



*Российская Академия Наук*

**ОТЧЕТ**  
**о работе Научного совета РАН**  
**по неорганической химии**  
**за 2023 год**

**Москва**

## ОГЛАВЛЕНИЕ

СОСТАВ НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ...	9
ПОЛОЖЕНИЕ О СОВЕТЕ.....	12
РАБОТА НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ В 2023 ГОДУ И ПОЛУЧЕННЫЕ НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ.....	17
I. КООРДИНАЦИОННАЯ ХИМИЯ И ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТОВ.....	18
1. Разработка новых подходов к получению карбоксоновых производных <i>клозо</i> -декаборатного аниона .....	18
2. Новые методы синтеза политопных и полидентатных производных кластерных анионов бора.....	19
3. Синтез, строение и свойства нитрозильного комплекса железа с 2-этил-4- пиридинкарботиоамидом .....	20
4. Удивительный пример сохранения кристаллической структуры 3,5- дитретбутил-2-гидроксиазобензольного лиганда при образовании комплексов Ni(II) и Pd(II).....	22
5. Установление механизмов деградации комплексных галогенидов свинца под действием гамма-лучей и поиск материалов со сверхвысокой радиационной стойкостью к дозам > 10 МГр .....	23
6. Изучение механизма ионных движений, ионной проводимости комплексных фторо-антимонатов(III) щелочных металлов Rb, Cs и аммония.....	24
7. Гетероанионные комплексы $[Ln_2(phen)_2(pfb)_{4-x}(bnz)_{2+x}]$ .....	25
8. Многослойные гетеропланарные ансамбли комплексов платины(II) .....	26
9. Исследование структур сокристаллов плоскоквадратных комплексов платины(II) с халькогенадиазолами.....	27
10. Конструирование объемноцентрированных тетрагональных, орторомбических и кубических кристаллов на основе бора.....	27
11. Твердые растворы лактатов редкоземельных элементов .....	28
12. Полимерно-цепочечные комплексы $Cu(hfac)_2$ с пиридил-замещенными нитроксилами – взаимосвязь между доступным для заместителя объемом и температурой магнитно-структурного перехода.....	29
13. Электрохимическое метилирование малослойного черного фосфора и его функционализация карбеновыми интермедиатами .....	30

14. Разработка подходов к синтезу кристаллических дигидропероксидов триалкил и триарилсурьмы(V).....	31
15. Цвиттер-ионные комплексы меди(I) для дизайна высокоэффективных TADF материалов.....	32
16. Создание эффективных красителей для солнечных элементов.....	33
17. Высокоэффективная циркулярно-поляризованная фото- и рентгенолюминесценция бромидных комплексов марганца(II).....	34
18. Дизайн люминесцирующих координационных соединений лантанидов .....	35
19. Теоретическое и экспериментальное исследование спин-переключаемых биядерных комплексов Fe и Co на основе редокс-активных лигандов .....	36
20. Физико-химические основы эффекта центрального атома в магнитокалорических свойствах молекулярных магнитов на основе комплексов порфиринов.....	37
21. Зарядовые характеристики по Малликену и геометрия структурно сложного титаноцена.....	38
22. Кристаллическая упаковка 1,3-дийодтетрафторбензола .....	39
23. Новый подход к лекарственной терапии онкологических заболеваний, основанный на сильном супрамолекулярном связывании между 3D-молекулами клатрохелатных комплексов с биорелевантными терминальными группами как «гостей» с развернутыми макромолекулами глобулярных белков как «хозяевами» .....	40
24. Разработка комплексных подходов к определению характеристик комплексов переходных 3d-металлов: структуры в растворе и твердом состоянии, термодинамики образования, динамического поведения и биоактивности .....	41
25. Координационные соединения меди(II) с высокой противораковой активностью.....	42
26. Биоразлагаемый комплексообразователь, способный заменить ЭДТА в ряде отраслей народного хозяйства .....	44
II. ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА .....	45
1. Влияние легирующих элементов на изменение структуры магниевых алюминиевых сплавов в процессе рекристаллизации и их механические свойства.....	45
2. Новый слоистый материал с фотоуправляемой структурой .....	46

3. Изучение процесса электрохимической поляризации гибридного свинец содержащего галогенидного перовскита.....	47
4. Разработка подходов объемного легирования для улучшения стабильности светопоглощающих слоев гибридных перовскитов.....	48
5. Определение концентрационной и температурной областей устойчивости соединений переменного состава в системе $\text{Vi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3$ с пирохлороподобной структурой .....	49
6. Низкотемпературные особенности структурно-фазовых свойств наноструктурированных FePt и CoPt в области составов, богатых платиной .....	50
7. Исследование особенностей миграции водорода по металлическим кластерным центрам платины .....	51
8. Исследование низкотемпературного фазообразования в системах из тугоплавких оксидов ( $\text{ZrO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ , $\text{ZrO}_2\text{-Sc}_2\text{O}_3$ ) и фторидов ( $\text{BaF}_2\text{-RF}_3$ ).....	52
9. Новые гибридные 2D полупроводники в системе AIBVI.....	52
10. Синтез полного ряда никель-алюминиевых слоистых двойных гидроксидов со структурой гидроталькита.....	53
11. Исследование диффузии ионов натрия в $\text{NaGaPO}_4\text{F}$ со структурой $\text{KTiOPO}_4$ .....	54
12. Исследование индукции хиральности в атомарно тонких нанопластинках ZnSe и CdSe.....	55
13. Наноструктурированные системы нового поколения с уникальными функциональными свойствами.....	55
14. Синтез и исследование гексагонального h- $\text{WO}_3$ .....	56
16. Особенности процессов фазообразования в высокоглиноземистой области системы $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3$ .....	58
17. Изучение механизма формирования оксидной пленки на поверхности титановых сплавов .....	59
<b>III. НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, ВКЛЮЧАЯ КОМПОЗИЦИОННЫЕ И НАНОМАТЕРИАЛЫ.....</b>	<b>60</b>
1. Разработка методов получения сложных двумерных карбидов $\text{Ti}_x\text{V}_{2-x}\text{C}_2\text{S}_y$ и $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ .....	60
2. Разработка литий-проводящих нанокомпозитных электролитов с введением ионных жидкостей .....	61
3. Стекла и стеклокристаллические образцы системы $\text{BaZrF}_6\text{-NaPO}_3\text{-ErF}_3$ , обладающие люминесцентными свойствами.....	62



4. Синтез кобальт-самариевых оксидных композитов, содержащих от 2 до 23% мас. кобальта .....	63
5. Слоистые оксиды $\text{Na}(\text{Ni},\text{Fe},\text{Mn})\text{O}_2$ – перспективные катодные материалы натрий-ионных аккумуляторов.....	64
6. Новый анодный материал для натрий-ионных аккумуляторов .....	66
7. Разработка методов получения наноструктурированных материалов на основе серебра для использования в области спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния интактных биологических объектов .....	67
8. Подходы к использованию порошковых прекурсоров типа для получения ион – проводящих керамических электролитов .....	68
9. Получение пленочных композитов $\text{Ti}/\text{TiO}_2\text{-WO}_3\text{-Eu}_2(\text{WO}_4)_3$ .....	69
10. Формирование стабильных оксидных пленочных фотокатализаторов на титановом носителе .....	70
11. Разработка синтеза наноструктурированного алюмосиликатного сорбента магнитного типа .....	71
12. Синтез и адсорбционные свойства кристаллического алюмосиликата микромезопористой структуры фожазита .....	72
13. Металл-органический координационный полимер UiO-66 с инкапсулированным спиновым зондом: синтез и исключительная чувствительность к механическому давлению .....	73
14. Перспективные катализаторы на основе платины для реакции окисления монооксида углерода .....	74
15. Новый метод активации нанотрубок $\text{TiO}_2$ для повышения эффективности выделения $\text{H}_2$ в реакции фотоэлектрохимического разложения воды под видимым светом .....	75
16. Новые перспективные материалы для сорбции оксида азота NO из воздуха.....	76
17. Синтез и исследование физико-химических свойств органо-неорганических гибридных молекулярных систем.....	77
18. Синтез и исследование свойств новых многоэлектронных катодных материалов – оксифторидов $\text{Li}_{1+x}(\text{MeMn}^{3+})_{1-x}\text{O}_{2-y}\text{F}_y$ , где $\text{Me} (d^0) = \text{Ti}^{4+}$ и $\text{Nb}^{5+}$ .....	78
19. Электропроводящие серебряные мембраны Януса с настраиваемыми поверхностными свойствами: толщиной, шероховатостью и пористостью	79
20. Синтез катодных материалов на основе обогащенных по никелю литированных оксидов .....	80

21. Разработка способа получения анодного материала для литий-ионных аккумуляторов на основе допированного марганцем и фтором диоксида титана.....	81
22. Разработка люминесцентных неорганических материалов и полимерных композитов на их основе .....	82
23. $\text{NaYGeO}_4:\text{Tm}^{3+}$ люминесцентный материал для фотоники, преобразующий возбуждающее излучение с $E = 1.53$ эВ в излучение с $E = 0.68$ эВ.....	83
24. Развитие перспективных функциональных материалов для оптических применений в ИК диапазоне.....	84
25. Наноразмерные кластеры рения для дизайна фотоэлектродов с настраиваемыми свойствами, подходящими для интегрирования в состав солнечных элементов.....	86
26. Фотонные кристаллы на основе анодного оксида титана .....	87
27. Синтез $\text{MgFeGa}$ - и $\text{ZnFeGa}$ -слоистых гидроксидов и исследование их влияния на огнестойкие и механические свойства композитов на основе полиуретана .....	88
28. Новый подход к полиольному синтезу композитных наночастиц кобальта.....	89
29. Разработка способа темплатного синтеза пористых биомиметических композитов.....	90
30. Жаропрочная керамика на основе $\text{Ti}_{0.85}\text{Zr}_{0.15})_3\text{SiC}_2$ .....	91
31. Хлопковая ткань, модифицированная нанокластерами молибдена, с фотоиндуцируемыми антибактериальными и противовирусными свойствами .....	91
32. Гидрогели диоксида кремния как платформа для создания новых гибридных материалов гиалуроновой кислоты биомедицинского назначения .....	92
<b>IV. МЕТОДЫ АНАЛИЗА НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ .....</b>	<b>94</b>
1. Использование координационного полимера $\text{NiPC-3-Tb}$ для селективного обнаружения ионов $\text{Fe}^{3+}$ , офлоксацина или госсипола в воде или физиологических жидкостях .....	94
2. Методика рентгенофлуоресцентного определения основных элементов в образцах высокоэнтропийной керамики на основе ниобатов редкоземельных элементов вида .....	95

3. Методика атомно-эмиссионного с индуктивно связанной плазмой определения основных элементов в солях редкоземельных элементов и ниобия для получения высокоэнтропийной керамики .....	95
4. Разработка электрохимических сенсоров для идентификации биологически активных соединений в растворах.....	97
5. Расчетный протокол для оценки химических сдвигов ЯМР $^{13}\text{C}$ и $^{31}\text{P}$ атомов, непосредственно связанных с палладием.....	98
6. Оригинальный метод определения времени пролета ионов .....	98
<b>V. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....</b>	<b>100</b>
1. Изучение процесса синтеза оксидов $\text{NiO}$ , $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF) и $(\text{CeO}_2)_{0.8}(\text{Sm}_2\text{O}_3)_{0.2}$ .....	100
2. Химическая технология плакированных металлических и керамических порошков для аддитивных технологий .....	101
3. Комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур .....	101
4. Новый метод формирования наноструктурированных тонких пленок: периодическая модуляция угла напыления.....	102
5. Гидротермально-микроволновой метод синтеза наноразмерного цеолита ZSM-5 в протонной форме .....	103
6. Корреляционные зависимости состава, структуры и свойств гибридных материалов на основе сложных галогенидов меди с катионами метиламмония и формамидиния .....	104
7. Способ формирования «умных систем, обладающих эффектом самозалечивания».....	105
8. Разработка подходов к формированию слоистых композитов $\text{LaMnO}_3 + \text{La}_{7.58}(\text{Si}_{1.048}\text{O}_4)_6\text{O}_2 / \text{TiO}_2 / \text{Ti}$ .....	106
9. Разработка модели распределения сорбционных центров материалов .	107
10. Фотоактивные нанокompозиты $\text{YFeO}_3 / \text{TiO}_2$ , синтезированные методом пенного горения .....	108
11. Влияние механической активации и введения легкоплавких добавок на ионную проводимость твердого электролита $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$ .....	109
12. Создание технологических основ получения кристаллов ниобата лития двойного легирования магнием и бором $\text{LiNbO}_3:\text{Mg},\text{B}$ .....	110
13. Разработка нового инновационно привлекательного плазмохимического подхода для получения ферромагнетиков в растворе.....	112

14. Разработка комплексного подхода к нанесению тонких пленок из растворов координационных соединений .....	113
15. Разработка теоретических моделей темплатного электроосаждения металлов в пористые пленки анодного оксида алюминия .....	113
16. Волоконные световоды из особочистых оксидных и неоксидных стекол с новым уровнем функциональных свойств .....	115
17. Получение гиниита в процессах гидротермального разложения железосодержащих азотно-фосфорнокислых растворов.....	116
18. Машинно-обучаемые нейросетевые потенциалы для металлургических сплавов .....	117
19. Формирование износостойких защитных покрытий на алюминиевых поверхностях изделий специального назначения.....	119
20. Технология переработки бедных тантал-ниобиевых концентратов.....	120
КОНТАКТЫ.....	121
АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ РУКОВОДИТЕЛЕЙ ТЕМАТИК .....	122

## СОСТАВ НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

### Бюро совета

Иванов Владимир Константинович	член-корреспондент РАН, председатель
Шевельков Андрей Владимирович	член-корреспондент РАН, заместитель председателя
Золотов Юрий Александрович	академик РАН
Кожевников Виктор Леонидович	академик РАН
Кузнецов Николай Тимофеевич	академик РАН
Ляхов Николай Захарович	академик РАН
Минкин Владимир Исаакович	академик РАН
Сергиенко Валентин Иванович	академик РАН
Столярова Валентина Леонидовна	академик РАН
Цивадзе Аслан Юсупович	академик РАН
Шевченко Владимир Ярославович	академик РАН
Вашурин Артур Сергеевич	доктор химических наук, ученый секретарь

### Члены совета

Агафонов Александр Викторович	доктор химических наук
Алиханян Андрей Сосович	доктор химических наук
Алымов Михаил Иванович	член-корреспондент РАН
Амиров Рустэм Рафаэльевич	доктор химических наук
Антипов Евгений Викторович	член-корреспондент РАН
Барановская Василиса Борисовна	доктор химических наук
Баранчиков Александр Евгеньевич	кандидат химических наук
Баринов Сергей Миронович	член-корреспондент РАН
Бойцова Татьяна Борисовна	доктор химических наук
Братская Светлана Юрьевна	член-корреспондент РАН
Брылев Константин Александрович	профессор РАН
Бузник Вячеслав Михайлович	академик РАН
Буланов Андрей Дмитриевич	член-корреспондент РАН
Буслаева Татьяна Максимовна	доктор химических наук
Волошин Ян Зигфридович	доктор химических наук
Гавричев Константин Сергеевич	доктор химических наук

Гнеденков Сергей Васильевич	член-корреспондент РАН
Горбунова Юлия Германовна	академик РАН
Грачева Елена Валерьевна	доктор химических наук
Гречников Фёдор Васильевич	академик РАН
Гудилин Евгений Алексеевич	член-корреспондент РАН
Гусаров Виктор Владимирович	член-корреспондент РАН
Дедов Алексей Георгиевич	академик РАН
Еременко Игорь Леонидович	академик РАН
Жижин Константин Юрьевич	член-корреспондент РАН
Захаров Юрий Александрович	член-корреспондент РАН
Иванова Мария Сергеевна	генеральный директор объединения работодателей предприятий и организаций химического комплекса академик РАН
Иевлев Валентин Михайлович	академик РАН
Кискин Михаил Александрович	профессор РАН
Козюхин Сергей Александрович	доктор химических наук
Котов Виталий Юрьевич	доктор химических наук
Калмыков Степан Николаевич	академик РАН
Козлова Таисия Олеговна	кандидат химических наук
Кузнецов Алексей Николаевич	член-корреспондент РАН
Кукушкин Вадим Юрьевич	академик РАН
Лукашин Алексей Викторович	член-корреспондент РАН
Малинина Елена Анатольевна	доктор химических наук
Милаева Елена Рудольфовна	доктор химических наук
Николаев Анатолий Иванович	член-корреспондент РАН
Приходченко Петр Валерьевич	доктор химических наук
Пушкин Денис Валериевич	доктор химических наук
Румянцев Евгений Влдаимирович	доктор химических наук
Санина Наталия Алексеевна	доктор химических наук
Сидоров Алексей Анатольевич	доктор химических наук
Симоненко Елизавета Петровна	доктор химических наук
Солнцев Константин Александрович	академик РАН
Соловьев Сергей Николаевич	доктор химических наук
Туник Сергей Павлович	доктор химических наук
Угрюмов Александр Валерьевич	вице-президент по научно-технической деятельности, ТВЭЛ
Федин Владимир Петрович	член-корреспондент РАН
Федин Матвей Владимирович	доктор физико-математических наук
Федоров Павел Павлович	доктор химических наук

Холькин Анатолий Иванович	академик РАН
Черепанов Владимир Александрович	доктор химических наук
Чурбанов Михаил Федорович	академик РАН
Шаповалов Сергей Сергеевич	кандидат химических наук
Щербаков Игорь Николаевич	доктор химических наук
Ярославцев Андрей Борисович	академик РАН

# ПОЛОЖЕНИЕ

## о Научном совете РАН по неорганической химии

### 1. Общие положения

Научный совет РАН по неорганической химии (далее – Совет) является научно-консультативным, совещательными, координационным и экспертным органом РАН, работающим на общественных началах при Отделении химии и наук о материалах РАН (далее – ОХНМ РАН).

