 – 15.15 Объявление результатов

19 июня 2012, вторник

11.00 – 12.30 Защиты дипломных работ

12.30 – 13.00 Перерыв (чаепитие членов ГАК и студентов)

13.00 – 14.00 Защиты дипломных работ

14.00 – 14.30 Обсуждение работ и голосование

14.30 – 14.40 Объявление результатов

20 июня 2012, среда

11.00 – 12.30 Защиты дипломных работ

12.30 – 13.00 Перерыв (чаепитие членов ГАК и студентов)

13.00 – 14.00 Защиты дипломных работ

14.00 – 14.30 Обсуждение работ и голосование

14.30 – 14.45 Итоговое объявление результатов. Поздравление и награждение бакалавров. Заключительное слово председателя ГАК и представителя администрации ФНМ.

ПРОЦЕДУРА ЗАЩИТ БАКАЛАВРСКИХ РАБОТ:

- Председатель ГАК объявляет защиту квалификационной работы соискателя, называет фамилию, имя, отчество, тему работы, место выполнения работы.
- Секретарь ГАК информирует присутствующих о длительности периода выполнения квалификационной работы, о наличии публикаций у соискателя степени бакалавра, сообщает средний бал студента за время обучения на ФНМ МГУ.
- Соискатель излагает суть работы. Продолжительность доклада – не более 10 минут.
- Члены ГАК задают соискателю вопросы.
- Выступление рецензента (не более 5 минут).
- Выступление руководителя (не более 5 минут).
- Обсуждение работы (выступления по желанию).
- Заключительное слово соискателя.

**СОСТАВ ГОСУДАРСТВЕННОЙ АТТЕСТАЦИОННОЙ КОМИССИИ
ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ 020900 –
«ХИМИЯ, ФИЗИКА И МЕХАНИКА МАТЕРИАЛОВ»
(КВАЛИФИКАЦИЯ – БАКАЛАВР МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ) в 2012 году**

1	Тананаев Иван Гундарович – Председатель	чл.-корр. РАН, доктор химич. наук, профессор, ИФХЭ РАН
2	Третьяков Юрий Дмитриевич	академик РАН, доктор хим. наук, профессор, декан ФНМ МГУ
3	Бойнович Людмила Борисовна	чл.-корр. РАН, доктор физ.-мат. наук, г.н.с. Институт физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН
4	Мелихов Игорь Витальевич	чл.-корр. РАН, доктор хим. наук, профессор, зав. лабораторией, химический ф-т МГУ
5	Гудилин Евгений Алексеевич	чл.-корр. РАН, доктор хим. наук, профессор, ФНМ МГУ
6	Мешалкин Валерий Павлович	чл.-корр. РАН, доктор техн. наук, профессор, директор МИ-ЛРТИ, зав. кафедрой логистики и экономической информации РХТУ
7	Ярославцев Андрей Борисович	чл.-корр. РАН, доктор хим. наук, зав. сектором химии редких элементов и неорганических полимеров ИОНХ РАН
8	Лукашин Алексей Викторович	чл.-корр. РАН, доктор хим. наук, профессор, ФНМ МГУ
9	Левашов Евгений Александрович	академик РАН, доктор, доктор техн. наук, профессор, зав. кафедрой, МИСИС
10	Кауль Андрей Рафаилович	доктор хим. наук, профессор, зав. лабораторией, химический ф-т МГУ
11	Скипетров Евгений Павлович	доктор физ.-мат. наук, профессор, физический ф-т МГУ
12	Чурагулов Булат Рахметович	доктор хим. наук, профессор, химический ф-т МГУ
13	Кецко Валерий Александрович	доктор хим. наук, в.н.с. ИОНХ РАН
14	Румянцева Марина Николаевна	доктор хим. наук, доцент, химический ф-т МГУ
15	Юровская Марина Абрамовна	доктор хим. наук, в.н.с., химический ф-т МГУ
16	Васин Рудольф Алексеевич	доктор физ.-мат. наук, профессор, институт механики МГУ
17	Кнотько Александр Валерьевич	доктор хим. наук, с.н.с., химический ф-т МГУ
18	Иванов Владимир Константинович	доктор хим. наук, в.н.с., ИОНХ РАН
19	Климонский Сергей Олегович	канд. физ.-мат. наук, с.н.с., доцент, РХТУ
20	Успенская Ирина Александровна	канд. хим. наук, доцент, химический ф-т МГУ
21	Путляев Валерий Иванович	канд. хим. наук, доцент, химический ф-т МГУ
22	Гаршев Алексей Викторович	канд. хим. наук, н.с., химический ф-т МГУ
23	Чаркин Дмитрий Олегович	канд. хим. наук, с.н.с., химический ф-т МГУ
24	Сафронова Татьяна Викторовна – секретарь	канд. техн. наук, с.н.с., доцент, химический ф-т МГУ

**РАСПИСАНИЕ ЗАЩИТ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ РАБОТ
СТУДЕНТАМИ ФНМ в 2012 г.
18 ИЮНЯ**

№	Соискатель	Название квалификационной работы	Место выполнения квалификационной работы	Руководитель	Рецензент
1	Акинфиев Виктор Сергеевич	Кристаллохимический дизайн новых слоистых флюоритов и антифлюоритов	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. направленного неорганического синтеза	к.х.н., в.н.с., Чаркин Дмитрий Олегович	к.х.н., доц. Розова Марина Геннадиевна, МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. неорганической кристаллохимии,
2	Алешин Глеб Юрьевич	Получение базальтовых непрерывных волокон с повышенной щелочестойкостью и изучение их физико-химических свойств	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. химической технологии, Лаб. технологии функциональных материалов	к.х.н., с.н.с., Гутников Сергей Иванович	к.х.н., доц., Шорникова Ольга Николаевна, МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. химической технологии и новых материалов Лаб. химии углеродных материалов
3	Броцман Виктор Андреевич	Гидриды и генерируемые in situ анионы фторсодержащих фуллеренов для направленного синтеза органо-фуллеренов, перспективных для фотовольтаических приложений	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. физической химии, Лаб. термохимии	м.н.с. Иоутси Виталий Алексеевич; д.х.н., с.н.с. Горюнков Алексей Анатольевич	к.х.н., м.н.с. Никитин Олег Михайлович, МГУ им. М.В.Ломоносова Химический ф-т, Каф. органической химии, Лаб. теории и механизмов органических реакций
4	Елисеев Артем Анатольевич	Композиты на основе манганита с эффектом памяти магнетосопротивления	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. Неорганического материаловедения	к.х.н., м.н.с., Васильев Александр Витальевич	к.х.н, докторант Манкевич Алексей Сергеевич, МГУ им. М.В.Ломоносова, Факультет наук о материалах
5	Плахова Татьяна Вячеславовна	Гомозэпитаксиальные наноструктуры оксида цинка	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. неорганического материаловедения	к.х.н., в.н.с., Баранов Андрей Николаевич	к.х.н, инженер Бурова Лидия Игоревна, МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Физической химии
6	Черник Алексей Андреевич	Синтез и свойства мезоионных имидазопири-мидинов	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. органической химии, Лаб. Органического Синтеза	д.х.н., в.н.с., Бабаев Евгений Вениаминович	к.х.н, с.н.с. Будынина Екатерина Михайловна МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т, Каф. химической кинетики

**РАСПИСАНИЕ ЗАЩИТ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ РАБОТ
СТУДЕНТАМИ ФНМ в 2012 г.
19 ИЮНЯ**

№	Соискатель	Название квалификационной работы	Место выполнения квалификационной работы	Руководитель	Рецензент
1	Кулагин Андрей Андреевич	Реакции натрий-кальциевого обмена в гидроалюмосиликатах	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Физической химии, Лаб. химической термодинамики	к.х.н., доц., Успенская Ирина Александровна; м.н.с., Коваленко Никита Андреевич	д.х.н., доц. Скокан Евгений Вячеславович, МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т Каф. физической химии
2	Макаров Павел Юрьевич	Оценка термодинамических свойств алюмосиликатов на основании структуры и состава соединений	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Физической химии, Лаб. химической термодинамики	к.х.н., в.н.с., Куценко Илья Борисович	д.х.н., в.н.с. Чилингаров Норберт Суренович МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Физической химии
3	Полковников Михаил Владимирович	Исследование реакции обратимого гидрирования MgB_2 в условиях высокого давлений	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Химической технологии и новых материалов, Лаб. энергоёмких и каталитически активных веществ	к.х.н. Митрохин Сергей Владиленович	к.х.н., с.н.с. Кравченко Олег Владимирович, МГУ им. М.В.Ломоносова, химический ф-т, Каф. Химической технологии и новых материалов
4	Сачкова Татьяна Юрьевна	Синтез и оптические свойства коллоидных квантовых точек халькогенидов кадмия, легированных медью	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. физики и химии полупроводниковых и сенсорных материалов	к.х.н., с.н.с., Дорофеев Сергей Геннадиевич	к.х.н., в.н.с. Баранов Андрей Николаевич МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. неорганической химии, Лаб. неорганического материаловедения
5	Чепига Алексей Анатольевич	Изучение взаимодействия с водородом сплавов на основе ванадия	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, каф. химической технологии, Лаб. энергоёмких и каталитически активных веществ	д.х.н., зав. лаб., Вербецкий Виктор Николаевич	К.х.н., доц. Татаркина Алла Львовна, МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т, Каф. общей химии