Совет работает в информационном сотрудничестве с органами государственной власти, научными организациями и образовательными организациями высшего образования Российской Федерации независимо от их ведомственной принадлежности, иными заинтересованными организациями.

В своей деятельности Совет руководствуется Конституцией Российской Федерации, законодательством Российской Федерации, уставом РАН, постановлениями общего собрания членов РАН, постановлениями Президиума РАН, распоряжениями Президента РАН и настоящим Положением.

Общее руководство деятельностью Совета осуществляет бюро ОХНМ РАН, которое утверждает Положение о Совете, структуру и состав Совета (по представлению председателя Совета). Председатель Совета рекомендуется из числа членов РАН бюро ОХНМ РАН и утверждается Президиумом РАН на пятилетний срок. Совет создается и может быть реорганизован или ликвидирован постановлением Президиума РАН.

### 2. Состав и структура совета

2.1. Совет формируется в составе председателя, заместителей председателя, ученого секретаря и членов Совета.

2.2. Членами Совета могут быть члены РАН, ведущие ученые и представители научных организаций и образовательных организаций высшего образования, научных центров, научных и научно-технических обществ, институтов развития, органов государственной власти и других организаций, участвующих в научных исследованиях по направлениям деятельности Совета. К деятельности Совета по согласованию могут привлекаться зарубежные ученые.

2.3. В перерывах между заседаниями Совета оперативную работу осуществляет бюро, которое правомочно принимать решения с последующим их утверждением на заседаниях Совета. В состав бюро Совета входят председатель, его заместители, ученый секретарь и члены бюро.



Заседания бюро проводятся по мере необходимости. Решения бюро Совета принимаются простым большинством голосов присутствующих на заседании членов бюро открытым голосованием, и оформляются протоколом заседания за подписью председателя и ученого секретаря Совета.

2.4. В структуре Совета для решения возложенных на него задач организованы региональные отделения, секции и комиссии по основным направлениям неорганической химии.

2.5. Председатель Совета по неорганической химии РАН утверждается постановлением президиума РАН по представлению бюро ОХНМ РАН. В его отсутствие руководство Советом осуществляет один из его заместителей.

2.6. Председатель Совета:

2.6.1. утверждает план работы Совета, повестку заседания и состав лиц, приглашаемых на заседание Совета и бюро;

2.6.2. организует работу Совета и председательствует на заседаниях Совета и бюро;

2.6.3. подписывает протоколы заседаний и другие документы Совета;

2.6.4. обеспечивает коллективное обсуждение вопросов, внесенных на рассмотрение Совета и бюро;

2.6.5. формирует отчет о проделанной работе и наиболее важных результатах, полученных в рамках деятельности Совета;

2.6.6. распределяет обязанности между своими заместителями и членами Совета и бюро;

2.7. Заместитель председателя Совета:

2.7.1. курирует одно или несколько направлений деятельности Совета

2.7.2. участвует в подготовке планов работы Совета и бюро;

2.7.3. участвует в подготовке отчета о проделанной работе и наиболее значимых результатах, полученных в рамках деятельности Совета.

2.8. Ученый секретарь Совета:

2.8.1. организационно обеспечивает работу Совета, готовит рабочие материалы к заседаниям, оформляет протоколы заседаний Совета и бюро;

2.8.2. готовит и согласовывает с председателем проекты документов и других материалов для обсуждения на заседаниях Совета и бюро;

2.8.3. рассылает членам Совета и бюро документы и материалы;

2.8.4. обеспечивает хранение документации Совета;

2.9. Члены Совета:

2.9.1. руководствуются положением о Совете;

2.9.2. регулярно посещают заседания Совета, назначенные его председателем;

2.9.3. обеспечивают связь Совета с представляемыми ими организациями;

- 2.9.4. вносят предложения и замечания к планам работы и по текущей деятельности Совета в целях повышения его эффективности;
- 2.9.5. запрашивают информацию о рассмотрении своих предложений;
- 2.9.6. получают информацию о деятельности Совета;
- 3.9.7. вносят предложения по формированию повестки дня заседаний Совета;
- 2.9.8. участвуют в подготовке материалов по рассматриваемым вопросам;
- 2.10. Обновление состава Совета осуществляется не реже одного раза в пять лет.

### **3. Порядок работы Совета**

- 3.1. Организационно-техническое обеспечение деятельности Совета возлагается на ФГБУН Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН). На основании постановления бюро ОХНМ РАН или Президиума РАН Совету могут быть выделены необходимые средства для обеспечения его деятельности.
- 3.2. Совет работает в соответствии с ежегодным планом, утверждаемым председателем.
- 3.3. Совет решает вопросы в пределах задач и полномочий, возложенных на него соответствующими положениями.
- 3.4. Для решения возложенных на них задач и осуществления функций Совет вправе:
  - 3.4.1. рассматривать и принимать решения по вопросам профильной деятельности на своих заседаниях или заседаниях бюро;
  - 3.4.2. создавать секции, постоянные или временные рабочие группы, комиссии для решения задач, входящих в компетенцию Совета;
  - 3.4.3. проводить плановые, внеочередные и заочные мероприятия (координационные совещания, конференции, сессии и симпозиумы) по вопросам деятельности Совета;
  - 3.4.4. по согласованию с руководителями научных организаций и образовательных организаций высшего образования, а также научных центров, научных и научно-технических обществ, институтов развития и других организаций запрашивать материалы по вопросам, относящимся к деятельности Совета;
  - 3.4.5. приглашать на свои заседания с правом совещательного голоса представителей заинтересованных организаций, членов РАН, ведущих российских ученых, сотрудников аппарата президиума РАН, представителей органов государственной власти;
  - 3.4.6. готовить и при необходимости выносить на обсуждение президиума РАН и бюро ОХНМ РАН вопросы по профилю Совета.

3.5. Заседания Совета созываются по решению председателя или бюро по мере необходимости. Заседания могут проводиться с использованием технических средств аудио- и/или видео-конференц-связи.

3.6. Совет правомочен принимать решения по рассматриваемым вопросам, если на заседании присутствует не менее половины его списочного состава.

3.7. Решения Совета принимаются открытым голосованием за исключением вопросов, связанных с рейтинговыми и профессиональными оценками деятельности организаций науки, ученых и специалистов, участвующих в развитии направления, подведением итогов научных конкурсов. Решение Совета считается принятым, если за него проголосовало более половины членов Совета, участвующих в заседании, и оформляется протоколом за подписью председателя и ученого секретаря Совета.

3.8. Решения Совета носят рекомендательный характер, если иное не предусмотрено соответствующим положением о Совете. Рекомендации и предложения Совета могут также реализовываться в форме постановлений бюро ОХНМ РАН или Президиума РАН.

3.9. Члены Совета могут квалифицированным большинством голосов принять решение о проведении тайного голосования по любому обсуждаемому ими вопросу.

3.10. Совет ежегодно до 1 марта представляет в ОХНМ РАН отчеты о проделанной работе и сведения о наиболее важных достижениях российских ученых в области общей и неорганической химии.

3.11. Совет может иметь адрес в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», ссылка на который помещается на портале РАН.

3.12. Совет имеет свой фирменный бланк.

#### **4. Функции совета**

Совет выполняет следующие основные функции:

4.1. проводит анализ состояния и тенденций развития отечественной и мировой науки в области общей и неорганической химии; по результатам анализа готовит рекомендации для ОХНМ РАН или Президиума РАН, а также для заинтересованных органов государственной власти;

4.2. разрабатывает задачи и прогнозы основных направлений фундаментальных исследований по общей и неорганической химии; составляет координационные планы и научные программы; осуществляет координацию работ по этим направлениям, выполняемым в государственных научных организациях; рассматривает по поручению бюро ОХНМ РАН и Президиума РАН состояние материального обеспечения исследований и готовит рекомендации по этим вопросам;

- 4.3. подготавливает предложения по формированию новых академических и федеральных программ научных исследований, включению новых проектов в существующие программы;
- 4.4. подготавливает предложения и рекомендации по использованию результатов научных исследований в различных областях государственной и хозяйственной деятельности;
- 4.5. принимает участие в экспертизе проектов и аттестации научных организаций по запросу бюро ОХНМ РАН, Президиума РАН, Минобрнауки РФ, других министерств и ведомств;
- 4.6. в соответствии с п. 38 Устава РАН, выдвигает кандидатов в члены РАН;
- 4.7. выдвигает работы на соискание Государственных премий РФ, премий Правительства РФ, золотых медалей и премий РАН;
- 4.8. участвует в организации и проведении национальных и международных научных конгрессов, конференций, семинаров, школ, а также в подготовке и публикации их материалов;
- 4.9. способствует подготовке и изданию современных учебников и учебных пособий по неорганической химии для средних школ и вузов; активно участвует в совершенствовании послевузовского образования (аспирантура, докторантура, переподготовка и повышение квалификации кадров);
- 4.10. способствует изданию научной литературы, улучшению информационного обеспечения научных и образовательных организаций по общей и неорганической химии;
- 4.11. содействует расширению международного сотрудничества по направлению, пропаганде результатов исследований российских ученых, изучению наследия выдающихся ученых России и популяризации научных достижений;
- 4.12. рекомендует кандидатов для направления в научные командировки за границу с целью изучения состояния науки и техники в области общей и неорганической химии; рассматривает отчеты о командировках, осуществляемых по рекомендации Совета; участвует в разработке планов международных научных связей;
- 4.13. вносит предложения в бюро ОХНМ РАН и Президиум РАН по кандидатурам главных редакторов журналов;
- 4.14. формирует рекомендации об организации диссертационных советов по профилю Совета;
- 4.15. готовит предложения по поддержке научных школ и молодых талантливых ученых.

## РАБОТА НАУЧНОГО СОВЕТА РАН ПО НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ В 2023 ГОДУ И ПОЛУЧЕННЫЕ НАУЧНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В 2023 г. председателем Научного совета РАН по неорганической химии утвержден директор Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, член-корреспондент РАН Иванов Владимир Константинович. Одной из первых задач, решенных в 2023 г., стало формирование обновленного состава Научного совета РАН по неорганической химии (далее Совет).

Ключевым направлением работы Совета стал анализ состояния и тенденций развития науки и научно-методическое сопровождение различных мероприятий с целью развития и популяризации неорганической химии.

В 2023 г. Совет осуществлял следующую деятельность:

- прогнозирование основных направлений научного, научно-технологического развития Российской Федерации в области неорганической химии;
- экспертная оценка работ по неорганической химии, выполненных молодыми учеными;
- научно-методическая и научно-организационная поддержка научных мероприятий, проводимых в России, в том числе мероприятий для молодых ученых (конференций, научных школ, конкурсов и др.);
- научно-методическое взаимодействие с РАН, научными организациями, высшими учебными заведениями, научными советами и экспертными группами РАН, федеральными учебно-методическими объединениями высшего образования.

Далее в основной части отчета приведены достижения российских ученых в области неорганической химии<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup> Результаты представлены в авторской редакции.

# I. КООРДИНАЦИОННАЯ ХИМИЯ И ХИМИЯ ЭЛЕМЕНТОВ

## 1. Разработка новых подходов к получению карбоксоновых производных *κ*-декаборатного аниона

Разработаны и реализованы новые подходы получения карбоксоновых производных *κ*-декаборатного аниона – перспективных соединений с потенциальной фармакологической активностью (антибактериальной, противовирусной, туморотропной). Предложенный способ получения солей анионов  $[B_{10}H_8O_2CAr]^-$  ( $Ar = C_6H_5, CH_3C_6H_5, FC_6H_5$ ) осуществляется с применением автоклавной техники, протекает одностадийно и не требует выделения и очистки промежуточных монозамещенных карбоксилов. Полученные карбоксоновые производные могут выступать как молекулярные платформы для получения тризамещенных производных, содержащих помимо карбоксоновой группы нитрильный заместитель  $[B_{10}H_7O_2CAr(NCR)]^0$  ( $R=CH_3, C_2H_5, C_6H_5$ ). При взаимодействии с щелочами производные  $[B_{10}H_8O_2CAr]^-$  гидролизуются с образованием  $[B_{10}H_8(OH_2)]^{2-}$ .

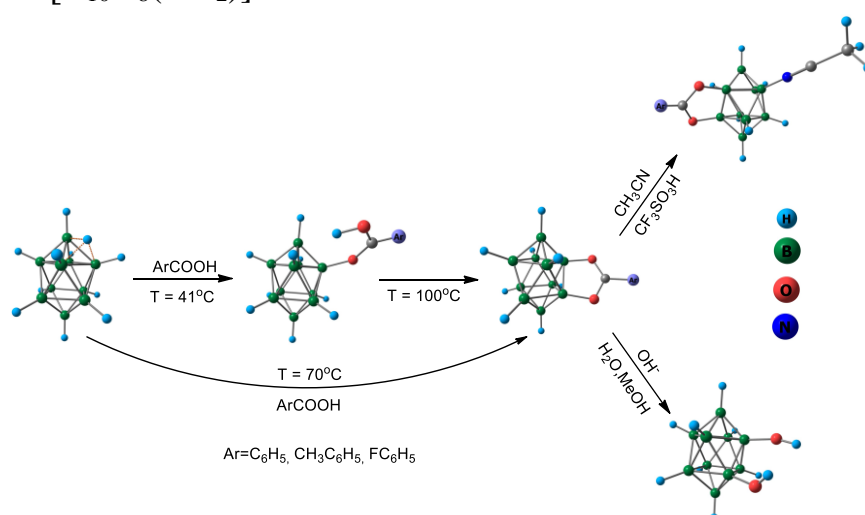


Схема получения солей анионов  $[B_{10}H_8O_2CAr]^-$ ,  $Ar = C_6H_5, CH_3C_6H_5, FC_6H_5$  и производных на их основе  $[B_{10}H_7O_2CAr(NCR)]^0$  ( $R = CH_3, C_2H_5, C_6H_5$ ) и  $[B_{10}H_8(OH_2)]^{2-}$ .