**РАСПИСАНИЕ ЗАЩИТ КВАЛИФИКАЦИОННЫХ РАБОТ
СТУДЕНТАМИ ФНМ в 2011 г.
20 ИЮНЯ**

№	Соискатель	Название квалификационной работы	Место выполнения квалификационной работы	Руководитель	Рецензент
1	Козлякова Екатерина Сергеевна	Синтез монокристаллических сверхпроводящих халькогенидов железа Fe(S,Se,Te) и исследование их свойств.	МГУ им. М.В.Ломоносова, Физический ф-т Каф. низких температур и сверхпроводимости, Лаб. квантовых кооперативных явлений	к.х.н., с.н.с., Чареев Дмитрий Александрович, к.ф.-м.н., с.н.с. Волкова Ольга Сергеевна	д.х.н., доц., в.н.с. Морозов Игорь Викторович, МГУ им. Ломоносова Химический ф-т
2	Комкова Мария Андреевна	Газовые сенсоры на основе систем трех электродов, объединенных капиллярными волокнами.	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. аналитической химии, Лаб. Электрохимических методов	д.х.н., проф., Карякин Аркадий Аркадьевич	д.х.н., доц. Румянцева Марина Николаевна МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. Неорганической химии
3	Межуев Евгений Михайлович	Диагностика электронного состояния и атомного окружения ионов олова в ортохромитах РЗЭ методом мессбауэровской спектроскопии	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. радиохимии Лаб. мессбауэровской спектроскопии и радиохимических методов	д.х.н., доц., Афанасов Михаил Иванович	к.х.н., доц. Куликов Леонид Алексеевич МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. радиохимии
4	Митрофанов Артем Александрович	Разделение трехвалентных актинидов и лантанидов с использованием замещенных диамидов 2,2'-бипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты для нужд радиохимической технологии и ядерной медицины.	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. радиохимии, Лаб. дозиметрии и радиоактивности окружающей среды	д.х.н., проф., зав. каф. радиохимии, Калмыков Степан Николаевич	д.х.н., проф. Устынюк Юрий Александрович, МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. органической химии, Лаб. ЯМР
5	Мокрушина Анна Валерьевна	Микросенсоры на основе берлинской лазури для задач <i>in vivo</i> диагностики	МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т, Каф. аналитической химии, Лаб. Электрохимических методов	д.х.н., профессор Карякин Аркадий Аркадьевич	к.х.н., доц. Елисеев Андрей Анатольевич МГУ им. М.В.Ломоносова Факультета Наук о Материалах

Аннотации квалификационных работ

18 ИЮНЯ 2012 г.

Кристаллохимический дизайн новых слоистых флюоритов и антифлюоритов.

Акинфиев В.С.

Руководитель: к.х.н., с.н.с. Чаркин Д.О.

Благодаря уникальному набору важных в прикладном отношении свойств и богатству кристаллохимии интерес к соединениям со слоистыми структурами возрастает в течение многих десятилетий. В частности, структуры, образованные сочетанием висмутсодержащих флюоритных и перовскитных слоёв (называемые фазами Ауривиллиуса), известны благодаря важным прикладным свойствам, в частности, сегнетоэлектричеству. Известны также комбинации флюоритных слоёв и галогенидных (называемых фазами Силлена), известных благодаря фотокаталитическим свойствам. В последнее время возможности получения подобных новых структур почти исчерпаны. Поэтому возникает предположение о возможности образования новых, более сложных структур, содержащих все три типа слоёв, отмеченных выше. Подобные «тройные» комбинации известны под названием «ВІРОХ» (Bi-Perovskite-Oxohalogenide).

Синтез новых соединений типа ВІРОХ сложен, поскольку отсутствуют чёткие критерии возможности образования новой структуры, что связано с отсутствием систематических данных в этой области. Таким образом, целью нашей работы стало расширение класса слоистых флюоритов типа ВІРОХ с попыткой подтверждения и уточнения имеющихся в литературе критериев образования.

В работе исследованы соединения, содержащие комбинации флюоритных (F), галогенидных (H) и перовскитных (P) слоёв различной «толщины» (т.е. различные гомологи). Для проверки общности подхода также были рассмотрены соединения, содержащие слои типа антифлюорита. Целевые соединения были получены классическим твердофазным методом. Условия синтеза уточнялись, исходя из условий синтеза прекурсоров (фаз Силлена и Ауривиллиуса). Отжиг оксогалогенидов проводили в запаянных кварцевых ампулах.

В результате получены и рентгенографически охарактеризованы более 20 новых соединений типа ВІРОХ с различными «толщинами» и составами перовскитных слоёв, различными галогенидными слоями, различными по составу флюоритными слоями. Уточнены детали кристаллических структур избранных представителей, изучено распределение катионов с разным зарядом и размером по различным типам слоев.

На примере некоторых соединений показано, что при переходе к более сложной структуре (при внедрении слоя галогена в фазу Ауривиллиуса), свойства соединения сохраняются. Также отмечено, что, при увеличении «толщины» перовскитного слоя, «жесткость» его увеличивается, т.е. возможности для образования более сложных структур на основе фазы Ауривиллиуса, содержащей тройной перовскитный слой, беднее, чем для фазы Ауривиллиуса, содержащей одинарный перовскитный слой.

Публикации студента:

1. Акинфиев В.С. Поиск соединений со структурами сростания на основе Bi_2VO_5 , 5// XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011», 2011, http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/1349/17043_7d4d.doc

2. Акинфиев В.С. *Поиск новых оксогалогенидов $a2bi3nb2o11x(a=sr, ba; x=cl, br, i)$.* // XIV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012», 2012, http://lomonosov-msu.ru/uploaded/800/17043_5dc9.doc
3. Акинфиев В.С., Чаркин Д.О. *Поиск соединений со структурами срастания на основе $Bi2VO5,5$* // XI конференция молодых учёных "Актуальные проблемы неорганической химии", 2011, с.2. http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf
4. Чаркин Д.О., Лебедев Д.Н., Акинфиев В.С., Казаков С.М. *Новые слоистые оксогалогениды висмута.* // VI Национальная кристаллохимическая конференция, Суздаль, 1 – 4 июня 2011 г. Сборник тезисов, с. 145-146.

Получение базальтовых непрерывных волокон с повышенной щелочестойкостью и изучение их физико-химических свойств

Алешин Г.Ю.

Руководитель: к.х.н., с.н.с. Гутников С.И.

В настоящее время в промышленности широко применяются композиционные и конструкционные материалы на основе непрерывного стеклянного волокна. Для армирования бетонов на данный момент применяются волокна из AR-стекла в связи с их высокой щелочестойкостью и хорошими механическими свойствами. Базальтовые волокна по своим механическим характеристикам не уступают волокнам из AR-стекла, однако их применение ограничено в связи с низкой устойчивостью к щелочной среде твердеющего цемента. Высокая устойчивость AR-стекла к агрессивным химическим средам объясняется наличием в его составе большого количества оксида циркония (16% масс). Для базальтовых волокон влияние отдельных компонентов на их свойства в литературе изучено недостаточно, данные о влиянии циркония отсутствуют.

Целью данной работы является получение базальтовых волокон с различным содержанием силиката циркония и определение их механических и химических свойств. В рамках работы были поставлены следующие задачи: разработка метода получения базальтовых волокон с добавками силиката циркония, определение потери массы и прочности волокон после выщелачивания, определение прочности на разрыв и модуля упругости.

Объекты исследования были получены в двухстадийном процессе: на первой стадии базальтовая порода в смеси с различным количеством $ZrSiO_4$ плавилась в платиновом тигле в течение 2 суток при $1600^\circ C$. После плавления расплавленное стекло закаливалось о воду. Вторая стадия процесса заключалась в плавлении полученного стекла и вытягивании из расплава тонкого волокна через фильеру в дне тигля. Полученные волокна были охарактеризованы методами РЭМ и РСМА. Измерения механических свойств производились на моноволокне диаметром 9-13 мкм и длиной 10 мм. Для определения щелочестойкости навеска волокна выдерживали в смеси равных количеств 1М NaOH и 0.5 М Na_2CO_3 при $100^\circ C$ 3 ч; после обработки, промывания и высушивания измеряли потерю массы образцов.

Анализ серии образцов с количеством введенного $ZrSiO_4$ 2–16 масс. % с помощью рентгеноспектрального анализа показал, что предел растворимости силиката циркония в базальтовом стекле составляет 10 масс. %. При помощи РЭМ изучена морфология поверхности образцов и было показано, что она не содержит дефектов, в том числе не образуются кристаллиты компонентов волокна. Также с помощью РСМА показана равномерность распределения атомов циркония по поверхности образца. На основании полученных данных сделан вывод о полном растворении силиката циркония в стекле. Благодаря низкой дефектности поверхности, при повышении содержания $ZrSiO_4$ прочность волокна изменяется незначительно (2,05 ГПа для 10 масс.% $ZrSiO_4$ по сравнению с 1,8 ГПа для 0 масс % $ZrSiO_4$). Анализ результатов химической обработки

модифицированных базальтовых волокон показал, что при увеличении содержания силиката циркония в стекле щелочестойкость волокна увеличивается более чем в 2,5 раза (потеря массы при выщелачивании в смеси 1М раствора NaOH и 0.5 М раствора Na₂CO₃ составила 0,028 мг/см² для 10 масс.% ZrSiO₄ по сравнению с 0,085 мг/см² для 0 масс.% ZrSiO₄).

Представленные выше химические и механические свойства полученных базальтовых волокон свидетельствуют о перспективности введения в качестве модификатора силиката циркония в состав базальтовых волокон.

Публикации студента

1. Aleshin G. Yu., Semenenko D.A., Belova A.I., Zakharchenko T.K., Itkis D.M., Goodilin E.A., Tretyakov Yu.D. *Protected anodes for lithium-air batteries* // **Solid State Ionics**, 2011, 184, p. 62–64. DOI: 10.1016/j.ssi.2010.09.018
2. Алешин Г.Ю., Чепига А.А., Королёв В.В. *Химия в Летней олимпиадной школе СУНЦ МГУ. Решения и новая задача* // **Потенциал**, 2011, №9, с.63. <http://potential.org.ru>
3. Алешин Г.Ю., Чепига А.А., Королёв В.В. *Химия в Летней олимпиадной школе СУНЦ МГУ* // **Потенциал**, 2011, №7, с.56. <http://potential.org.ru>
4. Алешин Г.Ю. *Получение базальтовых непрерывных волокон с повышенной щелочестойкостью и изучение их физико-химических свойств* // **Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012»**, 2012, с.3. <http://lomonosov-msu.ru/rus/event/800/>
5. Алешин Г.Ю. *Защищенные аноды для литий-воздушных источников тока* // **X Конференция молодых ученых Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы и здоровье человека**, 2010, с. 3. http://window.edu.ru/resource/986/73986/files/Web_editionn_X_Zvenigorod.pdf
6. Aleshin G.Yu., Semenenko D.A., Goodilin E.A., Chepiga A.A. *Protected anodes for lithium batteries* // **E-MRS Spring Meeting, Symposium O**, 2010, p. 18. http://www.emrs-strasbourg.com/files/USB%2010/symposium_o.pdf
7. Семененко Д.А., Иткис Д.М., Алешин Г.Ю. *Новые материалы для положительных электродов литий-воздушных элементов питания* // **Международная конференция Rusnanotech**, 2009.
8. Алешин Г.Ю. *Новый одностадийный метод синтеза гидрозолей серебра для функциональной микропечати проводящих дорожек* // **XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов»**, 2009, с. 3. http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2009/26.pdf

Гидриды и генерируемые *in situ* анионы фторсодержащих фуллеренов для направленного синтеза органических фуллеренов, перспективных для фотовольтаических приложений

Броцман В.А.

Руководители: д.х.н., с.н.с. Горюнков А.А., м.н.с. Иоутси В.А.

С момента открытия фуллеренов было предложено множество путей их практического применения. Наиболее выдающиеся результаты фуллерены и их производные демонстрируют в медицине и органической электронике. В настоящее время особое внимание уделяется производным фуллеренов, перспективным для создания устройств преобразования солнечной энергии в электрическую.

Недавно синтезированный новый класс дифторгомофуллеренов, уникальных по своей структуре, расширили семейство фторсодержащих производных фуллеренов. Благодаря сохранению сферической 60 электронной π-системы фуллерена, структурной

нежесткости и высоким электрон-акцепторным свойствам данные соединения рассматриваются как перспективные строительные блоки для органических электронных устройств, что требует развития методов их функционализации. Несмотря на то, что существует множество методов функционализации фуллеренов (радикальное и нуклеофильное присоединение, циклоприсоединение), они малоэффективны для региоселективной функционализации дифторметиленгомофуллеренов и приводят к образованию сложных смесей изомерных продуктов. В связи с этим, целью данной работы является разработка методики селективной функционализации фторсодержащих производных фуллеренов и оценка их прикладного потенциала в органической фотовольтаике. В рамках поставленной цели были решены задачи разработки метода региоселективного синтеза алкил-производных $C_{60}(CF_2)$, определения их строения, и опробирования полученных соединений в качестве электронакцепторного компонента с *n*-типом проводимости в фотовольтаических устройствах с объемным гетеропереходом.

Предложенный нами метод функционализации, заключающийся в использовании анионов фторсодержащих фуллеренов генерируемых *in situ* из соответствующих гидридов, был применен к одному из представителей класса фторсодержащих фуллеренов – гомофуллерену $C_{60}(CF_2)$. Индивидуальные соединения, доминирующие в смеси, были выделены при помощи ВЭЖХ и охарактеризованы методами масс-спектрометрии МАЛДИ, спектроскопии поглощения в УФ и видимом диапазоне и спектроскопии ЯМР на ядрах 1H , ^{19}F и ^{13}C . Для двух соединений $C_{60}(CF_2)(C_3H_5)_2$ и $C_{60}(CF_2)(CH_2C_6F_5)_2$ строение было доказано методом рентгеноструктурного анализа.

В рамках данной работы, впервые были получены моно-, ди- и гетеродиалкил производные $C_{60}(CF_2)$. Все полученные соединения являются продуктами присоединения алкильных групп по атомам углерода, лежащим во главе CF_2 -моста. Показано, что реакции получения диалкил-производных $C_{60}(CF_2)$ протекают селективно с образованием преимущественно одного продукта. Региоселективность данного подхода, согласно квантово-химическим расчётам на уровне теории функционала плотности, объясняется преимущественной локализацией отрицательного заряда в дианионе $C_{60}(CF_2)^{2-}$ на атомах углерода, несущих дифторметиленовую группу.

Таким образом, в результате данной работы разработана методика региоселективной функционализации гомофуллерена $C_{60}(CF_2)$, доказано строение синтезированных алкил-производных, получена информация о структуре $C_{60}(CF_2)(C_3H_5)_2$ и $C_{60}(CF_2)(CH_2C_6F_5)_2$, а также, на примере $C_{60}(CF_2)Bn_2$, показано, что полученные соединения проявляют фотовольтаическую активность.

Публикации студента:

1. Kozlov A., Kornienko J., Brotsman V., Khavrel P., Avdoshenko S., Ioffe I., Goryunkov A., Vorobiev A. *Unprecedented ring expansion of C_{60} : difluoromethylene[60]fullerenes and their hydrides* // **Advance Carbon NanoStructures Conference**, 2009, с.137
http://www.ioffe.ru/IWFAC/2009/abstr/iwfac09_P05p133_160.pdf
2. Brotsman V.A., Ioutsi V.A., Bogdanov V.P., Rybalchenko A.V., Ovchinnikova N.S., Goryunkov A.A., Sidorov L.N. *Functionalization of fluorine-containing fullerene derivatives*// **Advance Carbon NanoStructures Conference**, 2011, с.249
http://www.ioffe.ru/acns/2011/abstr/acn11_p249.pdf
3. Броцман В.А., Изделиева И.А. *Региоселективная функционализация дифторгомофуллерена для применения в органической фотовольтаике*// **XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012»**, 2012.

Композиты на основе манганита с эффектом памяти магнетосопротивления

Елисеев А.А.

Руководитель: к.х.н., докторант Васильев А.В.

В последнее время значительный интерес проявляется к материалам пригодным для создания элементов магнеторезистивной оперативной памяти (MRAM). Для применения в этой области материал должен обладать гистерезисом магнетосопротивления при предполагаемом диапазоне температур использования. Данный эффект характерен для композитов, содержащих одновременно магнеторезистивную (обеспечивает изменение сопротивления при приложении к образцу магнитного поля) и другую ферромагнитную (создает магнитное поле внутри материала в отсутствие внешнего) фазы.

Целью работы: получить композит магнеторезист-ферромагнетик-связующее с максимальным значением эффекта памяти магнетосопротивления методом горячего прессования, определить взаимосвязи состав-микроструктура-магнеторезистивные свойства.

В настоящей работе в качестве магнеторезистивной фазы был выбран манганит лантана-стронция. В качестве второй ферромагнитной фазы были выбраны гексаферрит стронция и металлическое железо. В качестве связующих использовали сахарозу или ПММА. Для синтеза нанокристаллических порошков манганита лантана-стронция и гексаферрита стронция был выбран золь-гель метод с последующей термообработкой. Данная методика позволяет получать порошки необходимого состава с контролируемым размером частиц. Для получения композитов LSMO-ферромагнетик-связующее полученные порошки смешивались в требуемых соотношениях с самим связующим (ПММА) или его раствором (сахароза), после чего высушивались. Полученная смесь механически перемешивалась и подвергалась горячему прессованию при 180°C.

С использованием стандартного четырехконтактного метода была измерена зависимость сопротивления образца от приложенного магнитного поля при комнатной температуре. Было отмечено заметное изменение величины сопротивления уже при малых величинах магнитного поля, что объясняется несобственными эффектами (межзеренное) магнетосопротивления у манганита. В полученных образцах наблюдается гистерезис в полевой зависимости магнетосопротивления при комнатной температуре величина которого составляет 0,2 % в полях до 400 Э при комнатной температуре, что позволяет использовать подобные материалы в качестве функционального элемента MRAM. Стоит заметить, что гистерезис наблюдается в магнитных полях до 8000 Э. Такое свойство композита можно использовать в датчиках памяти воздействия сильными магнитными полями.

Таким образом, в ходе данной работы были получены композиты на основе манганита, обладающие эффектом памяти магнетосопротивления и установлены зависимости состав-микроструктура-магнеторезистивные свойства композита. В частности, в системе манганит – железо – сахароза, в образце с соотношением компонентов 40%, 53% и 7% соответственно были достигнуты величины эффекта 0,2% при комнатной температуре и 2,70% при температуре жидкого азота. Так же в ходе работы установлено, что тип связующего не оказывает серьезного влияния на магнеторезистивные свойства композита.

Публикации студента:

1. Васильев А.В., Елисеев А.А., Казин П.Е., Третьяков Ю.Д. *Синтез и свойства магнеторезистивных стеклокерамических композитов на основе (La,Sr)MnO₃ в*

- боратсодержащей матрице*// **Неорганические материалы**, 2011, 47, №6, с. 748-752.
<http://www.maikonline.com/maik/showArticle.do?aid=VAGOXXRTSS>
2. Елисеев А.А., Васильев А.В. *Композиты на основе манганитов с эффектом памяти электросопротивления* // **X школа молодых учёных "Актуальные проблемы современной неорганической химии и материаловедения"**, 2010, с.24.
http://www.fnm.msu.ru/documents/7/Web_editionn_X_Zvenigorod.pdf
 3. Елисеев А.А., Васильев А.В. *Композиты на основе манганитов с эффектом памяти магнетосопротивления* // **XI школа молодых учёных "Актуальные проблемы современной неорганической химии и материаловедения"**, 2011, с.33.
http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf
 4. Елисеев А.А., Васильев А.В. *Синтез и свойства магнеторезистивных стекло-керамических композитов содержащих манганит лантана-стронция* // **XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2009»**, 2009, с.34.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2009/26.pdf
 5. Елисеев А.А. *Изучение вкладов эффектов магнетосопротивления в стеклокерамике на основе манганита лантана-стронция* // **XVII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010»**, 2010, с.50.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2010/26.doc
 6. Елисеев А.А., Васильев А.В. *Композиты на основе манганита с эффектом памяти электросопротивления* // **XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011»**, 2011, с.46.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/243/243.pdf
 7. Елисеев А.А., Васильев А.В. *Композиты на основе манганитов с эффектом памяти магнетосопротивления*// **XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012»**, 2012, с.45.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2012/1931/Nanomaterials_all.pdf
 8. Елисеев Андрей А., Напольский К.С., Саполетова Н.А., Елисеев Артем А. *Малоугловое рассеяние рентгеновского излучения на структурах с субмикронной периодичностью*// **Всероссийская молодежная конференция «опалоподобные структуры 2012»**, 2012, с.57. <http://lms.pnpi.spb.ru/media/opal2012/Sbornik.pdf>

Гомоэпитаксиальные наноструктуры оксида цинка

Плахова Т.В.