Руководители работ – академик РАН Кузнецов Н.Т. и чл.-корр. РАН Жижин К.Ю. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)

### Публикации:

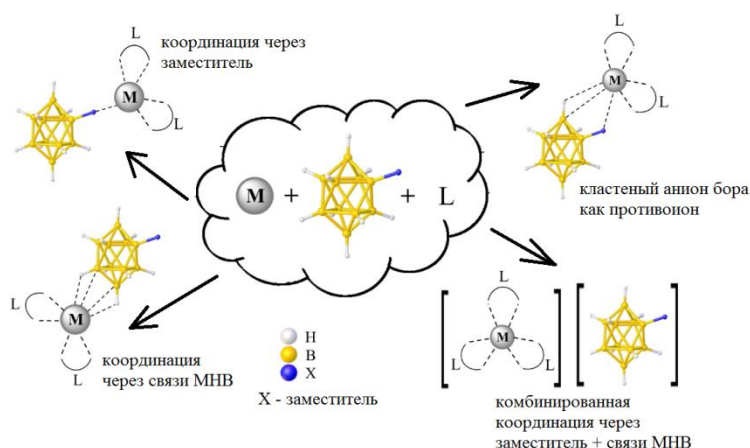
Klyukin I.N., Kolbunova A.V., Novikov A.S., Nelyubin A.V., Zhdanov A.P., Kubasov A.S., Selivanov N.A., Bykov A.Y., Zhizhin, K.Y., Kuznetsov N.T. Synthesis of Disubstituted Carboxonium Derivatives of *Closo*-Decaborate Anion  $[2,6-B_{10}H_8O_2CC_6H_5]^-$ : Theoretical and Experimental Study // *Molecules*. – 2023. – V. 28. – a.n. 1757. DOI: 10.3390/molecules28041757



Klyukin I.N., Kolbunova A.V., Novikov A.S., Zhdanov A.P., Zhizhin K.Y., Kuznetsov N.T. Theoretical Insight on the Formation Mechanism of a Trisubstituted Derivative of *Closo*-Decaborate Anion  $[B_{10}H_7O_2CCH_3(NCCH_3)]^0 //$  *Inorganics*. – 2023. – V.11. – a.n. 201. DOI: 10.3390/inorganics11050201

## 2. Новые методы синтеза политопных и полидентатных производных кластерных анионов бора

Созданы новые методы синтеза политопных и полидентатных производных кластерных анионов бора, а также синтезирован обширный круг координационных соединений переходных и непереходных металлов с лигандами этого типа. Показано, что в таких соединениях реализуются различные способы связывания кластерных анионов бора: за счет ВН-группы борного кластера, за счет функциональных групп заместителя, пendantsкого или непосредственно присоединенного к бороводородному кластеру, а также существует возможность реализации комбинированного способа координации (и за счет заместителя, и за счет ВН-группы борного кластера). Полученные политопные и полидентатные производные кластерных анионов бора показали выраженную противовирусную активность. В совместных работах с Институтом вирусологии Национального исследовательского центра эпидемиологии и микробиологии имени академика Н.Ф. Гамалеи Минздрава России показано, что полученные замещенные производные кластеров бора  $Na_2[B_{10}H_9O(CH_2)_2O(CH_2)_2SCN]$  и  $Na_2[B_{10}H_9O(CH_2)_2O(CH_2)_2CN]$  проявляют активность и селективность *in vitro* в отношении современного штамма коронавируса SARS-CoV-2 (IC<sub>50</sub> 312 и 625 мкг/мл соответственно).



Руководители работ – академик РАН Кузнецов Н.Т. и чл.-корр. РАН Жижин К.Ю. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)

### **Публикации:**

Матвеев Е.Ю., Гараев Т.М., Новиков С.С., Ничуговский А.И., Соколов И.Е., Ларичев В.Ф., Лебедева В.В., Гребенникова Т.В., Авдеева В.В., Малинина Е.А., Жижин К.Ю., Кузнецов Н.Т. Производные клозо-декаборатного аниона с пendantsными функциональными группами как ингибиторы репликации вирусов // Журнал неорганической химии. – 2023. – Т. 68, № 6. – С. 752–760. DOI: 10.31857/S0044457X22602413

Malinina E.A., Kubasov A.S., Matveev E.Yu., Nichugovskii A.I., Nikiforova S.E., Goeva L.V., Avdeeva V.V., Zhizhin K.Yu., Kuznetsov N.T. Hydroxy-substituted closo-dodecaborate anion  $[B_{12}H_{11}OH]^{2-}$  in silver(I) and lead(II) complexation in the presence of azaheterocyclic ligands L // Polyhedron. – 2023. – V. 242. – a.n. 116516. DOI: 10.1016/j.poly.2023.116516

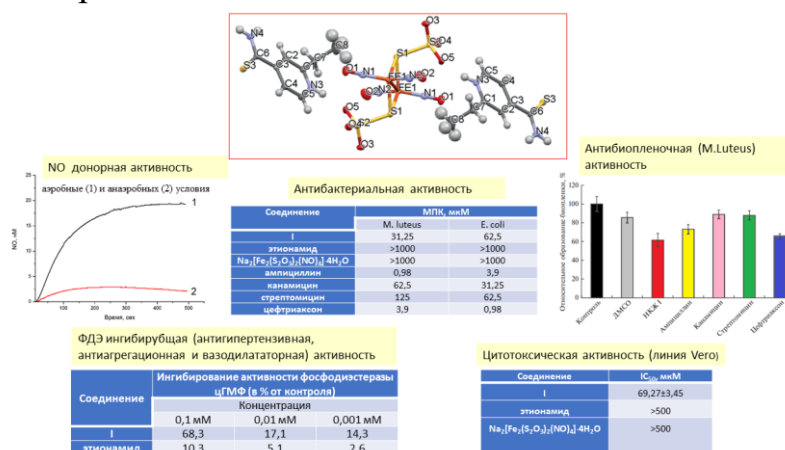
Nikiforova S.E., Matveev E.Y., Kubasov A.S., Golubev A.V., Goeva L.V., Malinina E.A., Zhizhin K.Y., Kuznetsov N.T. Experimental and Theoretical Study of the Features of Zinc(II) and Cadmium(II) Complexation with the Substituted *closo*-Hydridoborate Anion  $[2-B_{10}H_9(OH)]^{2-}$  // European Journal of Inorganic Chemistry. – 2023. – V. 23. – a.n. e202300306. DOI: 10.1002/ejic.202300306

### **3. Синтез, строение и свойства нитрозильного комплекса железа с 2-этил-4-пиридинкарботиоамидом**

Эндогенный оксид азота (NO) играет важную роль в качестве первой линии обороны против различных патогенов: он эффективно действует на вирусы, обладает антибактериальной и противогрибковой активностью. Образование NO усиливается в макрофагах, индуцированных инфекционными агентами или цитокинами. Среди экзогенных средств генерации NO, рассматриваемых как противомикробные средства, можно выделить несколько основных классов. Наряду с газообразным NO и различными системами его генерации используются органические нитраты, NONO-аты и S-нитрозотиолы. В последние годы растет интерес к низкомолекулярным миметикам нитрозильных ферредоксинов – нитрозильным комплексам железа (НКЖ), содержащим природный  $Fe(NO)_2$  фрагмент и функциональный S-лиганд (как правило, тиолил) в своей структуре. НКЖ на основе тиоамидов практически неизвестны и представляют большой практический интерес. Известно, что производные тиоамида обладают высокой антибактериальной и противовирусной активностью. В этой связи гибридные системы, содержащие в качестве лигандов два важных фармакофора –NO-тиоамидную группы, могут стать перспективными агентами в NO-терапии инфекционных заболеваний.



В настоящей работе представлены синтез и результаты исследования физико-химических характеристик и биологической активности нового нитрозильного комплекса железа I. С помощью РСА установлено, что этионамид в сильноокислых средах протонируется по атому азота пиридинового цикла и замещает катион  $\text{Na}^+$  в соли  $\text{Na}_2[\text{Fe}_2(\text{S}_2\text{O}_3)_2(\text{NO})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  с образованием биядерного комплекса I – эффективного донора NO в физиологических условиях. Показано, что комплекс I обладает антибактериальной активностью в отношении грамотрицательных и грамположительных микроорганизмов, сопоставимой с действием антибиотиков канамицина и стрептомицина, и подавляет образование биопленок бактерий *Micrococcus luteus* с эффективностью, сравнимой с действием цефтриаксона. Впервые получены данные по цитотоксическому действию комплекса I: соединение проявляет токсичность по отношению к клеткам Vero с дозой  $\text{IC}_{50}$  около 70 мкМ. Показано, что комплекс I является эффективным ингибитором гидролитического фермента – фосфодиэстеразы циклического гуанозинмонофосфата в исследованном диапазоне концентраций (0.1–0.01 мМ); он конкурентно тормозит функцию фермента с константой ингибирования  $K_i = 2.9 \times 10^{-4}$  М.



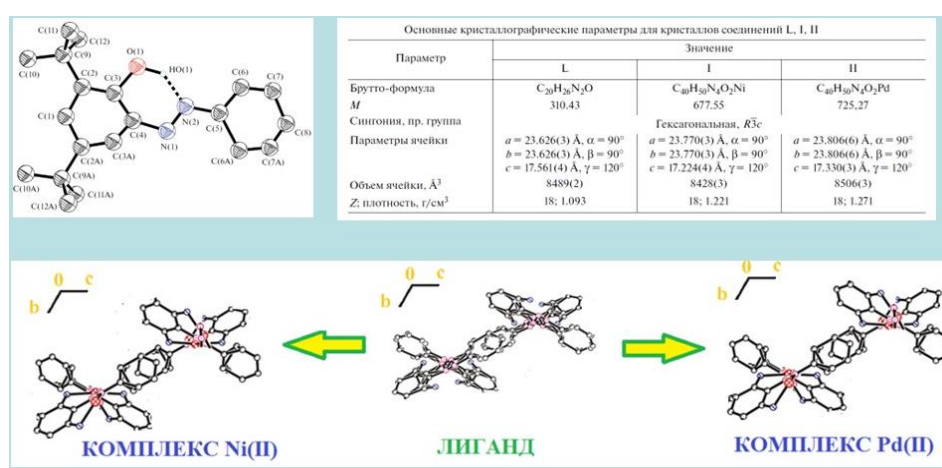
Руководитель работ – академик РАН Алдошин С.М. (Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН)

### Публикация:

Sanina N.A., Shilov G.V., Ovanesyanyan N.S., Mumyatova V.A., Balakina A.A., Terent'ev A.A., Pokidova O.V., Aldoshin S.M. Synthesis, Structure, and Properties of the Iron Nitrosyl Complex with 2-Ethyl-4-pyridinecarbothioamide // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2023. – V.49, №9. – P.542–554. DOI: 10.1134/S1070328423600523

#### 4. Удивительный пример сохранения кристаллической структуры 3,5-дитретбутил-2-гидроксиазобензольного лиганда при образовании комплексов Ni(II) и Pd(II)

Методом рентгеноструктурного анализа исследован 3,5-ди-третбутил-2-гидроксиазобензол (**I**) в свободном состоянии и в комплексах с катионами Ni<sup>2+</sup> (**II**) и Pd<sup>2+</sup> (**III**). Большой интерес вызывает тот факт, что все три соединения кристаллизуются в одной пространственной группе с близкими параметрами при условии, что синтез комплексов проводится в жидкой фазе. Анализ молекулярного и кристаллического строения лиганда **I** и комплексов **II** и **III** показывает, что при образовании комплексов структура лиганда практически не изменяется. С учетом того, что в кристаллической структуре лиганда остаётся достаточно места для расположения ионов металла, кристаллическую структуру комплексов определяет упаковка лиганда. Подтверждением этому служат расчеты, проведенные по VASP 5.3.3 методом *in vacuo*, то есть с учетом кристаллического окружения. Для этих расчетов были взяты комплексы **II** и **III**, из которых удалены ионы металлов и проведена оптимизация геометрических структур. В результате расчета были получены структуры, в которых лиганды координационной сферы практически сохраняют свое расположение, как и в исходном кристалле **I**. Молекулы при этом становятся плоскими (происходит разворот фенильных колец на угол 12.4°). Таким образом, проведенные расчеты полностью подтверждают наш вывод об определяющей роли кристаллической структуры лиганда **I** в образовании необычной кристаллической структуры его комплексов.



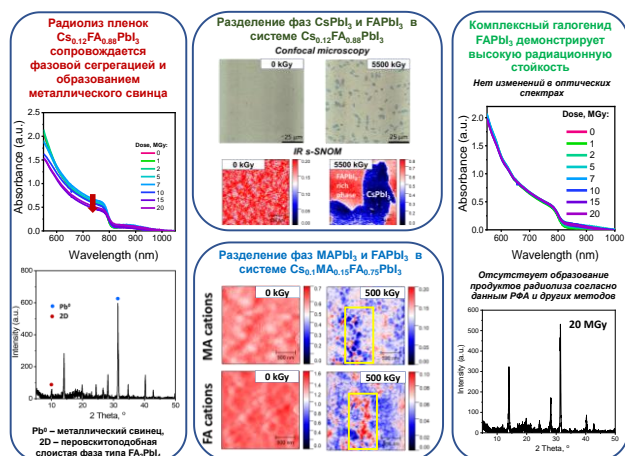
Руководитель работ – академик РАН Алдошин С.М. (Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН)

### **Публикация:**

Алдошин С.М., Ткачев В.В., Утенышев А.Н., Боженко К.В. Удивительный пример сохранения кристаллической структуры 3,5-дитретбутил-2-гидроксиазобензольного лиганда при образовании комплексов Ni(II) и Pd(II) // Координационная химия. – 2023. – Т. 49. № 4. – С. 308-314. DOI: 10.1134/S1070328423700495

### **5. Установление механизмов деградации комплексных галогенидов свинца под действием гамма-лучей и поиск материалов со сверхвысокой радиационной стойкостью к дозам > 10 МГр**

Систематически изучены четыре модельные системы:  $\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{FAPbI}_3$ ,  $(\text{CsFA})\text{PbI}_3$  и  $(\text{CsMAFA})\text{PbI}_3$ , где  $\text{MA}^+$  и  $\text{FA}^+$  — катионы метиламмония и формамидиния, соответственно. Установлено, что под действием гамма-лучей органические катионы в пленках  $\text{MAPbI}_3$  скапливаются на границах зерен, при этом образуется галогенид со слоистой структурой  $\text{MA}_2\text{PbI}_4$ . Механизм этого явления был предложен ранее на основании квантово-химических расчетов, указывающих на радиолиз  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$  до  $\text{CH}_3\text{I}$  и  $\text{NH}_3$ . Реакция  $\text{MAI}$  с  $\text{MAPbI}_3$  на границах приводит к  $\text{MA}_2\text{PbI}_4$ . Кроме того, радиолиз  $\text{MAPbI}_3$  приводит к образованию металлического свинца и, вероятно, молекулярного йода (по аналогии с фотолизом). Так называемые «многокатионные» перовскиты  $(\text{Cs}_{0.12}\text{FA}_{0.88})\text{PbI}_3$  и  $(\text{Cs}_{0.1}\text{MA}_{0.15}\text{FA}_{0.75})\text{PbI}_3$  под действием гамма-лучей претерпевают фазовую сегрегацию с образованием отдельных доменов, обогащенных каждым из входящих в их состав одновалентных катионов. Например,  $(\text{Cs}_{0.1}\text{MA}_{0.15}\text{FA}_{0.75})\text{PbI}_3$  разлагается с образованием фаз, близких по составу к  $\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{CsPbI}_3$  и  $\text{FAPbI}_3$ . Важным результатом является обнаружение высокой радиационной стойкости комплексного галогенида свинца  $\text{FAPbI}_3$ : он является единственным из исследованных материалов, который не подвергается какому-либо разложению даже после воздействия сверхвысоких доз гамма-излучения, достигающих 10-20 МГр. Есть все основания для успешного практического использования данного полупроводникового материала в составе солнечных панелей в космосе и как компонента детекторов ионизирующего излучения в медицинской технике.