Руководитель: к.х.н., доц., в.н.с. Баранов А.Н.

Будучи прозрачным оксидным материалом и обладая уникальными физическими свойствами: широкая запрещенная зона (3.3 эВ), высокая энергия связи экситона (60 мэВ) - оксид цинка имеет большое технологическое значение и может быть использован в коротковолновых устройствах, таких как ультрафиолетовые светодиоды (УФ) и лазерные диоды.

В условиях интенсивного развития нанотехнологий особый интерес вызывают квазиодномерные наноструктуры ZnO: нанотрубки, тетераподы, наноленты и т.д. В данной работе, объектом для изучения были выбраны наностержни оксида цинка, выращенные на подложке в виде массива. Такой выбор обосновывается рядом особенностей данной морфологии. За счет предварительного нанесения затравок на субстрат, рост наностержней может проходить на любой поверхности. Методики синтеза наностержней не требуют сложного оборудования и высоких температур. В зависимости от выбранной методики можно получить материал с различными люминесцентными и транспортными свойствами. Основной идеей работы является комбинирование методик

синтеза (рост одного массива на поверхности другого) для получения новых полупроводниковых наноструктур.

Цель работы: синтез и исследование морфологии и физических свойств гомоэпитаксиальных наноструктур оксида цинка. В данной работе исследованы свойства наноструктур, полученных комбинированным способом. В первом случае выращивали наностержни оксида цинка из газовой фазы, на массиве наностержней, синтезированных из раствора (ГЭС_1). Во втором случае наоборот, проводили рост наностержней из раствора на массиве наностержней, выращенных из газовой фазы (ГЭС_2). Кроме этого, для сравнительного анализа, наностержни из раствора и из газовой фазы, были выращены на поверхности монокристаллических подложек ZnO в ориентации 0001 и 10-10 (ООО «Минерал», г. Александров).

В работе были использованы две самые распространенные в лабораторных условиях методики роста: химическое осаждение из раствора и химическое осаждение из газовой фазы. Для роста наностержней из раствора подложку помещали в герметичный сосуд с водным раствором этилендиамина и ацетата цинка при температуре 110°C. Для роста стержней из газовой фазы использовали 2-х зонную трубчатую печь. Синтез проводили в потоке Ar/O₂, в качестве прекурсора использовали порошок металлического цинка. Полученные наноструктуры исследовали с помощью растровой электронной микроскопии (РЭМ), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), рентгенофазового анализа (РФА), катодolumинесценции, проведены вольтамперные измерения.

При осаждении ZnO из газовой фазы на наностержни, полученные из раствора (ГЭС_1), произошло уплотнение массива и увеличение его по высоте, т.е. в основном рост продолжился вдоль направления *c*. Аналогичные изменения наблюдали в случае структуры ГЭС_2. В ходе синтеза наностержней из раствора на поверхности монокристалла в ориентации 0001, стержни выросли в виде плотного массива, без зазоров между отдельными нанокристаллами. При росте из газовой фазы на такой же подложке наблюдали более сложную морфологию объектов: пирамидальное основание с наностержнем, растущим из его вершины. На подложке в ориентации 10-10 происходит изменение направления роста наностержней с вертикального на горизонтальное. Таким образом, в работе показана возможность эпитаксиального роста наностержней оксида цинка на монокристаллических подложках и наностержнях с другой химической предысторией

Публикации студентки:

1. Plakhova T.V., Shestakov M.V., Baranov A.N. *Effect of textured seeds on the morphology and optical properties of solution- and vapor-grown ZnO nanorod arrays*// **Inorganic materials**, 2012, 48, №5, с 469-475, DOI: 10.1134/S0020168512050135.
2. Плахова Т.В. *Синтез наностержней оксида цинка из ориентированных затравок*// **XVII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2010»**, 2010, с.125. http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2010/26.doc
3. Плахова Т.В. *Получение оксида цинка на кремниевых кантилеверах*// **X конференция молодых учёных «Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы и здоровье человека»**, 2010, с. 46. http://www.fnm.msu.ru/documents/7/Web_editionn_X_Zvenigorod.pdf
4. Плахова Т.В. *Рост наностержней ZnO на подложках по шаблону*// **XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2011»**, 2011, с.90. http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/243/243.pdf
5. Плахова Т.В. *Рост наностержней ZnO из зародышей, нанесённых локально на поверхность подложки или иглу кантилевера*// **XXI Менделеевская конференция молодых учёных**, 2011, с.35. http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf

6. Плахова Т.В., Шестаков М.В., Баранов А.Н. *Влияние текстурированных затравок на морфологию и оптические свойства массивов наностержней оксида цинка, синтезированных из раствора и газовой фазы*// **XI конференции молодых ученых "Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы, их исследование и модификация при помощи синхротронного излучения"**, 2011, с.61.
http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf
7. Плахова Т.В. *Гомоэпитаксиальные наноструктуры оксида цинка*// **XIV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2012»**, 2012, с.95.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2012/1931/Nanomaterials_all.pdf

Синтез и свойства мезоионных имидазопиримидинов

Черник А.А.

Руководитель: д.х.н., проф. Бабаев Е.В.

В последние десятилетия в качестве сред для проведения химических реакций нашли применение различные новые классы соединений – т.н. «неотерические» жидкости, к которым относятся, например, перфторированные соединения, ионные жидкости и сверхкритические флюиды. Совсем недавно был обнаружен новый и необычный подкласс неотерических жидкостей с аномально высоким значением дипольного момента – так называемые мезоионные жидкости (МЖ). В молекулах МЖ положительный и отрицательный заряды находятся в пределах одной сопряженной π -системы, но не способны к взаимному погашению. Мезоионные жидкости на основе оксадиазолов (сидноны) и триазолов имеют высокий дипольный момент (порядка 10 Д), однако термически и гидролитически нестабильны. В нашей лаборатории было установлено, что значительно более стабильны системы на основе конденсированных азолопиримидинов, сохраняющие высокий дипольный момент (порядка 7 Д) и в ряде случаев (в зависимости от длины углеводородного остатка) жидкие при комнатной температуре. Недостатком этого подкласса, однако, является сложность варьирования алкильной группы и общая многостадийность синтеза.

Если аналогичную мезоионную молекулу получить комбинацией пиримидинового и имидазольного фрагментов по C-N связи, то синтез может быть короче, а варьировать природу алкильной группы было бы легче. В этой связи, целью нашей работы была разработка способа синтеза мезоионных имидазопиримидинов из доступных реагентов.

В качестве исходного соединения для синтеза имидазопиримидинов был выбран 2-аминопиримидин (1). После его N-алкилирования (по кольцевому гетероатому) полученную соль (2) путём перегруппировки Димрота превратили в 2-N-метиламинопиримидин (3). Нами изучена реакция этого продукта с хлор- и бромацетонитрилом, а также этил бромацетатом с целью последующего ацилирования продуктов реакций и их превращения в ранее неизвестные мезоионные системы.

В реакции (3) с BrCH_2CN наблюдалось замыкание имидазольного цикла и образование соли имидазо[1,2-а]пиримидиния (4). При попытке ацилирования реакция протекала по аминогруппе с образованием соли (5), однако образования мезоионной системы зарегистрировано не было. Это, по-видимому, связано с влиянием пиридинового фрагмента. В ходе работы мы выделили и идентифицировали соединения 1-5. Для идентификации веществ был использован метод ЯМР ^1H , а структура соединения 4 была доказана методом рентгеноструктурного анализа.

Таким образом, нам удалось получить ранее неизвестный класс бициклических аминокетероциклов – потенциальных прекурсоров мезоионных соединений. Дальнейшая работа может заключаться в подборе разных типов ацилирующих агентов для перевода полученных солей ряда имидазопиримидинов в мезоионную форму.

Публикации студента:

1. Черник А.А., Бабаев Е.В. *Синтез и свойства мезоионных имидазопиримидинов*// XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012», 2012, с.400

19 ИЮНЯ 2011 г.

Реакции натрий-кальциевого обмена в гидроалюмосиликатах

Кулагин А.А.

Руководители: к.х.н., доц. Успенская И.А.; м.н.с. Коваленко Н.А.

Одним из основных способов получения глинозема при производстве алюминия является процесс Байера. В результате его образуются высокоосновные токсичные отходы, называемые красным шламом. Проблема переработки красного шлама относится к общемировым: количество складированных отходов в 2010 г. достигло 2500 Мт, что представляет серьезную экологическую опасность и требует крупных финансовых вложений для обеспечения безопасности окружающей природы. В этой связи проблема переработки и утилизации отходов процесса Байера является актуальной. Предполагается, что основными потребителями красного шлама могут быть строительная индустрия и черная металлургия. Последнее направление представляет особый интерес для России, так как отечественные бокситы богаты фазами, содержащими железо, которое практически полностью переходит в шлам. Однако металлурги предъявляют очень жесткие требования касательно химического состава смесей, которые можно использовать при производстве окатышей (менее 0,5 вес.% Na_2O). Поэтому одной из первоочередных задач является снижение содержания натрия в отходах алюминиевого производства.

Состав шламов сильно различается в зависимости от месторождения вскрываемых бокситов, однако, как показывает анализ литературы, основное количество натрия в шламах оказывается связанным в гидроалюмосиликаты, среди которых наиболее распространены содалитоподобные и канкринитоподобные фазы.

Целью данной работы является изучение возможности замещение натрия на кальций в канкринитах при термической обработке в присутствии кальцийсодержащих веществ для получения пригодных для водного выщелачивания натрийсодержащих фаз. Объектами исследования являлись природный канкринит состава $\text{Na}_{6,93}\text{Ca}_{0,545}\text{K}_{0,01}[\text{Si}_{6,47}\text{Al}_{5,48}\text{Fe}_{0,05}](\text{CO}_3)_{1,25} \cdot 2,3\text{H}_2\text{O}$ и канкриниты, присутствующие в красном шламе Уральского алюминиевого завода (УрАЗ).

Работа состояла из двух частей: экспериментальной и расчетной. Для характеристики исходных образцов и смесей, полученных в результате их термической обработки, использованы методы качественного и количественного РФА и РФЛА, а также РСМА, ТГА, ДСК, комплексонометрического титрования и потенциометрии. Показано, что основными составляющими красного шлама УрАЗа являются гематит Fe_2O_3 (свыше 50 вес.%), андрадит состава $\text{Ca}_3(\text{Fe}_{0,87}\text{Al}_{0,13})_2(\text{SiO}_4)_{1,65}(\text{OH})_{5,4}$ (около 17 вес.%), канкринит состава $\text{Na}_{6,02}\text{Ca}_{1,52}[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}](\text{CO}_3)_{1,48}$ (около 11 вес. %). Проведены параллельные отжиги природного канкринита и красного шлама при температурах 200 °С, 500 °С, 700 °С и 900 °С на воздухе в отсутствие каких-либо добавок и при введении в систему CaCO_3 , $\text{Ca}(\text{OH})_2$, С (активированный уголь). Охарактеризован фазовый и химический состав всех изученных образцов, проведено их сравнение.

Главной задачей расчетной части работы было определение основных процессов, происходящих при термической обработке канкринитов в присутствии кальцийсодержащих веществ и других составляющих красного шлама. Создана локальная база данных для термодинамических расчетов, включающая стандартные энтальпии

образования, энтропии и температурные зависимости теплоемкости в широком интервале температур (298-1700 К) около 250 веществ, образованных оксидами натрия, кальция, алюминия, кремния, железа, титана, магния, углерода и воды. Оценены термодинамические свойства не изученных ранее 20-и соединений, в том числе, канкринитов, и рассчитаны температурные зависимости энергий Гиббса реакций с их участием.

Работа выполнена в рамках совместных исследований с компанией РУСАЛ.

Публикации студента:

1. Кулагин А.А., Манкевич А.С. *Синтез и исследование твердых растворов $La_{1-x}K_xMnO_{3+\delta}$* // XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2009», 2009, с.58 http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2009/26.pdf

Оценка термодинамических свойств алюмосиликатов на основании структуры и состава соединений

Макаров П.Ю.

Руководитель: к.х.н., в.н.с. Куценко И.Б.

Важнейшим этапом разработки технологических процессов и оптимизации условий их проведения является термодинамическое моделирование и расчеты химических и фазовых равновесий, для которых необходимо иметь информацию о термодинамических свойствах всех фаз в системе. Так, при моделировании новых технологических схем производства глинозема по методу Байера необходимы термодинамические данные о сотнях гидроалюмосиликатов, многие из которых содержат 10 и более компонентов. Информация по термодинамике многих таких фаз в литературе отсутствует, и в этом случае недостающие данные можно оценить, используя различные корреляционные зависимости термодинамических свойств от химического состава и строения веществ.

Целью данной работы является разработка методов оценки термодинамических свойств алюмосиликатов, исходя из структуры и состава соединений, для расчета равновесий в красных шламах. Задачей данной работы является расчет неизвестных термодинамических свойств ряда канкринитов и содалитов в широком интервале температур и оценка погрешности такого расчета.

В работе проанализированы известные методы оценки термодинамических свойств алюмосиликатов. Показано, что наиболее перспективными для термодинамического моделирования являются инкрементные схемы (методы групповых вкладов), позволяющие учитывать структурные особенности и состав соединений. Освоены и применены для оценки свойств ряда алюмосиликатов методы Бермана и Брауна, Холланда, Робинсона и Хааса, ван Хинсберга и др. Сделан вывод, что ни один из известных методов не позволяет в достаточной степени надежно оценивать термодинамические свойства в широком интервале температур. Одной из главных причин неудач является неадекватное описание температурной зависимости теплоемкости и энтропии твердых фаз в областях низких и высоких температур.

В настоящей работе для аппроксимации зависимостей теплоемкости (C_p) и энтропии (S) использовали набор функций Эйнштейна (C_{En} и S_{En}), позволяющих физически корректно описывать указанные свойства во всем интервале температур:

$$C_p(T) = \sum_i \alpha_i C_{En}(\theta_i/T), \quad S(T) = \sum_i \alpha_i S_{En}(\theta_i/T)$$

где $C_{En}(x) = 3Rx^2 \exp(x) / [\exp(x) - 1]^2$, $S_{En}(x) = 3R[x / (\exp(x) - 1) - \ln(1 - \exp(-x))]$, $x = \theta/T$, а α_i и θ_i ($i=1,2,\dots$) – параметры модели. Такой подход позволяет описывать зависимости $C_p(T)$ и $S(T)$ единым набором параметров α_i и θ_i .

С учетом такого подхода в лаборатории химической термодинамики разрабатывают новую инкрементную схему расчета теплоемкостей, энтропий, энтальпий

образования и мольных объемов алюмосиликатов. В рамках данной работы существенно расширена база данных для расчета инкрементов за счет введения в нее карбонат-сульфат- и хлорид-содержащих веществ. В настоящее время база содержит данные о 165 фазах.

Корректность проводимых по новой схеме оценок показана для ряда алюмосиликатов, в том числе для $\text{NaAlO}_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$, теплоемкость которого впервые исследована методом ДСК в лаборатории химической термодинамики. Впервые оценены свойства соединений ряда канкринитов и других карбонат-содержащих фаз в широком интервале температур.

Сделан вывод об эффективности разрабатываемой инкрементной схемы для описания внутренне согласованного набора термодинамических функций в широком температурном интервале, что позволяет рекомендовать ее для оценки термодинамических свойств, необходимых для расчета фазовых равновесий в гидроалюмосиликатных системах.

Исследование реакции обратимого гидрирования MgB_2 в условиях высокого давлений

Полковников М.В.

Руководитель: к.х.н., в.н.с. Митрохин С.В.

Водород является энергоемким и экологически чистым энергоносителем, что делает его перспективным топливом для энергетики будущего. Однако использование водорода в качестве топлива сопряжено с рядом технических и экономических трудностей, связанных, в частности, с его запасанием, хранением и транспортировкой. Исключить проблемы хранения и транспортировки водорода позволяет его генерирование непосредственно на месте использования, что в определенных случаях не только целесообразно, но и удобно. Для этого используют, например, портативные генераторы водорода. Наиболее подходящими материалами для создания генераторов водорода являются соединения, способные к выделению значительного количества. Одним из таких соединений является боргидрид магния, поскольку может запастись до 14,8 масс. %. В наши дни многие научные группы всего мира исследуют $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$, однако, проблемы обратимости синтеза, а также определения оптимальных условий образования до сих пор не решены.

В связи с этим, боргидрид магния был выбран как объект исследования в данной работе. Основная цель заключалась в изучении возможности синтеза боргидрида магния с применением катализаторов, не используемых ранее.

Для этого были проведены несколько серий экспериментов с различными параметрами температуры, давления, времени выдерживания и состава катализатора. В качестве прекурсора был использован диборид магния, а веществ, катализирующих реакцию – LaNi_5 и TiCr_2 . Смесь, состоящая из MgB_2 и катализатора, была предварительно измельчена на шаровой мельнице, а затем помещалась в рабочий автоклав. Для гидрирования использовали водород чистотой 99,9999%. Полученные образцы были изучены методом рентгенофазового анализа. Расчет фазового состава проводился в программе Rietan2000. Содержание водорода определялось с помощью метода полного пиролиза в вакууме. В предварительно откачанную систему поступал водород, образующийся при пиролизе продукта. Окончание процесса фиксировалось по прекращению изменения показаний дифференциального манометра, соединенного с системой.

В ходе проведенных экспериментов было установлено, что возможен синтез $\text{Mg}(\text{BH}_4)_2$ из диборида магния, а также определены зависимости процентного образования фазы боргидрида от длительности выдерживания образца в автоклаве под давлением водорода и от массового процента катализатора в исходной смеси. С увеличением

времени синтеза и содержания катализатора растет количество адсорбированного водорода. Максимальное полученное процентное содержание боргидрида магния в конечной смеси составляет 35% (в присутствии 10 масс.% LaNi_5).

Синтез и оптические свойства коллоидных квантовых точек халькогенидов кадмия, легированных медью

Сачкова Т. Ю.

Руководитель: к.х.н., с.н.с. Дорофеев С.Г.

Легирование представляет собой эффективный способ модификации оптических свойств коллоидных квантовых точек (ККТ). Введение медной примеси позволяет управлять такими параметрами, как диапазон люминесценции, положение полосы поглощения, время жизни люминесценции, а также повышает устойчивость образцов к фотодеградации. Однако на момент выполнения работы удобные методы получения нанокристаллов $\text{Cd}(\text{Cu})\text{X}$ ($\text{X}=\text{S}, \text{Te}$), например, олеатный метод, практически отсутствовали.

Целью данной работы явились синтез и изучение оптических свойств ККТ $\text{Cd}(\text{Cu})\text{X}$ ($\text{X}=\text{S}, \text{Te}$), стабилизированных олеиновой кислотой. Перед авторами работы стояли следующие задачи:

- 1) разработка эффективных, экспрессных и легкодоступных методик синтеза ККТ $\text{Cd}(\text{Cu})\text{X}$ ($\text{X} = \text{S}, \text{Te}$) на основе олеатной методики;
- 2) изучение влияния примеси на оптические и морфологические свойства полученных образцов.

В ходе настоящей работы нами исследовано два подхода к получению легированных медью ККТ CdS и CdTe : одностадийный метод высокотемпературного легирования *in situ* и двухстадийный метод легирования путём катионного обмена при комнатной температуре. В качестве источника меди в обоих случаях брали стеарат меди(II).

В результате работы получены образцы ККТ сульфида и теллурида кадмия, легированные медью. Определено содержание меди в легированных образцах и её окружение. Изучено поведение медного прекурсора в условиях легирования *in situ*. Методика легирования методом катионного обмена модифицирована и дополнена.