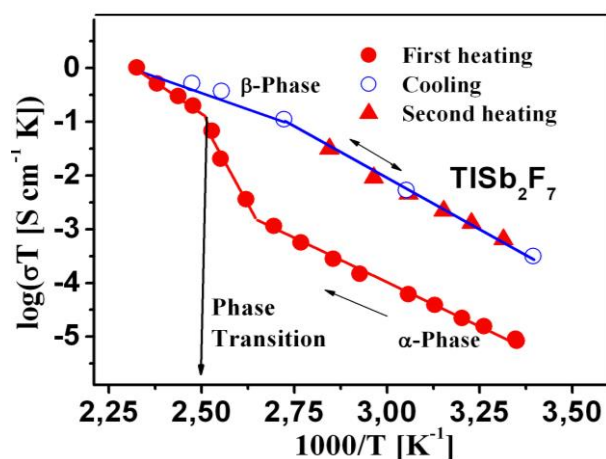
*Руководитель работ – академик РАН Алдошин С.М. (Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН)*

**Публикация:**

Ozerova V.V., Emelianov N.A., Kiryukhin D.P., Kushch P.P., Shilov G.V., Kichigina G.A., Aldoshin S.M., Frolova L.A., Troshin P.A. Exploring the Limits: Degradation Behavior of Lead Halide Perovskite Films under Exposure to Ultrahigh Doses of  $\gamma$  Rays of Up to 10 MGy. // The Journal of Physical Chemistry Letters. – 2023. – V. – 14, № 3. – P. 743–749. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.2c03763

**6. Изучение механизма ионных движений, ионной проводимости комплексных фторо-антимонатов(III) щелочных металлов Rb, Cs и аммония**

Изучен механизм ионных движений, ионной проводимости комплексных фторо-антимонатов(III) щелочных металлов Rb, Cs и аммония. Эти соединения представляют теоретический и практический интерес, как компоненты твердых электролитов. Проведен анализ взаимосвязи между строением, наличием структурных дефектов, частотами ионных движений и величинами ионной проводимости широкого ряда соединений указанного семейства. Величины ионной проводимости (Рис.) многих из рассмотренных соединений находятся на уровне наилучших значений, полученных для анионных проводников. Предложены механизмы возникновения ионной подвижности в рассмотренных соединениях.



Температурные зависимости ионной электропроводности TlSb<sub>2</sub>F<sub>7</sub>

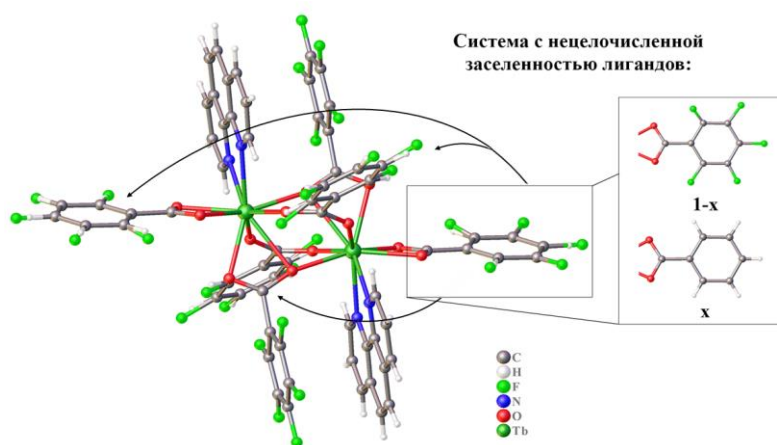
*Руководитель работ – академик РАН Сергиенко В.И. (Институт химии ДВО РАН)*

**Публикация:**

Слободюк А.Б., Макаренко Н.В., Полянцев М.М., Кавун В.Я., Земнухова Л.А. Структурная разупорядоченность и ионная подвижность в фосфатофторидных комплексах сурьмы(III) MSbF(PO<sub>4</sub>)·H<sub>2</sub>O (M = Na, Rb, NH<sub>4</sub>) по данным ЯМР и ЯМР ВМУ <sup>19</sup>F, <sup>31</sup>P и <sup>1</sup>H // Журнал структурной химии. – 2023. – Т. 64, №2. – а.н. 105513. DOI 10.26902/JSC\_id105513

**7. Гетероанионные комплексы [Ln<sub>2</sub>(phen)<sub>2</sub>(pfb)<sub>4-x</sub>(bnz)<sub>2+x</sub>]**

Взаимодействие пентафторбензоатов (pfb) и бензоатов (bnz) лантанидов с 1,10-фенантролином (phen) при соотношении Ln:phen:(pfb+bnz) = 2:2:6 в ацетонитриле приводит к кристаллизации твердых растворов [Ln<sub>2</sub>(phen)<sub>2</sub>(pfb)<sub>4-x</sub>(bnz)<sub>2+x</sub>] (Ln = Eu, Tb, Gd; x = 0,6-2,8). По данным РСА заселенности четырех позиций анионов из шести нецелочисленные и их одновременно занимают пентафторбензоатный и бензоатный анионы, две позиции пентафторбензоатных анионов всегда целочисленные. Перекристаллизация из бензола приводит к формированию только смешаннокарбоксилатного соединения [Ln<sub>2</sub>(phen)<sub>2</sub>(pfb)<sub>4</sub>(bnz)<sub>2</sub>]·4C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> с целочисленными заселенностями всех позиций. Для твердого раствора наблюдается значительное повышение общих квантовых выходов и времен жизни люминесценции по сравнению с аналогичными бензоатным и пентафторбензоатным комплексами.

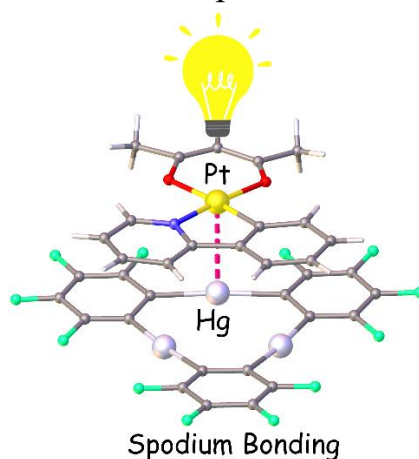


Строение гетероанионного комплекса  $[\text{Ln}_2(\text{phen})_2(\text{pfb})_{4-x}(\text{bnz})_{2+x}]$ . Показаны позиции пентафторбензоатных и бензоатных анионов, имеющих нецелочисленные заселенности.

*Руководитель работ академик РАН Еременко И.Л. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

## 8. Многослойные гетеропланарные ансамбли комплексов платины(II)

Плоскоквадратные комплексы платины(II) были сокристаллизованы с антикрауном  $\text{Hg}_3(1,2\text{-C}_6\text{F}_4)_3$  с образованием многослойных гетеропланарных ансамблей, в которых структуроопределяющим является сподиевое взаимодействие  $\text{Hg}^{\text{II}} \cdots \text{Pt}^{\text{II}}$ . В этом типе нековалентного связывания положительно заряженный ион платины(II) выступает в роли основания Льюиса за счёт своей  $d_z^2$ -орбитали. Супрамолекулярная стекинговая интеграция приводит к увеличению времени жизни флуоресценции, а также к увеличению квантового выхода в твёрдом состоянии до 6 раз.



*Руководитель работ – академик РАН Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет)*

### **Публикация:**

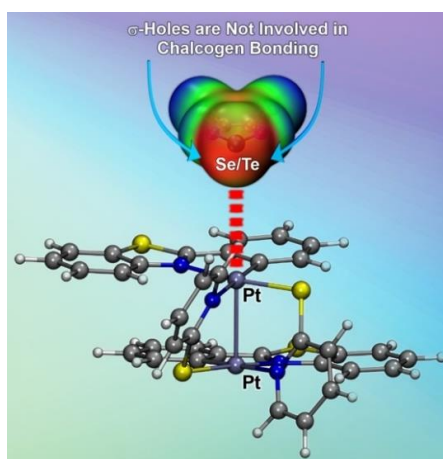
Rozhkov A.V., Katlenok E.A., Zhmykhova M.V., Kuznetsov M.L., Khrustalev V.N., Tugashov K.I., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu. Spodium



bonding to anticrown-Hg<sub>3</sub> boosts phosphorescence of cyclometalated-Pt<sup>II</sup> complexes // *Inorganic Chemistry Frontiers*. – 2023. – V. 10. – P. 493–510. DOI: 10.1039/D2QI02047E

## 9. Исследование структур сокристаллов плоскоквадратных комплексов платины(II) с халькогенадиазолами

В структурах сокристаллов плоскоквадратных комплексов платины(II) с халькогенадиазолами были обнаружены короткие контакты Ch...Pt<sup>II</sup> (Ch = Se, Te). Примечательно то, что две обширные сигма-дырки развёрнуты от  $d_z^2$ -орбиталей иона платины. Это является первым примером халькогенной связи, которую нельзя отнести к категории сигма-дырочный взаимодействий. Комплексное квантово-химическое исследование (PBE0-D3BJ; QTAIM, ELF, IGMH, MEP, CDF, ETS-NOCV и SAPT) показало, что платина(II) не взаимодействует с сигма-дырками доноров халькогенной связи, а участвует в других типах взаимодействий, включая, в частности,  $\pi$ -дырку на самом атоме халькогена.



*Руководитель работ – академик РАН Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет)*

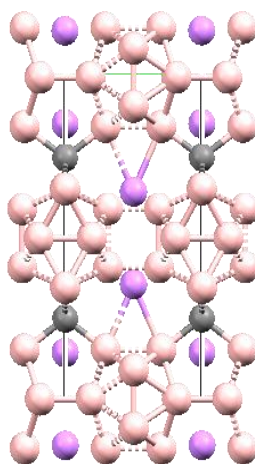
### **Публикация:**

Katlenok E.A., Kuznetsov M.L., Semenov N.A., Bokach N.A., Kukushkin V.Yu., A new look at the chalcogen bond:  $\pi$ -hole-based chalcogen (Se, Te) bonding which does not include a  $\sigma$ -hole interaction // *Inorganic Chemistry Frontiers*. – 2023. – V. 10. – P. 3065–3081. DOI: 10.1039/D3QI00087G

## 10. Конструирование объемноцентрированных тетрагональных, орторомбических и кубических кристаллов на основе бора

На основе собственных подходов теоретически сконструированы более сотни объемноцентрированных тетрагональных, орторомбических и

кубических кристаллов на основе бора, в которых на 1 икосаэдрический кластер приходится 1, 2 или 3 одиночных мостиковых атома неметалла соответственно, и могут присутствовать еще и дополнительные атомы металла или бора в полостях. На рисунке показана тетрагональная структура  $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{C}$ . Высокая расчетная плотность многих предсказанных веществ благоприятствует их устойчивости при высоких давлениях. Для предсказанных веществ ожидаются высокая твердость, а также высокая стойкость к радиационным воздействиям и малочувствительные к примесям полупроводниковые свойства, что перспективно для ядерных и космических применений.



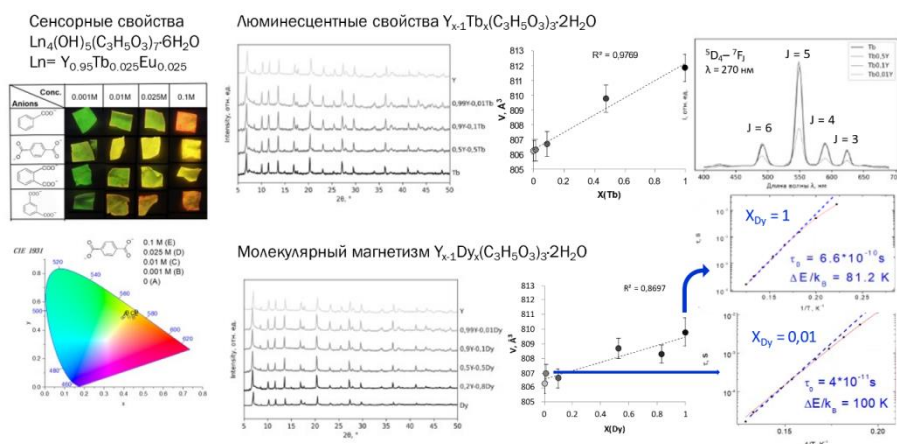
Тетрагональная структура  $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{C}$ . Атомы бора показаны розовым цветом, углерода — серым, лития — фиолетовым.

*Руководитель работ – академик РАН Солнцев К.А. (Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН)*

## 11. Твердые растворы лактатов редкоземельных элементов

Получены новые материалы на основе твердых растворов молекулярных комплексов – лактатов редкоземельных элементов ( $\text{Ln}(\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ln} = \text{Y}, \text{Tb-Lu}$ ), а также нанокристаллических гидроксолактатов РЗЭ ( $\text{Ln}_4(\text{OH})_5(\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3)_7 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ln} = \text{Y}, \text{Eu-Lu}$ ), обладающие перспективными люминесцентными и магнитными свойствами. Анализ статической и динамической магнитной восприимчивости показал возможность получения на основе лактатов РЗЭ новых молекулярных магнетиков с барьером перемагничивания 81,2 К. На основе новых соединений получены люминесцентные датчики для определения органических кислот, в т.ч. в форме сверхлегких аэрогелей.





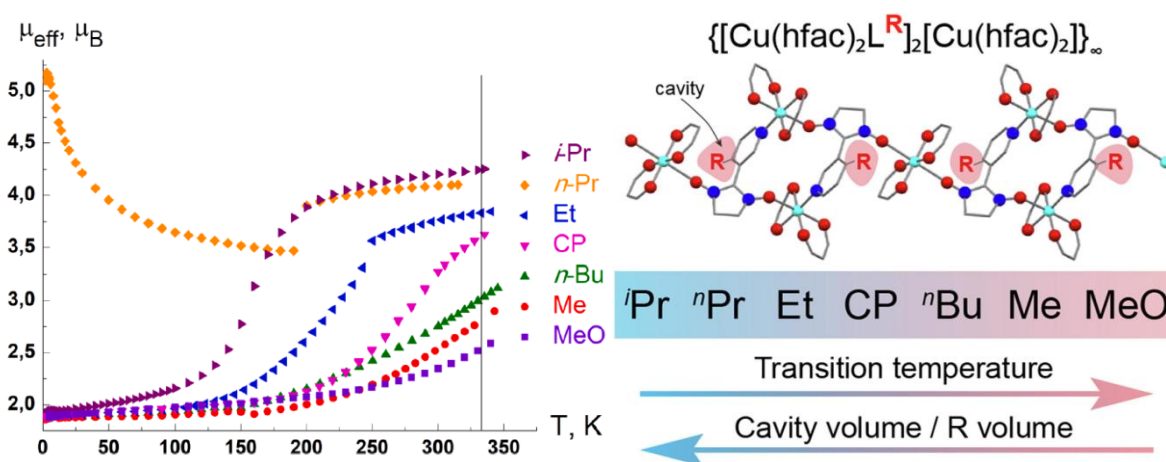
Руководители работ – чл.-корр. РАН Иванов В.К. и к.х.н. Баранчиков А.Е. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)

### Публикация:

Голикова М.В., Япрынцева А.Д., Цзя Ч., Фатюшина Е.В., Баранчиков А.Е., Иванов В.К. Синтез и физико-химические свойства лактатов РЗЭ иттриевой подгруппы  $\text{Ln}(\text{C}_3\text{H}_5\text{O}_3)_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Ln} = \text{Y}, \text{Tb} - \text{Lu}$ ) // Журнал неорганической химии. – 2023. – Т. 68, № 10. – С. 1422-1432. DOI: 10.31857/S0044457X23601050

## 12. Полимерно-цепочечные комплексы $\text{Cu}(\text{hfac})_2$ с пиридил-замещенными нитроксилами – взаимосвязь между доступным для заместителя объемом и температурой магнитно-структурного перехода

Получена серия 1D-полимерных комплексов  $\text{Cu}(\text{II})$  с R-пиридил-нитроксилами  $\text{L}^{\text{R}}$ , в которых centrosymmetric димеры  $[\text{Cu}(\text{hfac})_2\text{L}^{\text{R}}]_2$ , связаны фрагментами  $\text{Cu}(\text{hfac})_2$  в цепи. Методами рентгеноструктурного анализа и магнетохимии показано, что при изменении температуры происходят магнитно-структурные переходы, обусловленные трансформациями координационного окружения ионов  $\text{Cu}$  в биядерных фрагментах. Выявлена корреляция между параметрами магнитно-структурного фазового перехода и соотношением между размером заместителя  $\text{R}$  ( $V_{\text{R}}$ ) и объемом доступного пространства ( $V_{\text{C}}$ ) для заместителя в кристаллической структуре. Продемонстрировано, что при наличии достаточного свободного пространства ( $V_{\text{R}} \ll V_{\text{C}}$ ) для разупорядочения заместителя фазовые переходы реализуются при низких температурах ( $< 250$  К). В случае  $V_{\text{R}} \approx V_{\text{C}}$ , отсутствует возможность разупорядочения  $\text{R}$ , вследствие чего уменьшается энтропия и фазовые переходы сдвигаются в область высоких температур ( $> 320$  К).