У сульфидных образцов наблюдалось погасание экситонной люминесценции при увеличении люминесценции в ИК-диапазоне. Морфология легированного *in situ* CdS переходная, от сферической к тетраподной форме. Люминесценция CdTe погасает от введения меди. Нарастивание оболочки широкозонного полупроводника (CdS) приводит к восстановлению люминесценции.

Сравнение с литературными данными о ККТ CdSe позволяет сделать следующие выводы:

- 1) Медь восстанавливается халькогенидами кадмия, соотношение $\text{Cu}^+:\text{Cu}^{2+}$ увеличивается в ряду сера-селен-теллур;
- 2) введение медной примеси приводит к интенсификации длинноволнового поглощения. Таким образом, в результате настоящей работы разработаны эффективные пути получения ККТ $\text{Cd}(\text{Cu})\text{X}$ ($\text{X}=\text{S}, \text{Te}$), охарактеризованы их оптические и морфологические свойства.

Публикации студентки:

1. Дорофеев С.Г., Винокуров А.А., Знаменков К.О., Кузнецова Т.А., Тананаев П.Н., Бубенов С.С., Доценко А.С., Золотых А.Н., Котин П.А., Мордвинова Н.Е., Сачкова Т.Ю. Коллоидные нанокристаллы легированных полупроводников//IV **всероссийская конференция по наноматериалам НАНО-2011**, 2011, с. 28.

- http://nano.imet-db.ru/materials_NANO_2011.pdf
2. Сачкова Т.Ю., Дорофеев С.Г. Сравнительное исследование примесной люминесценции в коллоидных квантовых точках A^2B^6 , легированных медью// **IV всероссийская конференция по наноматериалам НАНО-2011**, 2011, с.124.
http://nano.imet-db.ru/materials_NANO_2011.pdf
 3. Сачкова Т.Ю. Сравнительное исследование примесной люминесценции в коллоидных квантовых точках A^2B^6 , легированных медью//**XVIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011»**,
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/243/243.pdf
 4. Сачкова Т.Ю., Дорофеев С.Г. Сравнительное исследование примесной люминесценции в коллоидных квантовых точках A^2B^6 , легированных медью, //2-ая международная школа «Наноматериалы и нанотехнологии в живых системах. Безопасность и наномедицина», 2011.
 5. Сачкова Т.Ю., Дорофеев С.Г. Сравнительное исследование примесной люминесценции в коллоидных квантовых точках A^2B^6 , легированных медью// **XI конференция молодых ученых «Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы, их исследование и модификация при помощи синхротронного излучения**, 2011, с. 60,
http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf

Исследование взаимодействия с водородом сплавов на основе ванадия

Ченига А.А.

Руководитель: д.х.н., зав. лаб. Вербецкий В.Н.

Одной из наиболее перспективных альтернатив бензину в качестве топлива считается водород. Важнейшие причины для этого – отсутствие вредных продуктов при окислении, высокая удельная температура сгорания. Однако на пути развития водородной энергетики стоят две проблемы, одна из которых – поиск способа хранения больших количеств водорода. Основная часть исследований в этой области посвящена хранению водорода в гидридах металлов. Такой способ позволяет добиться его большего массового содержания при более низком давлении.

В этой связи дигидрид ванадия представляется крайне любопытным для исследования, т.к. способен запастись до 3,8 масс. % водорода. Однако обратимыми из них являются только 1,9%. Поэтому представляется важным изучение закономерностей влияния добавок на сорбционные свойства гидрида. Существует большое количество работ, освещающих эту тему, однако в них не исследовался ряд металлов, в широких интервалах концентраций смешивающихся с ванадием. Таким образом, целью работы было изучение взаимодействия с водородом сплавов, ранее не рассматривавшихся с этой стороны.

Для этого в рамках представленной работы были получены сплавы ванадия с вольфрамом, марганцем, кобальтом и медью. Сплавы получали сплавлением шихты выбранных металлов в электродуговой печи в атмосфере аргона. После этого изучали взаимодействие полученных сплавов с водородом. Для определения фазового состава и структуры исходных сплавов, а также полученных гидридов проводился их рентгенографический анализ.

По результатам измерений установлены структуры исходных образцов и гидридов. Установлено, что введение марганца значительно повышает давление диссоциации β_1 -гидрида. Для нескольких сплавов рассчитаны термодинамические функции реакции их взаимодействия с водородом.

Полученные результаты свидетельствуют, что легирование ванадия вышеуказанными металлами повышает равновесное давление водорода над сплавами и их гидридами.

Публикации студента:

1. Алёшин Г.Ю., Чепига А.А., Королёв В.В. *Химия в Летней олимпиадной школе СУНЦ МГУ. Решения и новая задача* // **Потенциал**, 2011, №9, с.63. <http://potential.org.ru>
2. Алёшин Г.Ю., Чепига А.А., Королёв В.В. *Химия в Летней олимпиадной школе СУНЦ МГУ* // **Потенциал**, 2011, №7, с.56. <http://potential.org.ru>
3. Чепига А.А. *Исследование взаимодействия с водородом двойных сплавов ванадия с кобальтом и медью* // **XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012»**, 2012, с.128. <http://lomonosov-msu.ru/rus/event/800/>
4. Чепига А.А., Уточникова В.В. *Газофазный синтез терефталатов европия и тербия* // **XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011»**, 2011, с.126. http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/243/243.pdf
5. Чепига А.А., Уточникова В.В., Кузьмина Н.П. *Получение терефталатов европия и тербия по реакции обмена лигандами в растворе и в газовой фазе* // **X конференция молодых учёных "актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы и здоровье человека"**, 2010, с.18. http://window.edu.ru/resource/986/73986/files/Web_editionn_X_Zvenigorod.pdf
6. Aleshin G.Yu., Semenenko D.A., Goodilin E.A., Chepiga A.A. *Protected anodes for lithium batteries* // E-MRS Spring Meeting, Symposium O, 2010, p. 18 http://www.emrs-strasbourg.com/files/USB%2010/symposium_o.pdf

20 ИЮНЯ 2012 г.

Синтез монокристаллических сверхпроводящих халькогенидов железа Fe(S, Se, Te) и исследование их свойств

Козлякова Е.С.

Руководитель: к.х.н., с.н.с. Чареев Д.А., к.ф.-м.н., с.н.с. Волкова О.С.

Сверхпроводники на основе железа представляют огромный интерес как с точки зрения нахождения взаимосвязи между сверхпроводимостью и магнетизмом, так и для понимания сверхпроводимости в целом. За четыре года с момента их открытия было опубликовано огромное количество статей по этой тематике, однако ученые так и не приблизились к разгадке причин возникновения высокотемпературной сверхпроводимости. Для построения теоретических моделей необходимы данные, полученные высокоточными методами на высокочистых образцах. Однако зачастую высокоточными физическими методами изучаются образцы низкого качества, что затрудняет интерпретацию полученных результатов.

Таким образом, целью работы стало получение высококачественных монокристаллов сверхпроводников на основе железа и исследование их физических характеристик. В качестве объекта исследования был выбран тетрагональный халькогенид железа Fe(S,Se,Te), как наиболее простой из сверхпроводников данного типа.

Синтез монокристаллических образцов Fe(S,Se,Te) проводили методом кристаллизации в расплавах хлоридов щелочных металлов в условии стационарного градиента температур (50 – 100°C), использовали смеси солей NaCl, KCl, CsCl, RbCl в различном соотношении. Температуры синтеза подбирали в соответствии с фазовыми диаграммами FeTe, FeSe и FeS в зависимости от соотношения S : Se : Te. Состав и

качество полученных монокристаллов оценивали с помощью рентгеноспектрального микроанализа и соответствующих физических измерений. Исследования зависимостей магнитной восприимчивости и сопротивления по четырехконтактной схеме проводили с помощью системы измерения физических свойств (Physical Property Measurement System, Quantum Design).

В системе $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ при $x > 0,1$ наблюдается сверхпроводящий переход с T_C от 8 до 15 К, о чем свидетельствует вид температурных зависимостей сопротивления и магнитной восприимчивости. В настоящей работе для составов $0 < x < 0,5$ были подобраны оптимальные условия синтеза, позволяющие получать монокристаллы высокого качества. Кроме того, были получены тетрагональные кристаллы FeTe_{1-x} с разным отклонением от стехиометрии. Для данных образцов были измерены температурные зависимости сопротивления в различных магнитных полях. Помимо хорошо известных в литературе двойных систем $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$, $\text{Fe}(\text{S},\text{Se})$ и $\text{Fe}(\text{S},\text{Te})$, были впервые получены монокристаллы тройной системы $\text{Fe}(\text{S},\text{Se},\text{Te})$ с содержанием серы до 10% с T_C порядка 10К. В данный момент образцы исследуются в ведущих физических лабораториях мира.

В результате, в рамках данной работы была разработана методика синтеза высококачественных монокристаллов $\text{FeTe}_{1-y-x}\text{Se}_x\text{S}_y$ с долей теллура больше 50% и измерены температурные зависимости магнитной восприимчивости и сопротивления. Образцы с долей теллура меньше 50% также получают с использованием данной методики при подборе соответствующих термодинамических параметров.

Публикации студентки:

1. Fedorchenko A.V., Zhuravleva I.P., Chareev D.A., Volkova O.S., Kozlyakova E.S. *Magnetism and electronic structure of iron-based superconductors* // **III International Conference for Young Scientists “Low temperature physics - 2012”**, 14-18 may 2012, Kharkiv, Ukraine, с.65., <http://www.ilt.kharkov.ua/kmu2012/>
2. Gaydamak T.N., Zhekov K.R., Bilych I.V., Zvyagina G.A., Fil’V.D., Kozlyakova E.S., Chareev D.A. *Elastic properties of FeSe* // **III International Conference for Young Scientists “Low temperature physics - 2012”**, 14-18 may 2012, Kharkiv, Ukraine, с.66., <http://www.ilt.kharkov.ua/kmu2012/>
3. Козлякова Е.С. *Взаимодействие нанотрубок оксида ванадия с растворами солей* // **XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2009»**, 2009, с.49., http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2009/26.pdf
4. Козлякова Е.С. *Синтез и исследование нового композитного мультиферроика на базе семейства двойных искаженных перовскитов*// **XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011»**, 2011, с.62., http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/243/243.pdf
5. Козлякова Е.С. *Синтез монокристаллических сверхпроводящих халькогенидов железа $\text{Fe}(\text{Se},\text{Te})$* // **XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012»**, 2012, http://lomonosov-msu.ru/uploaded/800/9849_33c8.doc

Газовые сенсоры на основе систем трех электродов, объединенных капиллярными волокнами

Комкова М.А.

Руководитель: д.х.н., проф. Карякин А.А.

Неинвазивная клиническая диагностика является одним из приоритетных направлений развития современной медицины. Конденсат выдыхаемого воздуха (КВВ) представляет собой уникальный объект, анализ которого позволяет диагностировать различные легочные заболевания и степень их тяжести. Одним из важнейших биомаркеров, содержащихся в КВВ, является пероксид водорода.

Ввиду сложности отбора и хранения КВВ, перспективной для использования в целях клинической диагностики является разработка сенсорной системы, позволяющей проводить анализ выдыхаемого воздуха, минуя стадию пробоподготовки.

Дипломная работа посвящена разработке прототипа диагностической установки для определения пероксида водорода в выдыхаемом воздухе. Концепция анализа влажного воздуха на границе раздела фаз электролит/электрод/газ, где электролит заключен в матрицу капиллярных волокон, успешно применена к известной системе для анализа жидкой фазы. При этом электроды планарной системы контактировали между собой через капиллярные волокна, содержащие электролит, путем механической фиксации последних. Определение пероксида водорода осуществляли методом амперометрической детекции с помощью электродов, модифицированных берлинской лазурью, поскольку он обладает наилучшими аналитическими характеристиками среди прочих известных сенсоров на H_2O_2 . В целях увеличения стабильности амперометрического отклика системы в ходе эксплуатации использовали электроды, модифицированные чередующимися слоями электрокаталитических покрытий берлинская лазурь/ $\text{K}_x[\text{Ni}_y\text{Fe}^{\text{II}}(\text{CN})_6]$.

В качестве аналитического сигнала системы рассматривали токовый отклик, обусловленный восстановлением пероксида водорода, содержащегося во влажном воздухе. Насыщение воздуха пероксидом водорода проводили барботированием воздушного потока через модельные растворы различных концентраций пероксида водорода. В ходе оптимизации сенсорной системы проварьированы следующие параметры: материал капиллярных волокон, расстояние между электродами, скорость воздушного потока. Определена конфигурация системы, демонстрирующая наилучшие аналитические характеристики.

Таким образом, разработана новая, простая в эксплуатации и высокочувствительная диагностическая система для анализа пероксида водорода непосредственно в выдыхаемом воздухе. В ходе испытаний получена градуировочная зависимость величины амперометрического отклика системы в зависимости от концентрации пероксида в насыщающем растворе. При концентрациях пероксида водорода в насыщающем растворе в диапазоне $1 \cdot 10^{-7} - 1 \cdot 10^{-5}$ М наблюдается линейная зависимость величины отклика сенсорной системы от концентрации. Такой линейный диапазон достаточен для определения концентраций, ожидаемых при анализе выдыхаемого воздуха. Чувствительность анализа, рассчитанная как тангенс угла наклона соответствующей градуировочной зависимости, составила $8 \text{ A}/(\text{M} \cdot \text{cm}^2)$. При использовании электродов, модифицированных берлинской лазурью и гексацианоферратом никеля, система демонстрирует стабильный отклик в течение более 50 последовательных измерений при концентрации пероксида водорода в насыщающем растворе $1 \cdot 10^{-5}$ М.

Публикации студентки:

1. Sitnikova N.A., Borisova A.V., Комкова М.А., Karyakin A.A. *Superstable Advanced Hydrogen Peroxide Transducer Based on Transition Metal Hexacyanoferrates* // **Analytical Chemistry**, 2011, 83 (6), pp 2359–2363.
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ac1033352>
2. Комкова М.А., Борисова А.В. *Высокостабильный сенсор на пероксид водорода на основе берлинской лазури и гексацианоферрата никеля, синтезированных при потенциале разомкнутой цепи* // **Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2011», секция «Химия», подсекция «Аналитическая химия».**
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/structure_32_1344.htm
3. Яшина Е.И., Борисова А.В., Лухнович А.В., Комкова М.А. *Высокоэффективные электрохимические биосенсоры для определения лактата в биологических объектах* //

Семинар «Химический анализ медицинских объектов» 9-й Международной специализированной выставки «Аналитика Экспо», 2011, с.14-17.
<http://www.anchem.ru/calendar/detail.asp?iEve=4456&iType=944>

4. Комкова М.А., Карякин А.А. *Новая аналитическая система для контроля выдыхаемого воздуха*// **Сборник инновационных проектов. Химический факультет**, 2011, с.43.
5. Комкова М.А., Борисова А.В. *Высокостабильный сенсор на пероксид водорода на основе берлинской лазури и гексацианоферрата никеля, синтезированных при потенциале разомкнутой цепи*// **XI конференция молодых ученых «Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы, их исследование и модификация при помощи синхротронного излучения»**, 2011, с.25.
http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf
6. Комкова М.А., Карякин А.А. *Газовые сенсоры на основе систем трех электродов, объединенных капиллярными волокнами*// **Материалы Международного молодежного научного форума «Ломоносов-2012»**, секция «Химия», подсекция «Аналитическая химия».

Диагностика электронного состояния и атомного окружения ионов олова в ортохромитах РЗЭ методом мессбауэровской спектроскопии

Межуев Е.М.

Руководитель: д.х.н., доц. Афанасов М.И.

Изучение особенностей состояния примесных атомов и протекающих с их участием процессов, в том числе приводящих к изменению состава границы раздела фаз, является важным разделом химии твердого тела. Сложность контроля химического состояния и распределения атомов, введенных в изучаемое вещество в низких концентрациях, требует применения специфически чувствительных методов физико-химической диагностики. Одним из таких методов является зондовая мессбауэровская спектроскопия на ядрах ^{119}Sn , с успехом применявшаяся ранее для изучения процессов на границе раздела фаз простых оксидов со структурой типа корунда.

Цель нашей работы заключалась в выявлении последствий воздействия газовой среды на распределение примесных центров олова в ортохромитах РЗЭ – важного класса соединений со структурой типа перовскита, ранее не опробованных в качестве субстрата для катионов ^{119}Sn . В ходе работы предстояло впервые решить следующие задачи:

- разработать методики синтеза образцов $R\text{CrO}_3$ ($R = \text{Ho, Gd, Eu, Sm}$), содержащих в объеме кристаллитов 0,3 мол.% Sn^{4+} , и определить условия, позволяющие локализовать зондовые катионы на поверхности кристаллитов;
- охарактеризовать электронное состояние и локальное окружение зондовых катионов в позициях объемного и поверхностного типа;
- определить механизм компенсации избыточного заряда катионов Sn^{4+} в объеме кристаллитов и факторы, влияющие на спиновую поляризацию ^{119}Sn .

Основные результаты и выводы работы:

- установлено, что отжиг на воздухе карбонатно-гидроксидных прекурсоров, содержащих примесные количества Sn^{4+} и зарядкомпенсирующих ионов Ca^{2+} , приводит к получению однофазных образцов $R\text{CrO}_3$, в которых практически все катионы Sn^{4+} находятся в позициях замещения Cr^{3+} с полным числом соседних катионов хрома (6Cr) и РЗЭ (8R);
- значения магнитного поля насыщения H на ядрах таких катионов $^{119}\text{Sn}^{4+}$ в $R\text{CrO}_3$ линейно увеличиваются при уменьшении квадрата косинуса угла θ обменной связи в цепочке Cr-O-Cr(Sn). Этот результат подтвердил высказанное ранее предположение о том,

что спиновая поляризация Sn^{4+} определяется, главным образом, π -перекрыванием t_{2g} -орбиталей Cr^{3+} с $2p_z$ -орбиталями O^{2-} , возрастающим при уменьшении радиуса R^{3+} ;

- при отсутствии добавок Ca^{2+} примерно треть катионов Sn^{4+} занимает позиции с неполным катионным окружением. Появление вакансий хрома в ближайшем окружении Sn^{4+} приводит к уменьшению поля H , в то время как в присутствии вакансии R оно возрастает за счет уменьшения локального угла обменной связи Cr-O-Sn;
- отжиг прекурсоров в водороде приводит к восстановлению Sn^{4+} и стабилизации образовавшихся катионов Sn^{2+} в координационно-ненасыщенных позициях Cr^{3+} и R^{3+} на поверхности кристаллитов $R\text{CrO}_3$. Поверхностная локализация подтверждена спектрами РФЭС, выявившими 50-кратное обогащение оловом поверхностных слоев толщиной 2-3 нм. Контакт с воздухом при 295 К завершается быстрым окислением Sn^{2+} ;
- спиновая поляризация вторично образовавшихся катионов Sn^{4+} оказалась значительно слабее, чем в объеме кристаллитов, либо вообще отсутствовала. Это означает, что у катионов олова, находящихся в позициях Cr, оборвана часть связей с соседними катионами Cr^{3+} , в то время как оставшиеся катионы Sn^{4+} занимают на поверхности позиции R с магнитно-неактивным окружением - равным числом катионов Cr^{3+} с противоположной ориентацией электронных спинов.