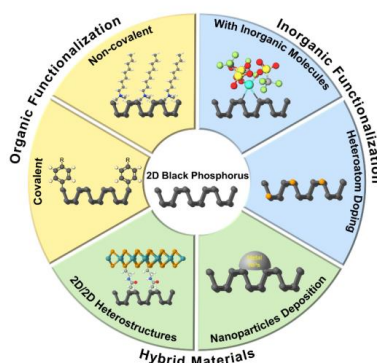
Руководитель работ – академик РАН Овчаренко В.И. и д.х.н. Романенко Г.В. (Центральный Институт «Международный томографический центр» СО РАН)

### Публикация:

Tolstikov S., Smirnova K., Kolesnikov A., Letyagin G., Bogomyakov A., Romanenko G., Ovcharenko V. Relationship between Phase Transition Temperature and Accessible Volume for Substituent in  $\text{Cu}(\text{Hfac})_2$  Chain-Polymer Complexes with Pyridine-Based Nitroxides. // Polyhedron. – 2023. – V. 230. – a.n. 116212. DOI: 10.1016/j.poly.2022.116212

### 13. Электрохимическое метилирование малослойного черного фосфора и его функционализация карбеновыми интермедиатами

Впервые осуществлено электрохимическое метилирование малослойного черного фосфора и его функционализация карбеновыми интермедиатами. Показано, что производные малослойного чёрного фосфора, функционализированные дихлоркарбенами, являются активными гетерогенными катализаторами процесса электрокаталитического разложения воды до молекулярного водорода.



Руководитель работ – профессор РАН, д.х.н. Яхваров Д.Г. (Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова - обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНЦ РАН)

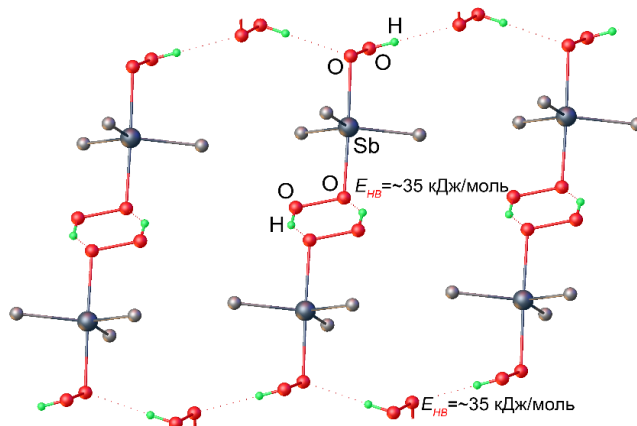
### Публикации:

Kuchkaev A.M., Kuchkaev A.M., Sukhov A.V., Saparina S.V., Gnezdilov O.I., Klimovitskii A.E., Ziganshina S.A., Nizameev I.R., Vakhitov I.R., Dobrynin A.B., Stoikov D.I., Evtugyn G.A., Sinyashin O.G., Kang X., Yakhvarov D.G. Covalent Functionalization of Black Phosphorus Nanosheets with Dichlorocarbenes for Enhanced Electrocatalytic Hydrogen Evolution Reaction // *Nanomaterials*. – 2023. – V. 13, № 5. – P. 826-839. DOI: 10.3390/nano13050826

Kuchkaev A.M., Kuchkaev A.M., Sukhov A.V., Saparina S.V., Gnezdilov O.I., Klimovitskii A.E., Ziganshina S.A., Nizameev I.R., Asanov I.P., Brylev K.A., Sinyashin O.G., Yakhvarov D.G. In-Situ Electrochemical Exfoliation and Methylation of Black Phosphorus into Functionalized Phosphorene Nanosheets // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2023. – V. 24, № 4. – a.n. 3095. DOI: 10.3390/ijms24043095

## 14. Разработка подходов к синтезу кристаллических дигидропероксидов триалкил и триарилсурьмы(V)

Предложен общий синтетический подход и впервые синтезированы шесть кристаллических дигидропероксидов триалкил- и триарилсурьмы(V). Рентгеноструктурный анализ показал, что гидропероксолиганды всегда образуют водородные связи в качестве донора протонов, обеспечивая разнообразие водородно-связанных мотивов и кристаллических упаковок. Соединения, не содержащие сольватных молекул, разлагаются при нагревании до температур 105-115 °С, что обеспечивается Н-связями с участием ООН групп. Расчетные величины энергии Н-связей ООН лигандов в гидропероксиде триметилсурьмы составляют 35 кДж/моль. Показано, что дигидропероксид трифенилсурьмы(V) может служить удобным в использовании двухэлектронным окислителем для энантиоселективного (< 98%) эпоксилирования олефинов в присутствии комплекса Mn.



Фрагмент кристаллической структуры дигидропероксида триметилсурьмы(V)  $\text{Me}_3\text{Sb}(\text{OOH})_2$  с двумя типами водородно-связанных мотивов, сформированных гидропероксолигандами.

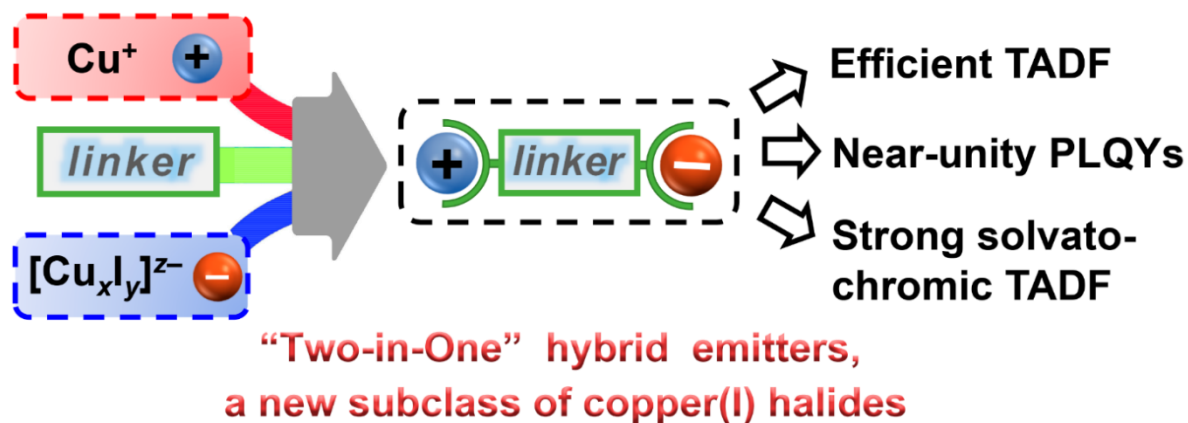
Руководитель работ д.х.н. Приходченко П.В. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)

**Публикация:**

Egorov P.A., Grishanov D.A., Medvedev A.G., Churakov A.V., Mikhaylov A.A., Ottenbacher R.V., Bryliakov K.P., Babak M.V., Lev O., Prikhodchenko P.V. Organoantimony Dihydroperoxides: Synthesis, Crystal Structures, and Hydrogen Bonding Networks // Inorganic Chemistry. – 2023. – V. 62. – P. 9912-9923. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c00929

**15. Цвиттер-ионные комплексы меди(I) для дизайна высокоэффективных TADF материалов**

Открыт новый подкласс гибридных комплексов меди(I), одновременно содержащих анионы  $[\text{Cu}_x\text{I}_y]^{z-}$  и катионы  $\text{Cu}^+$ , которые разделены в пространстве трис(2-пиридил)фосфином. При комнатной температуре эти цвиттер-ионные соединения проявляют сольватохромную термоактивируемую замедленную флуоресценцию (TADF) с почти 100% квантовым выходом. При рентгеновском облучении представленные гибриды демонстрируют яркую радиолуминесценцию, интенсивность которой сопоставима с таковой для германата висмута (BGO). Полученные результаты открывают новые возможности для дизайна высокоэффективных TADF материалов. Работа выполнена совместно с ИХКГ СО РАН, НГУ, НИОХ СО РАН.



Руководитель работ – д.х.н. Артемьев А.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)

**Публикация:**

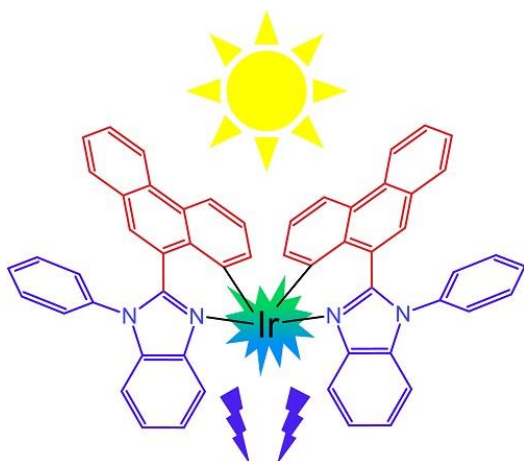
Baranov A.Y., Rakhmanova M.I., Hei X., Samsonenko D.G., Stass D.V., Bagryanskaya I.Y., Ryzhikov M.R., Fedin V.P., Li J., Artem'ev A.V. “A new

subclass of copper(I) hybrid emitters showing TADF with near-unity quantum yields and a strong solvatochromic effect” // Chemical Communications. – 2023. – V. 59. – a.n. 2923. DOI: 10.1039/D3CC00119A

## 16. Создание эффективных красителей для солнечных элементов

Ученые из Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Физического института им. П.Н. Лебедева РАН и Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН синтезировали органические молекулы-антенны, координация которых к центральному иону иридия многократно усилила поглощение света полученных металлоорганических соединений по сравнению с их индивидуальными компонентами. Разработка перспективна для альтернативной энергетики.

Разработан одностадийный метод синтеза и получена серия антенных молекул на основе соединений иридия и имидазола, которые содержат замкнутую систему двойных связей углерод-углерод. На основе изучения серии иридиевых красителей с применением современных инструментальных методов, в первую очередь, рентгеноструктурного анализа и электронной спектроскопии, установлены пределы возможного увеличения размеров молекул-антенн с сохранением приемлемой для работы в солнечных батареях устойчивости соединений иридия. Предложен способ тонкой подстройки цвета красителей за счет введения в структуру антенн электрон-дефицитных или электрон-избыточных фрагментов.



Соединения иридия, содержащие органические фрагменты с расширенной сопряженной системой, активно поглощают свет и участвуют в его эффективном преобразовании в электрический ток в солнечных батареях. Управление цветом красителя посредством рационального дизайна органических хромофорных фрагментов.

*Руководитель работ – к.х.н. Беззубов С.И. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

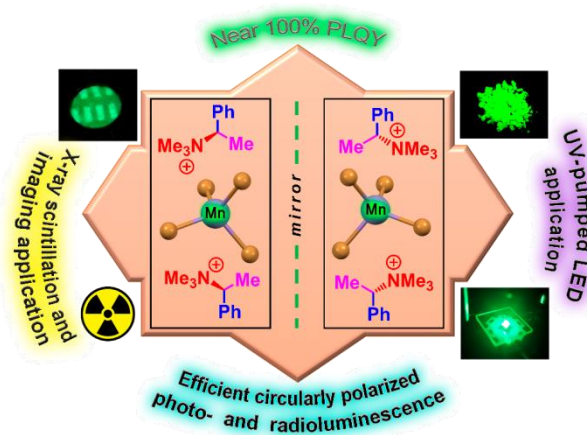


*Публикация:*

Tatarin S.V., Smirnov D.E., Taydakov I.V., Metlin M.T., Emets V.V., Bezzubov S.I., Tailoring the  $\pi$ -System of Benzimidazole Ligands towards Stable Light-Harvesting Cyclometalated Iridium (III) Complexes // Dalton Trans. – 2023. – V. 52. – P. 6435-6450. DOI: 10.1039/D3DT00200D

### 17. Высокоэффективная циркулярно-поляризованная фото- и рентгенолюминесценция бромидных комплексов марганца(II)

Учеными Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения РАН совместно с Новосибирским институтом органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН и Пекинским университетом (Китай) получены новые хиральные тетрабромманганаты(II), проявляющие циркулярно-поляризованную люминесценцию (CPL) с квантовым выходом около 100% и высоким фактором диссимметрии ( $g_{lum} = 0.045$ ). Соединения обладают также эффективной рентгенолюминесценцией с линейной зависимостью отклика от приложенной дозы излучения. Практический потенциал веществ продемонстрирован использованием их в качестве фосфоров для рентгенографической визуализации предметов, а также зеленых CPL светодиодов с УФ-накачкой. Результаты исследования являются основой для дальнейшего дизайна комплексов Mn(II), проявляющих высокоэффективную поляризованную люминесценцию.



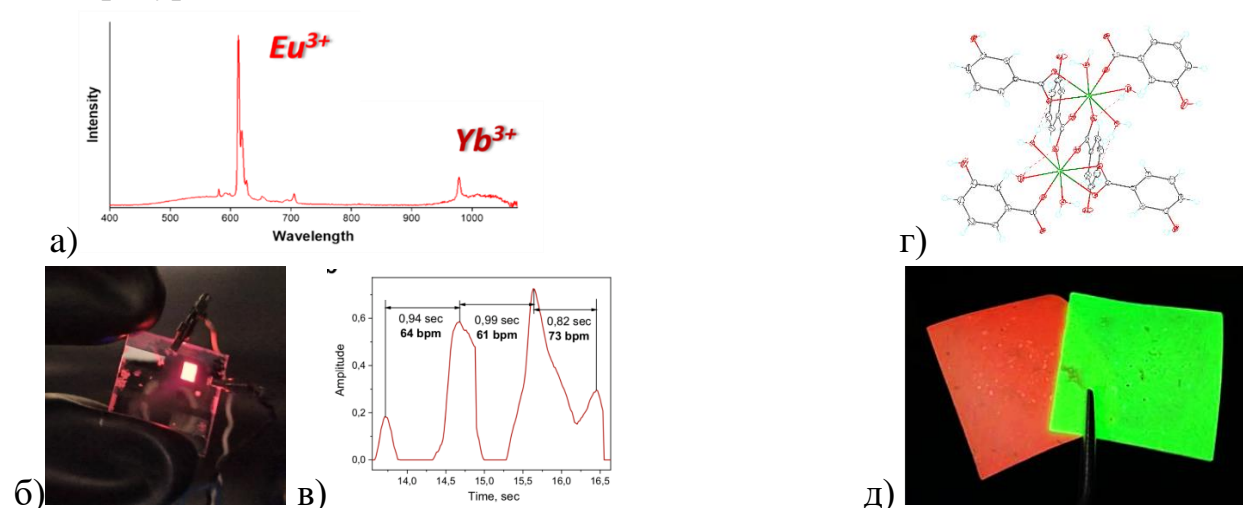
*Руководитель работ – д.х.н. Артемьев А.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)*

*Публикация:*

Davydova M.P., Meng L., Rakhmanova M.I., Bagryanskaya I.Y., Sulyaeva V.S., Meng H., Artem'ev A.V. «Highly Emissive Chiral Mn(II) Bromide Hybrids for UV-Pumped Circularly Polarized LEDs and Scintillator Image Applications».

## 18. Дизайн люминесцирующих координационных соединений лантанидов

Выполнены работы по дизайну люминесцирующих координационных соединений (КС) лантанидов для различных применений, в первую очередь для органических светодиодов (OLED) и люминесцентной термометрии. При создании материалов для OLED ключевым является получение комплексов с коротким временем жизни и оптимизация растворного нанесения. Работа по этим направлениям позволила получить как растворный лантанидный OLED с высокой яркостью, так и первый лантанидный OLED с двойной эмиссией в видимом и ИК диапазоне. В области люминесцентной термометрии работа направлена на получение высокотемпературных термометров на основе КС лантанидов. Получена рекордная чувствительность за счет использования циркулярно-поляризованной люминесценции, а также расширен температурный диапазон до 300 °С.



а) Спектр OLED с двойной эмиссией, б) фотография OLED и в) пульсовая кривая, записанная с его помощью. г) Структура биметаллического гидроксобензоата тербия-европия, использованного для высокотемпературной термометрии, и д) фотография (под УФ) композитных пленок для высокотемпературной термометрии.

*Руководитель работ – д.х.н. Уточникова В.В. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

### Публикации:

Kornikov A.I., Kozlov M.I., Vashchenko A.A., Pavlov A.A., Gordeeva E.O., Latipov E.V., Lepnev L.S., Kozhevnikova V.Yu., Utochnikova V.V. First Dual Red–Near-Infrared Emissive Solution-Processed Organic Light-Emitting Diode Based on Europium–Ytterbium Mixed-Ligand Complexes for Pulse

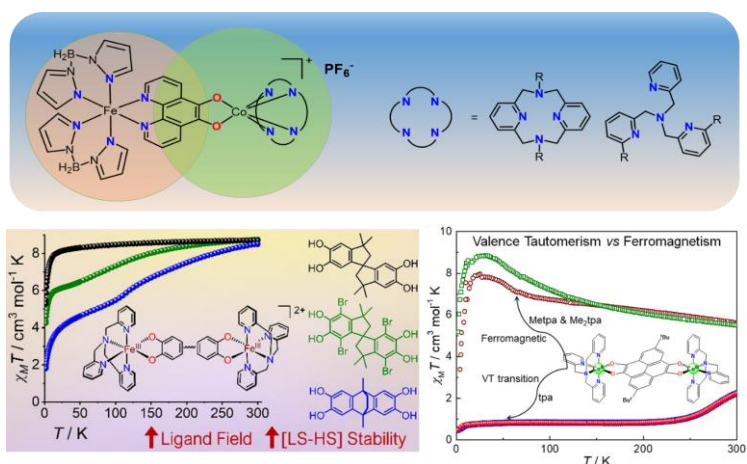
Oximetry // ACS Applied Optical Materials. – 2023. – V.1, №7. – P. 1227-1235.  
DOI: 10.1021/acsaom.3c00124

Kozlov M.I., Vashchenko A.A., Pavlov A.A., Goloveshkin A.S., Latipov E.V., Kuzmina N.P., Utochnikova V.V. The increase of europium-based OLED luminance through reducing the excited state lifetime by mixed-ligand complex formation // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2023. – V.25. – P. 20042-20048. DOI: 10.1039/D3CP02082G

Kozlov M.I., Kuznetsov K.M., Goloveshkin A.S., Burlakin A., Sandzhieva M., Makarov S.V., Ilina E., Utochnikova V.V. Solution-Processed OLED Based on a Mixed-Ligand Europium Complex // Materials. – 2023. – V. 16. – a.n. 959. DOI: 10.3390/ma16030959

## 19. Теоретическое и экспериментальное исследование спин-переключаемых биядерных комплексов Fe и Co на основе редокс-активных лигандов

Систематическое квантово-химическое моделирование гомо- и гетерометаллических биядерных комплексов железа и кобальта с редокс-активными лигандами позволило предсказать соединения, спиновые состояния которых переключаются внешними воздействиями. Синтезированные комплексы железа на основе спиросопряженных бис-катахолов и тетрадентатных N-донорных *tris*(2-пиридилметил)аминовых оснований демонстрируют спин-кроссовер, характер которого определяется силой поля линкерного лиганда. Биядерные комплексы кобальта с пирен-4,5,9,10-тетраоном и вспомогательными N-донорными основаниями в зависимости от заместителей демонстрируют ферромагнитные взаимодействия, в одном из соединений обнаружен валентно-таутомерный переход.



Руководитель работ – д.х.н. Старикова А.А. (Южный федеральный университет)



### **Публикации:**

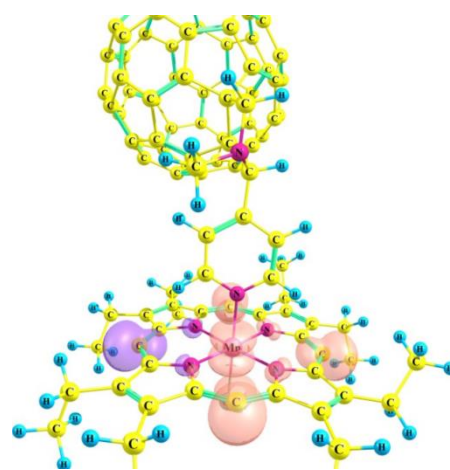
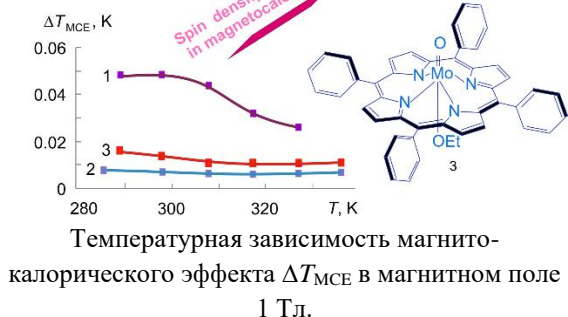
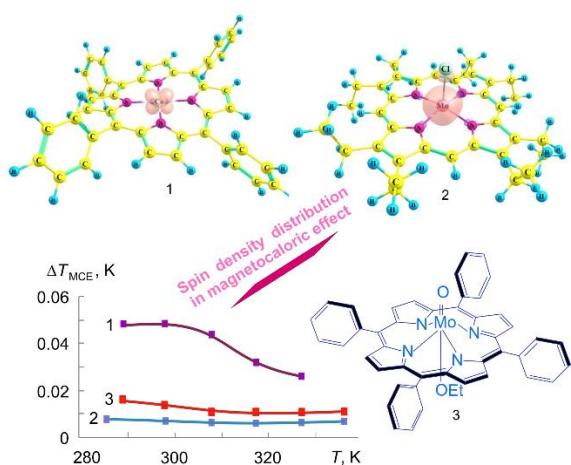
Starikov A.G., Starikova A.A., Shapovalova S.O., Guda A.A., Soldatov A.V., 1,10-Phenanthroline-5,6-dione-bridged FeCo complexes: a DFT investigation of the electroniclability // *StructuralChemistry*. – 2023. – V. 34, №4. – P. 1279-1288. DOI: 10.1007/s11224-022-02077-w

Janetzki J.T., Chegerev M.G., Gransbury G.K., Gable R.W., Clegg J.K., Mulder R.J., Jameson G.N.L., Starikova A.A., Boskovic C. Controlling Spin Crossover in a Family of Dinuclear Fe(III) Complexes via the Bis(catecholate) Bridging Ligand // *Inorganic Chemistry*. – 2023. – V. 62, №38. – P. 15719-15735. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c02598

Wang J.-P., Zhao Y.-M., Yu M., Starikova A.A., Tao J., Tuning the Magnetic Properties of Dinuclear Cobalt-Tetraoxolene Compounds: From Valence Tautomerism to Ferromagnetic Coupling // *Inorganic Chemistry Frontiers*. – 2023. – V. 10 – P. 7251-7264. DOI: 10.1039/D3QI01706K

## **20. Физико-химические основы эффекта центрального атома в магнитокалорических свойствах молекулярных магнитов на основе комплексов порфиринов**

На количественном уровне описана картина влияния внутримолекулярных антиферромагнитных взаимодействий во внешних магнитных полях на величину магнитокалорического эффекта при близких к комнатной температурах в молекулярных магнитах на основе порфириновых комплексов кобальта(II), марганца(III) и оксомолибдена(V), включая комплексы, аксиально координированные с производными нанокремнезема (Рисунок). Прямым микрокалориметрическим методом и ДСК определены соответственно магнитокалорический эффект, термодинамические параметры намагничивания в магнитных полях от 0 до 1 Тл и теплоемкость в нулевых полях. На основе полученных данных с привлечением результатов DFT-расчетов спиновой плотности определено участие центрального иона в спиновом распределении с экваториальными и аксиальными σ-лигандами как определяющего фактора положительного магнитокалорического эффекта в изученных комплексах. Результат имеет значение в области магнитного охлаждения, гипертермии в медицине и робототехнике.



Распределение положительной (розовый) и отрицательной (сиреневый) спиновой плотности в аксиальном комплексе марганец(III) порфирина с 1-метил-2-(пиридин-4'-ил)-3,4-фуллеро[60]пирролидином.

*Руководитель работ – проф., д.х.н. Ломова Т.Н. (Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН)*

### **Публикация:**

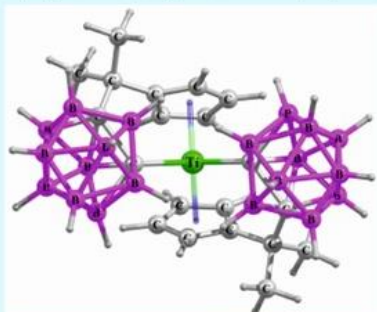
Lomova T.N., Korolev V.V., Ramazanova A.G., Ovchenkova E.N., Bichan N.G., Motorinaand E.V., Tsaturyan A.A. // Polyhedron. – 2023. – V. 236. – a.n. 116384. DOI: 10.1016/j.poly.2023.116384

## **21. Зарядовые характеристики по Малликену и геометрия структурно сложного титаноцена**

Определение заселенностей молекулярных орбиталей и зарядовых характеристик – принципиальная задача в молекулярной фотонике и химии координационных соединений, которая не может быть решена только экспериментально. Впервые систематически – 124 методами разного уровня теории – оценены зарядовые характеристики сложного металлоорганического комплекса и сделан вывод о достоверности результатов расчета в приближении Малликена как исторически наиболее важного метода. Показано, что анализ заселенностей орбиталей по Малликену дает очень противоречивые результаты. Так, в систематической серии из 124 популярных методов (HF, DFT) только 30 на основе высокого базиса QZVP и базисов Попла 6-311G\*\* и 3-21G обеспечили приемлемый анализ зарядовых характеристик целевого титаноценадикарборанила в рамках традиционного подхода Малликена. При этом подавляющее большинство этих же методов хорошо описывают геометрию и дипольный момент металлокомплекса. Показано, что целевой титаноценадикарборанил имеет большой электрический дипольный момент (10–11 Дебай), редкий для

металлоорганических молекул. Работа выполнена в рамках развиваемого авторами проекта направления – молекулярной фотоники  $d^0$  металлокомплексов и их организованных систем.

Только 30 из 124 методов, использующие базисы QZVP и Поппа (6-311G\*\* и 3-21G), предоставили приемлемые результаты:



Метод	$\mu_p$ , Дебай	$q(M)$	$q(Cp)$	$q(Carb)$	$q(>CMe_2)$
HF/QZVP	11.80	+1.43	-0.40	-0.19	-0.13
B3LYP/QZVP	10.52	+1.92	-0.74	-0.02	-0.19
CAM-B3LYP/QZVP	10.88	+1.54	-0.63	+0.10	-0.24
PBE0/QZVP	10.49	+1.41	-0.40	-0.09	-0.22
HF/6-311G**	11.77	+1.64	-0.11	-0.76	+0.05
B3LYP/6-311G**	10.54	+1.32	-0.08	-0.66	+0.08
CAM-B3LYP/6-311G**	10.83	+1.32	-0.07	-0.70	+0.11
HF/3-21G	10.84	+2.07	-0.35	-0.75	+0.06
B3LYP/3-21G	10.18	+1.72	-0.26	-0.62	+0.01
CAM-B3LYP/3-21G	10.39	+1.68	-0.25	-0.62	+0.03
PBE0/3-21G	10.13	+1.85	-0.29	-0.66	+0.02

$q(M)$  – заряд на ионе металла.  $q(Cp)$  – заряд на каждом из двух Cp-лигандов.  $q(Carb)$  – заряд на каждом из двух карборанильных лигандов.  $q(>CMe_2)$  – заряд на каждом из двух  $>CMe_2$  мостиков.

При этом подавляющее большинство методов (HF, DFT) хорошо описывают геометрию и дипольный момент  $d^0$ -титаноцена.

*Руководитель работ – д.х.н. Лукова Г.В. (Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН)*

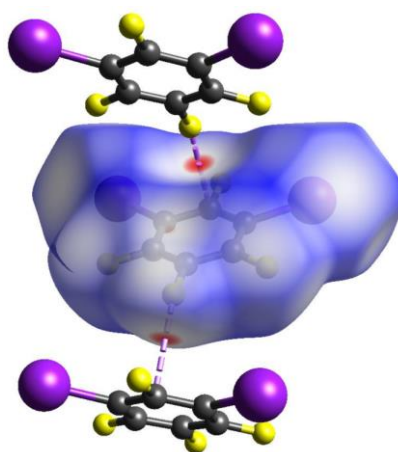
### **Публикации:**

Loukova G., Milov A. Effective computational route to unravel geometry of  $d^0$  organometallics with promising photo-, tribo-, and mechanoluminescent properties // AIP Conference Proceedings. – 2023. – V. 2507. – a.n. 040010-1 – 040010-7. DOI: 10.1063/5.0109351

Лукова Г.В., Милов А.А. Зарядовые характеристики титаноценадикарборанила по методу Малликена // Химия высоких энергий. – 2023. – Т. 57, № 6. – С. 437 - 442. DOI: 10.31857/S0023119323060104

## **22. Кристаллическая упаковка 1,3-дийодтетрафторбензола**

Выполнен сравнительный анализ собственной кристаллической упаковки 1,3-дийодтетрафторбензола (1,3-DITFB) с таковой в его изомерах (1,4-DITFB) и сокристаллах (например, с 4-цианопиридином), что важно для понимания межмолекулярного механизма кристаллообразования. Структурный и расчетный анализ корреляции между температурой плавления и молекулярной симметрией в ряду изомерных DITFB указывает на сложную природу процесса плавления этих соединений.



Поверхность Хиршфилда: короткие контакты F...C в кристалле 1,3-DITFB.