Публикации студента:

1. Афанасов М.И., Межуев Е.М., Фабричный П.Б. *Мессбауэровское исследование сверхтонких взаимодействий зондовых катионов ^{119}Sn в объеме и на поверхности антиферромагнитных частиц GdCrO_3* . // **13-ый Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов»**, сентябрь 2010 г. Ростов-на-Дону – пос. Лоо, Россия. Сборник трудов симпозиума. 2010. Т.2. с. 187-190.
2. Афанасов М.И., Межуев Е.М., Морозова Н.И., Фабричный П.Б. *Сверхтонкие взаимодействия и локальное окружение зондовых катионов ^{119}Sn в объеме и на поверхности хромитов редкоземельных элементов $R\text{CrO}_3$* . // **14-ый Международный симпозиум «Порядок, беспорядок и свойства оксидов»**, сентябрь 2011 г. Ростов-на-Дону – пос. Лоо, Россия. Сборник трудов симпозиума. 2011. Т.2. с. 175-178.
3. Межуев Е.М. *Мессбауэровское исследование электронного состояния и локального окружения примесных ионов ^{119}Sn в антиферромагнитном SmCrO_3* . // **XVII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2010»**, 2010, http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2010/28.html (подсекция Радиохимия и радиоэкология, 28-2, 59_952_18425.pdf).
4. Межуев Е.М. *Мессбауэровское исследование электронного состояния и локального окружения примесных ионов ^{119}Sn в антиферромагнитном HoCrO_3* . // **XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2011»**, 2011, http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/structure_32_1351.htm (19).
5. Межуев Е.М. *Диагностика электронного состояния и атомного окружения ионов олова в ортохромитах РЗЭ методом мессбауэровской спектроскопии*. // **XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2012»**, 2012.
6. Afanasov M.I, Wattiaux A., Mezhuev E.M., Labrugere C., Fabritchnyi P.B., Delmas C. *Etude par spectrometrie Mossbauer de la polarisation de spin et de l'environnement local des cations d'etain introduits comme dopants dans le volume et a la surface des cristallites de GdCrO_3* . // **Comptes Rendus Chimie** (à paraître)

Разделение катионов трехвалентных лантанидов и актининов с использованием замещенных диамидов 2,2'-бипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты для нужд радиохимической технологии и ядерной медицины

Митрофанов А.А.

Руководитель: д.х.н., проф. Калмыков С.Н.

Развитие современных ядерных технологий, как для переработки облученного ядерного топлива, так и для нужд ядерной медицины, требует разработки эффективных методов разделения радионуклидов с использованием селективных радиационно-стойких реагентов.

Целью данной работы является установление закономерностей комплексообразования и разделения Eu(III) и Am(III) методом жидкостной экстракции с использованием класса новых реагентов на основе диамидов бипиридилдикарбоновых кислот. Для решения поставленной цели в работе решались задачи выбора лиганда использованием квантово-химических подходов, экспериментальное определение оптимальных условий извлечения Am(III) и Eu(III) и определение констант устойчивости соответствующих комплексов, а также исследование радиационной стойкости этих соединений.

В данной работе рассматривается использование замещенных диамидов 2,2'-бипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты для разделения Am(III) и Eu(III) методом жидкость-жидкостной экстракции для решения этих задач. Для сравнения при тех же условиях рассмотрена экстракция с использованием диамида 2,9-фенантролиндикарбоновой кислоты. Определение степени извлечения производили с использованием измерения активности ^{152}Eu и ^{243}Am в органической и водной фазах после экстракции.

Исследование разделение Eu/Am с использованием диамидов бипиридилдикарбоновых и фенантролиндикарбоновых кислот, показало преимущество первых. Также было проведено сравнение экстракционной способности диамидов бипиридилдикарбоновых кислот с различными заместителями (на примере фенил-этил- и диоктил- замещенных диамидов) Исследована химическая устойчивость используемого лиганда по отношению к концентрированным кислотам методом спектроскопии ^{13}C -ЯМР. Показано, что воздействие концентрированной азотной кислоты приводит к протонированию лиганда, не ухудшая его экстракционную способность. Исследование радиационной стойкости методом жидкостной хроматографии/масс-спектрометрии показало устойчивость лиганда по отношению к поглощенной дозе ионизирующего излучения до 6,6 кГр. Спектрофотометрическим методом определены константы устойчивости комплексов металл-лиганд и кинетика его образования.

В работе была получена схема разделения Eu и Am с коэффициентом разделения достигающим трех и показана возможность применения данной схемы в условиях промышленной переработки радиоактивных отходов.

Публикации студента:

1. Митрофанов А.А. *Раздельное изучение пространственного распределения различных альфа-излучателей с использованием альфа-трековой радиографии*// XVI Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2009», 2009, с.15.
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2009/28_10.pdf
2. Митрофанов А.А., Власова И.Э., Калмыков С.Н., Алиев Р.А. *Раздельное изучение пространственного распределения различных альфа-излучателей с использованием*

альфа-трековой радиографии// Шестая Российская конференция по радиохимии «Радиохимия-2009», 2009, с.194

<http://www.atomic-energy.ru/events/2009/10/12/999>

3. Митрофанов А.А. *Применение метода альфа-спектрометрии для разделения Ac-225/Ac-227.* // XVII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2010», 2010
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2010/28-2.rar
4. Митрофанов А.А. *Разработка методики селективного выделения Ac*// XVIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2011», 2011
http://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2011/1351/2200_6312.doc
5. Митрофанов А.А. *Разделение трехвалентных актинидов и лантанидов с использованием замещенных диамидов 2,2'-бипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты для нужд радиохимической технологии и ядерной медицины*// XIX Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2012», 2012
<http://lomonosov-msu.ru>
6. Митрофанов А.А. *Разделение трехвалентных актинидов и лантанидов с использованием замещенных диамидов 2,2'-бипиридил-6,6'-дикарбоновой кислоты для нужд радиохимической технологии и ядерной медицины*// VI всероссийская конференция молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Менделеев-2012» 2012, с.84
http://www.mendeleev-spbu.org/Mendeleev2012_fizicheskaya_himiya.pdf
7. Vlasova I.E., Kalmykov S.N., Zakharova E.V., Simakin I.S., Mitrofanov A.A. *ATA-FTA technique for localizing and characterization of U- and Pu- bearing μ -particles*// **Russian-German Symposium on Actinide Nano-Particles**, 2009, p. 63-64.
http://www.helmholtz.de/jobs_talente/postdoktoranden/helmholtz_russia_joint_research_group/

Микросенсоры на основе берлинской лазури для задач in vivo диагностики

Мокрушина А.В.

Руководитель: д.х.н. проф. Карякин А.А.

Главным требованием современной медицины является своевременная, точная и экспрессная диагностика заболеваний. Клинический анализ, исключая длительную пробоподготовку, доставку образца к прибору и частый отбор крови у критических больных возможен только при помощи химических и биологических сенсоров, имплантируемых непосредственно в исследуемые органы и ткани.

Большое внимание уделяется определению пероксида водорода, поскольку он является маркером окислительного стресса, предшествующего многим заболеваниям дыхательной системы и др. Также пероксид водорода является продуктом окисления глюкозы и лактата соответствующими ферментами-оксидазами, что открывает широкие перспективы создания биосенсоров для определения данных метаболитов.

Целью настоящей работы стала разработка высокоэффективных амперометрических микросенсоров на основе берлинской лазури для количественного определения пероксида водорода, глюкозы, лактата in vivo.

Основным недостатком использования единичных микроэлектродов является малая величина регистрируемых ими токов. Изготовление на поверхности микроэлектрода матрицы, имеющей систему пор, позволило увеличить регистрируемый ток и чувствительность за счет увеличения количества наносимого электрокатализатора

восстановления H_2O_2 берлинской лазури (БЛ), сохранив при этом реальные размеры самого датчика.

Путем варьирования параметров синтеза БЛ (концентрация ростового раствора, диапазон потенциалов осаждения) в порах золота было достигнуто максимальное соотношение коэффициентов чувствительности для модифицированного и немодифицированного электродов, при этом коэффициент чувствительности для микроэлектрода с модифицированной поверхностью составил рекордную величину: $8.81 \text{ A}\cdot\text{л}\cdot\text{моль}^{-1}\text{см}^{-2}$.

На основе сенсора на H_2O_2 путем иммобилизации ферментов глюкозооксидазы и лактатоксидазы в матрицы на основе полиэлектролита Нафион и γ -аминопропилсилоксана соответственно получены сенсоры на глюкозу и лактат. За счет создания диффузионных затруднений вследствие увеличения концентрации Нафиона и силоксана диапазон определяемых концентраций датчиков пролонгирован в область физиологических значений: для глюкозы 0.5-20мМ, для лактата 0.5-10мМ.

Для достижения максимальной чувствительности и стабильности варьировали содержание полиэлектролита и силоксана в исходных растворах для создания мембран. Для мембран с глюкозооксидазой оптимальная концентрация Нафиона составила 0.5%, концентрация γ -аминопропилсилоксана в мембранах для сенсоров на лактат – 1%.

Микробиосенсор на глюкозу с фермент-содержащей мембраной оптимизированного состава был испытан *in vivo* в кровотоке самок белых крыс и демонстрирует отклики на инъекции животному данного вещества.

Таким образом, на основе электрокатализатора восстановления пероксида водорода – берлинской лазури, и иммобилизованных ферментов-оксидаз получены датчики на глюкозу и лактат, позволяющие осуществлять мониторинг физиологических концентраций данных метаболитов в кровотоке лабораторных животных.

Публикации студентки:

1. Мокрушина А.В., Карякин А.А. *Высокоэффективные электрохимические микросенсоры на основе берлинской лазури для решения задач *in vivo* диагностики*// **Конференция "Актуальные проблемы неорганической химии: наноматериалы, их исследование и модификация при помощи синхротронного излучения"**, Звенигород, 2011, с.2. http://www.inorg.chem.msu.ru/thesis_2011.pdf
2. Мокрушина А.В. *Высокоэффективный электрохимический микросенсор на основе берлинской лазури для *in vivo* диагностики*// **Работа-победитель конкурса У.М.Н.И.К., секция Химия, 2011 г.**
3. Мокрушина А.В., Карякин А.А. *Высокоэффективные электрохимические сенсоры на основе берлинской лазури для решения задач *in vivo* диагностики*// **Сборник инновационных проектов, химический факультет, Москва, 2011, стр. 8**
4. Мокрушина А.В. *Сенсор на пероксид водорода на основе систем микроэлектродов берлинской лазури*// **XXI Менделеевский конкурс студентов-химиков, 2011**

Для заметок