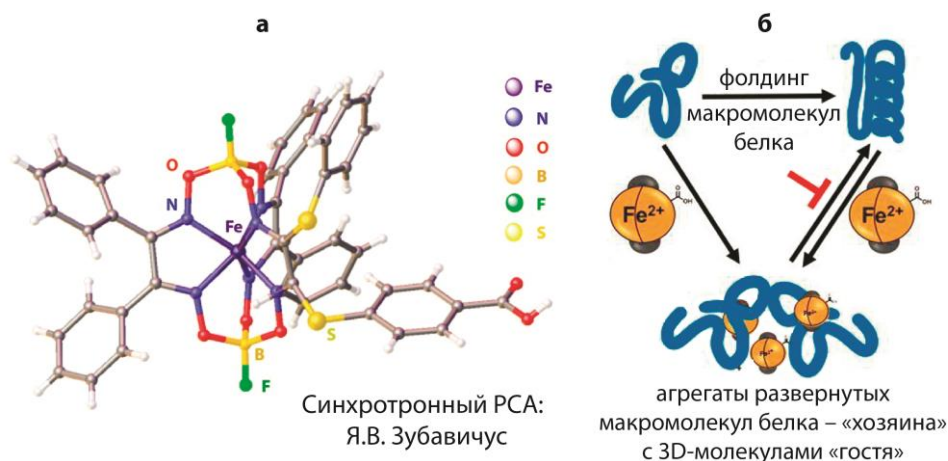
*Руководитель работ к.х.н. Скабицкий И.В. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

**Публикация:**

Torubaev Y.V., Skabitsky I.V. Overlooked Solid State Structure of 1,3-I<sub>2</sub>C<sub>6</sub>F<sub>4</sub>—The Meta-Member of an Iconic Halogen Bond Donors Trio // Crystals. – 2023. – V. 13. – a.n. 1555. DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst13111555>

**23. Новый подход к лекарственной терапии онкологических заболеваний, основанный на сильном супрамолекулярном связывании между 3D-молекулами клатрохелатных комплексов с биорелевантными терминальными группами как «гостей» с развернутыми макромолекулами глобулярных белков как «хозяевами»**

В ряду более двухсот протестированных клатрохелатов железа(II) было обнаружено соединение – лидер (рис. а), которое является перспективным противоопухолевым агентом, действующим по новому механизму, основанному на генерации развернутых глобулярных макромолекул белков. Это низкотоксичное соединение проявило *in vitro* и *in vivo* цитотоксичность по отношению к ряду линий опухолевых клеток и обладает специфичностью по отношению к ним. Высокая противоопухолевая и антиметастатическая активность была показана на трех моделях рака мышей, в то же время, не влияя (по данным *in vivo* экспериментов) на их нормальные клетки. В целом, химически-устойчивые и низкотоксичные клатрохелаты биометаллов являются подходящей 3D-молекулярной платформой для генерации развернутых белковых макромолекул (рис. б), вызывающих стресс эндоплазматического ретикулума в опухолевых клетках и, соответственно, являются перспективными кандидатами (пролекарствами) для лекарственной терапии ряда социально-значимых онкологических заболеваний.



Руководитель работ – проф., д.х.н. Волошин Я.З. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)

### Публикация:

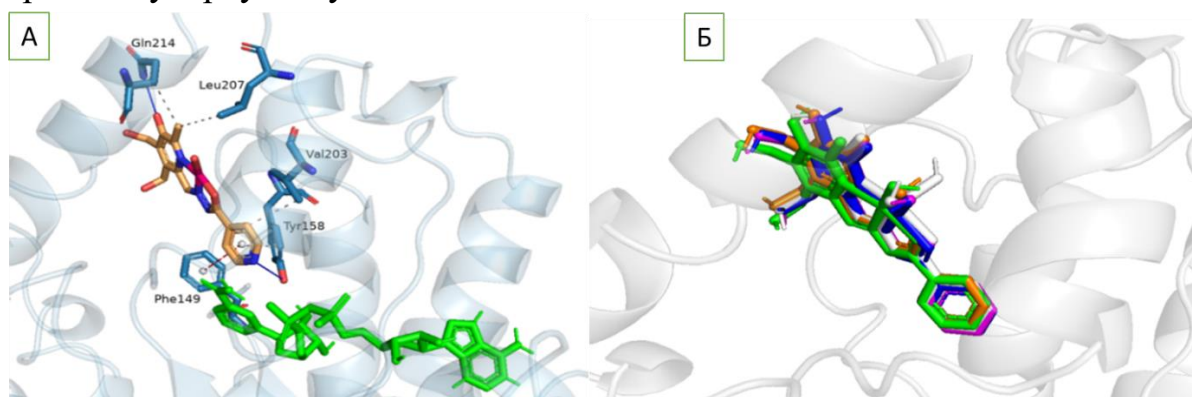
Klemt I., Varzatskii O., Selin R., Vakarov S., Kovalska V., Bilyy R., Voloshin Y., Cossío Cuartero I., Hidalgo A., Frey B., Becker I., Friedrich B., Tietze R., Friedrich R. P., Alexiou C., Ursu E.-L., Rotaru A., Solymosi I., Pérez-Ojeda M. E., Hirsch A., Mokhir A. 3D-shaped binders of unfolded proteins inducing cancer cell specific endoplasmic reticulum stress *in vitro* and *in vivo* // Journal of the American Chemical Society. – 2023. – V.145 – P. 22252 – 22264. DOI: 10.1021/jacs.3c08827

## 24. Разработка комплексных подходов к определению характеристик комплексов переходных 3d-металлов: структуры в растворе и твердом состоянии, термодинамики образования, динамического поведения и биоактивности

Детально изучены бинарные и тройные системы Cu(II) с ароматическими N-донорами и аминокислотами, а также бинарные системы Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) и Zn(II) с новыми производными гидразонов в водных растворах и в кристаллическом состоянии методами pH-потенциометрии, СФ-метрии, РСА, ЯМР, ЭПР, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии и ЯМР-релаксации с широким применением математического моделирования, включая DFT-расчеты и молекулярный докинг. Установлено, что на стабильность и структуру образующихся комплексных частиц влияют многочисленные нековалентные взаимодействия, такие как Н-связи,  $\pi$ - $\pi$  стэкинг,  $d$ - $\pi$  взаимодействия, одиночная электронная пара- $\pi$ -взаимодействия и псевдоэффект Яна-Теллера. Исследованные системы обнаружили реальную



высокую противоопухолевую активность и потенциальную противотуберкулезную активность.



А) Расположение комплекса  $\text{CoL}^{\text{I}}(\text{OH})$  ( $\text{HL}^{\text{I}} - (\text{E/Z})\text{-N}'\text{-}((5\text{-гидрокси-3,4-бис(гидроксиметил)-6-метилпиридин-2-ил)метил)изоникотиногидразид}$ ) в активном центре белка InhA. Б) Наложение полученных в молекулярном докинге комплексов для пяти изученных металлов.

*Руководитель работ – к.х.н. Штырлин В.Г. (Казанский (Приволжский) федеральный университет)*

#### **Публикации:**

Shtyrlin V.G., Serov N.Yu., Bukharov M.S., Gilyazetdinov E.M., Zhernakov M.A., Ahmed M.A., Garifzyanov A.R., Mirzayanov I.I., Ermolaev A.V., Aksenin N.S., Urazaeva K.V., Zakharov A.V. Stereoselective effects, formation thermodynamics, substitution reaction kinetics, and structures of transition metal complexes with bioligands and aromatic N-donors // Russian Chemical Bulletin. – 2023. – V. 72, №. 7. – P. 1485-1498. DOI: 10.1007/s11172-023-3926-7

Ahmed M.A., Zhernakov M.A., Gilyazetdinov E.M., Bukharov M.S., Islamov D.R., Usachev K.S., Klimovitskii A.E., Serov N.Yu., Burilov V.A., Shtyrlin V.G. Complexes of  $\text{Ni}^{\text{II}}$ ,  $\text{Co}^{\text{II}}$ ,  $\text{Zn}^{\text{II}}$ , and  $\text{Cu}^{\text{II}}$  with promising anti-tuberculosis drug: Solid-state structures and DFT calculations // Inorganics. – 2023. – V. 11. – a.n. 167. DOI: 10.3390/inorganics11040167

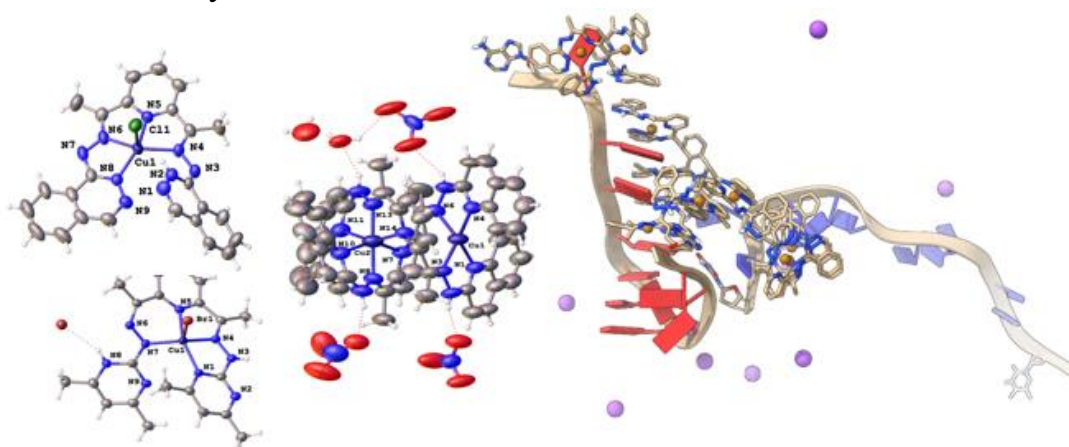
Ermolaev A.V., Shtyrlin V.G., Gizatullin A.I., Zhernakov M.A., Serov N.Yu., Urazaeva K.V., Bukharov M.S., Gilyazetdinov E.M., Islamov D.R., Rodionov A.A., Mirzayanov I.I., Garifzyanov A.R., Kuramshin B.K. Development of comprehensive approaches to characterizing  $\text{Cu}^{\text{II}}$  complexes: structures in solution and solid-state, dynamic behavior, and bioactivity // Chemistry Select. – 2023. – V. 8. – a.n. e202303333. DOI: 10.1002/slct.202303333

## **25. Координационные соединения меди(II) с высокой противораковой активностью**

Синтезированы серии моно- и биядерных комплексов меди на основе бис-гетарилгидразонов 2,6-диацетилпиридина, содержащих биологически



активные гетероциклические фрагменты. Структура и свойства полученных соединений установлены методами ИК-, ЭПР-, электронной, EXAFS/XANES спектроскопии, ЦВА и РСА. Исследование цитотоксических свойств комплексов меди *in vitro* по отношению к линиям раковых клеток Нер2 (карцинома гортани), НерG2 (гепатоцеллюлярная карцинома печени), а также к нормальной линии клеток фиброластов легких человека (MRC-5) продемонстрировали, что все металлохелаты проявляют более высокую активность по сравнению с известными противоопухолевыми препаратами – цисплатином и карбоплатином. Некоторые из синтезированных комплексов характеризуются высоким индексом селективности. Установлено, что цитотоксическая активность и селективность комплексов во многом зависят от природы гетероциклического фрагмента. Исследуемые соединения меди прочно связываются с белком бычьего сывороточного альбумина, что является важным показателем при изучении транспортировки лекарственных препаратов. Исследование механизма взаимодействия комплексов с ДНК раковых клеток методом молекулярно-динамической симуляции показало, что металлохелаты вступают в  $\pi$ -стэкинг взаимодействие преимущественно с адениновыми и тиминновыми основаниями и, в гораздо меньшей степени, с цитозиновыми и гуаниновыми.



Руководитель работ – д.х.н. Щербаков И.Н. (Южный федеральный университет)

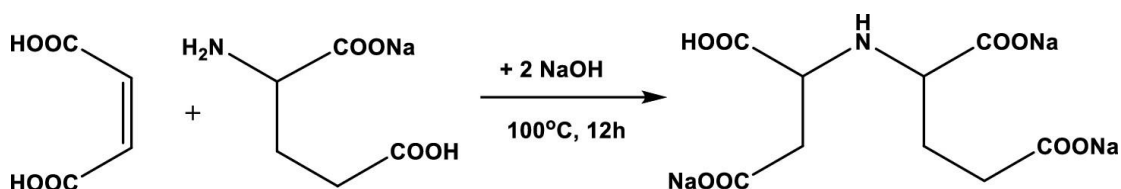
### Публикации:

Tupolova Y.P., Shcherbakov I.N., Popov L.D., Vlasenko V.G., Gishko K.B., Kapustina A.A., Berezhnaya A.G., Golubeva Y.A., Klyushova L.S., Lider E.V., Lazarenko V.A., Minin V.V., Knyazev P.A. Copper coordination compounds based on *bis*-quinolyl hydrazone of 2,6-diacetylpyridine: synthesis, structure and cytotoxic activity // Polyhedron. – 2023. – V. 233. – a.n. 116292. DOI:10.1016/j.poly.2023.116292

Tupolova Y.P., Popov L.D., Vlasenko V.G., Gishko K.B., Kapustina A.A., Berejnaya A.G., Golubeva Y.A., Klyushova L.S., Lider E.V., Lazarenko V.A., Bachurin S.S., Shcherbakov I.N. Crystal structure and cytotoxic activity of Cu(II) complexes with *bis*-benzoxazolyl hydrazone of 2,6-diacetylpyridine // *New Journal of Chemistry*. – 2023. – V. 47. P. – 14972–14985. DOI:10.1039/D3NJ02445H

## 26. Биоразлагаемый комплексообразователь, способный заменить ЭДТА в ряде отраслей народного хозяйства

Синтезирован новый хелатирующий агент (четырёхосновная 4-имино-(3,5-дикарбокси)-октандиовая кислота, ИГЯК или IGSA), который по своим комплексообразующим свойствам не уступает используемому повсеместно ЭДТА, но является при этом биоразлагаемым. Исходными материалами служат доступные многотоннажные продукты, синтез ведется в соответствии с принципами «зеленой химии». На его основе создано комплексное микроэлементное удобрение, которое испытано в серии оранжевых экспериментов на салате-латуке. Сравнение с промышленными аналогами на основе ЭДТА и иминодиянтарной кислоты показало преимущество ИГЯК как при корневой, так и при листовой подкормке. Комплексное удобрение на его основе позволило получить наибольший прирост как размеров листьев, так и их массы.



Руководитель работ – д.х.н. Димиев А.М. (Казанский (Приволжский) федеральный университет)

### Публикации:

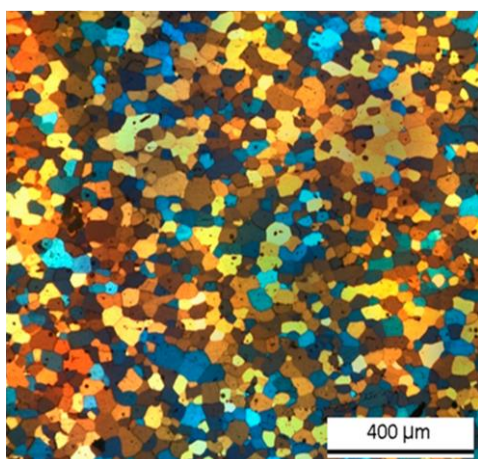
Brusko V., Garifullin B., Geniyatullina G., Kuryntseva P., Galieva G., Galitskaya P., Selivanovskaya S., Dimiev A.M. Novel Biodegradable Chelating Agent for Micronutrient Fertilization // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. – 2023. – V. 71, № 41. – P. 14979-14988. DOI: 10.1021/acs.jafc.3c03500

Димиев А.М., Брусско В.В., Гарифуллин Б.М., Селивановская С.Ю., Курынцева П.А. Применение биоразлагаемого хелатообразующего агента для удобрения микроэлементами // патент РФ № 2796821, опубл. 29.05.2023.

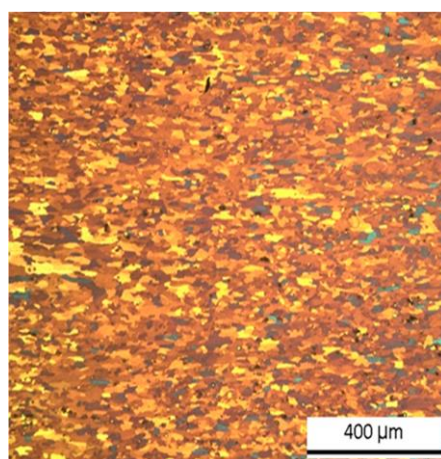
## II. ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

### 1. Влияние легирующих элементов на изменение структуры магниевых алюминиевых сплавов в процессе рекристаллизации и их механические свойства

Исследовано комплексное влияние легирующих элементов (магний, марганец, медь и цирконий) на изменение структуры магниевых алюминиевых сплавов в процессе рекристаллизации, а также на механические свойства. Полученные данные позволили проанализировать изменение химического состава и размеров частиц интерметаллидов и дисперсоидов в зависимости от содержания легирующих элементов. В сплавах, не содержащих других легирующих компонентов, кроме магния, уровень мелкодисперсных компонентов был низким. При добавлении марганца появлялись дисперсоиды типа  $Al_6Mn$  и  $Al_6(FeMn)$ , а при добавлении меди - мелкие частицы, близкие по составу к  $T(Al_{20}Cu_2Mn_3)$  и  $S(Al_2CuMg)$ . Влияние химического состава на процесс рекристаллизации изучено по движущей силе и количеству зародышей рекристаллизации. Так, увеличение содержания магния, марганца и меди повлияло на размер зерна из-за увеличения числа зародышей в результате развития крупных интерметаллических частиц ( $Mg_2Si$ ,  $Al_6(FeMn)$  и  $Al_{20}Cu_2Mn_3$ ). Добавление меди значительно увеличило общее количество интерметаллических частиц и дисперсоидов, что привело к усилению тормозящей рекристаллизацию силы.



5% Mg



5% Mg 0,5% Mn 0,5% Cu

Микроструктура отожженных образцов в зависимости от химического состав.

*Руководитель работ – академик РАН Гречников Ф.В. (Самарский национальный исследовательский университет им. ак. С.П. Королева, Самарский федеральный исследовательский центр РАН)*

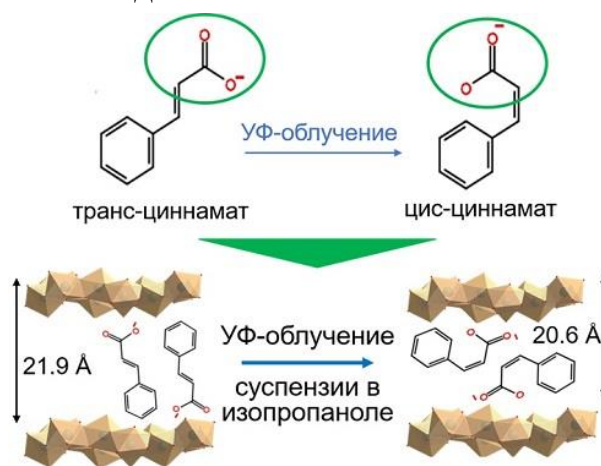
### Публикация:

Aryshenskii, V.; Grechnikov, F.; Aryshenskii, E.; Erisov, Y.; Kononov, S.; Tepterev, M.; Kuzin, A. Alloying Elements Effect on the Recrystallization Process in Magnesium-Rich Aluminum Alloy. *Materials*. – 2023. – V. 15. – a.n. 7062. DOI: 10.3390/ma15207062

## 2. Новый слоистый материал с фотоуправляемой структурой

Исследователи из Института общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН создали слоистый материал, структурой которого можно управлять с помощью света. Новый материал состоит из ультратонких положительно заряженных слоев гидроксида иттрия и встроенных между ними анионов – кислотных остатков коричной кислоты (циннамат-анионов). При облучении ультрафиолетовым светом форма и размер анионов изменяются, что приводит к сжатию структуры гибридного соединения.

Разработка новых способов управления структурой кристаллических соединений с использованием внешних воздействий, например, света, будет способствовать созданию новых материалов с управляемыми свойствами, в том числе, контейнеров для направленной доставки и высвобождения биологически активных соединений.



Вверху: изомеризация циннамат-аниона;

внизу: схема изменения межслоевого расстояния в слоистом гидроксиде иттрия, содержащем циннамат-анионы, при УФ-облучении.

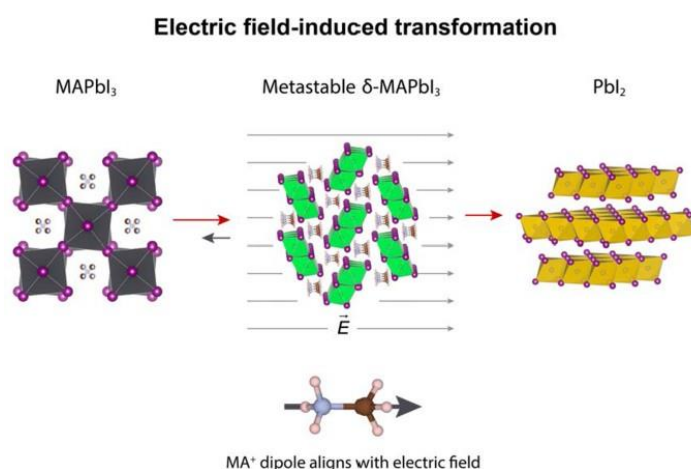
*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Иванов В.К. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

### Публикация:

Teplonogova M.A., Yaprntsev A.D., Baranchikov A.E., Ivanov V.K. Cinnamate Intercalated Layered Yttrium Hydroxide: UV Light-Responsive

### 3. Изучение процесса электрохимической поляризации гибридного свинец содержащего галогенидного перовскита

С использованием методов сканирующей, просвечивающей электронной микроскопии, локального рентгеноструктурного анализа, операндо СКР, GIWAXS впервые *in situ* изучен процесс электрохимической поляризации гибридного свинец-содержащего галогенидно гоперовскита. В ходе работы установлено формирование новых метастабильных фаз при проведении поляризации, что открывает возможность фундаментального переосмысления механизмов деградации и функционирования светопоглощающих слоев гибридных перовскитов в солнечных батареях нового поколения. Тонкие пленки  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  ( $\text{MAPbI}_3$ ) наносились на встречно-штыревые электроды с шагом 1–2 мкм и подвергались поляризации постоянным током (DC). Слой  $\text{MAPbI}_3$ , поляризованный постоянным электрическим полем  $< 0,8$  В/мкм, претерпевает выраженное перераспределение ионов. Вызванная поляризацией потеря как метиламмония, так и йода провоцирует деградацию  $\text{MAPbI}_3$ . С использованием метода наночастицы широкоугольного рассеяния рентгеновских лучей со скользящим падением (GIWAXS), мы однозначно показали, что напряжение смещения индуцирует трансформацию  $\beta$ - $\text{MAPbI}_3$ . Эта трансформация частично обратима при снятии поля. Однако образование  $\delta$ - $\text{MAPbI}_3$  нарушает морфологию первичной пленки и приводит к разложению до  $\beta$ - $\text{MAPbI}_3$  ( $\beta$ - $\text{MAPI}$ ) и  $\text{PbI}_2$ .



Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)

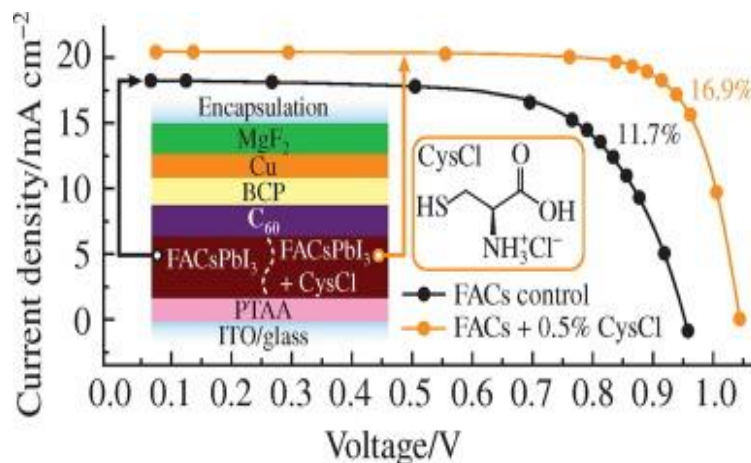


### Публикация:

Grishko A.Yu, Komkova M.A., Marchenko E.I., Chumakova A.V., Tarasov A.B., Goodilin E.A., Eliseev A.A. Evidence for polarization-induced phase transformations and degradation in  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  // Nano Research. – 2023. – V. 16. – P. 9435-9444. DOI: 10.1007/s12274-023-5652-8

### 4. Разработка подходов объемного легирования для улучшения стабильности светопоглощающих слоев гибридных перовскитов

Предложены новые вещества и подходы объемного легирования для улучшения стабильности светопоглощающих слоев гибридных перовскитов в составе функционирующих солнечных ячеек. Показано, что основной причиной повышения стабильности в случае использования гидрохлорида цистеина является благоприятная модификация поверхностного слоя и дефектной структуры гибридного перовскита в приповерхностном слое и на границах зерен.



Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)

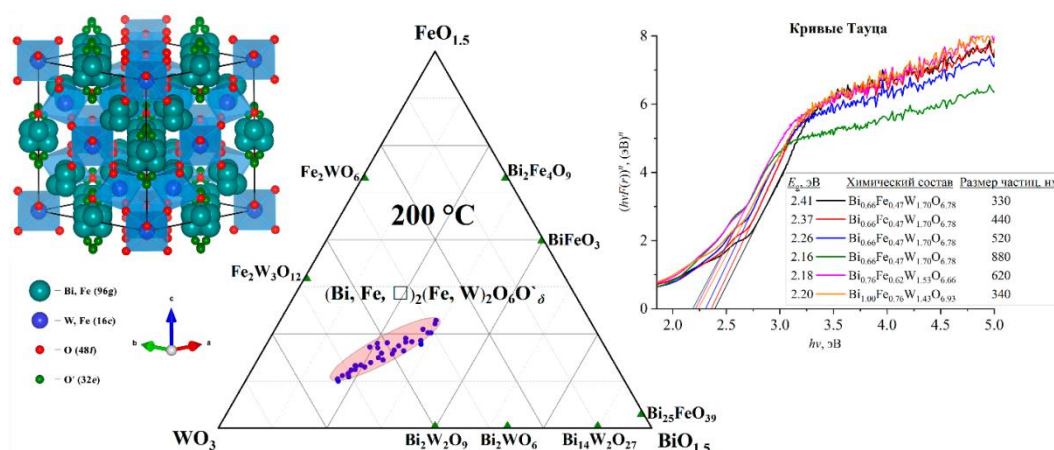
### Публикация:

Udalova N.N., Chertorizhskiy N.N., Nemygina E.N., Trubnikov A.V., Kurkin A.V., Goodilin E.A., Tarasov A.B. Enhancing perovskite solar cells efficiency via bulk passivation of light absorbing material with L-cysteine hydrochloride // Mendeleev Communications. – 2023. – V. 33, № 5. – P. 679-681. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.09.028



## 5. Определение концентрационной и температурной областей устойчивости соединений переменного состава в системе $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3$ с пирохлороподобной структурой

Определена концентрационная и температурная область устойчивости впервые полученных соединений переменного состава в системе  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3$  с пирохлороподобной структурой. Показано, что верхняя температурная граница устойчивости соединений не превышает  $700\text{ }^\circ\text{C}$ , что позволяет синтезировать их только методами мягкой химии. Для получения фаз предложен и запатентован вариант микрореакторного синтеза. Комплексом рентгенодифракционных и мёссбауэровских исследований уточнены структурные параметры пирохлороподобных соединений переменного состава для различного соотношения компонентов в системе  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3$ . Показано, что полученные соединения являются парамагнетиками и полупроводниками с шириной запрещённой зоны, варьирующейся в зависимости от состава и размера частиц от 2.16 до 2.41 эВ.



Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН)

### Публикация:

Lomakin M.S., Proskurina O.V., Abiev R.Sh., Nevedomskiy V.N., Leonov A.A., Voznesenskiy S.S., Gusarov V.V. Pyrochlore phase in the  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3\text{-(H}_2\text{O)}$  system: physicochemical and hydrodynamic aspects of its production using a microreactor with intensively swirled flows // *Advanced Powder Technology*. – 2023. – V.34, (7). – P. 104053. DOI: 10.1016/j.apt.2023.104053

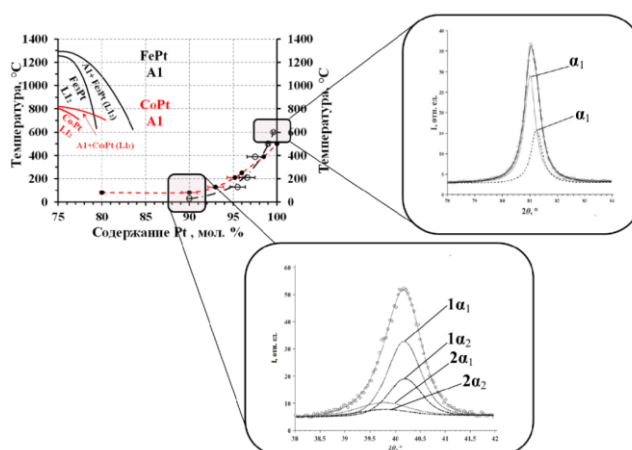
Lomakin M.S., Proskurina O.V., Gusarov V.V. Pyrochlore phase in the  $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3\text{-WO}_3\text{-(H}_2\text{O)}$  system: its formation by hydrothermal synthesis in the

low-temperature region of the phase diagram // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*. – 2023. – V.14, (2). – P. 242-253. DOI 10.17586/2220-8054-2023-14-2-242-253

Абиев Р.Ш., Ломакин М.С., Проскурина О.В., Гусаров В.В. Способ получения порошка сложного оксида висмута, железа и вольфрама со структурой фазы пирохлора с использованием микрореактора с интенсивно закрученными потоками // Патент РФ № 2802703, опубл. 31.08.2023.

## 6. Низкотемпературные особенности структурно-фазовых свойств наноструктурированных FePt и CoPt в области составов, богатых платиной

Используя метод разложения дифракционных рефлексов с использованием функций Пирсон VII, с учетом дублетности  $\alpha_1$ – $\alpha_2$  рентгеновского излучения (вставки *a*, *б*), впервые для наноструктурированных биметаллических сплавов FePt и CoPt были обнаружены в области низких температур структурно-фазовые особенности: непостоянство состава ГЦК–твёрдого раствора CoPt, уменьшающееся до практической ликвидации при нагревании до  $\approx 390$  °С и практически отсутствующая в FePt, и протекающий при температурах выше пороговых для каждого состава FePt и CoPt распад твёрдого раствора на рентгendifракционно наблюдаемый, обогащённый Pt, и дифракционно ненаблюдаемый, обогащённый Fe (Co). Предложенная модель процессов основана на возможности переноса компонент твёрдых растворов в наноразмерных кристаллах в условиях экспериментов (времени, температуры).



Фрагменты фазовых диаграмм FePt, CoPt и установленные в работе верхние (при синтезе) границы образования твердых растворов Fe(Co)-Pt.

*Руководитель работ чл.-корр. РАН Захаров Ю.А. (Федеральный исследовательский центр угля и углекислого СО РАН)*

### **Публикации:**

Zakharov Y.A., Popova A.N., Pugachev V.M., Zakharov N.S., Tikhonova I.N., Russakov D.M., Dodonov V.G., Yakubik D.G., Ivanova N.V., Sadykova L.R. Morphology and Phase Compositions of FePt and CoPt Nanoparticles Enriched with Noble Metal // *Materials*. – 2023. – V. 16, № 23. – a.n. 7312. DOI: 10.3390/ma16237312

Захаров Ю.А., Сименюк Г.Ю., Сергина Т.О., Ларичев Т.А., Пугачев В.М., Додонов В.Г., Зыков И.Ю. Наноструктурированные композиты на основе матриц, полученных из каменноугольного сырья, для создания электродных материалов суперконденсаторов // *Химия в интересах устойчивого развития*. – 2023. – Т. 31, №. 5. – С. 509-523.

## **7. Исследование особенностей миграции водорода по металлическим кластерным центрам платины**

Квантово-химическим методом NEB DFT/PBE0/def2tzvp с построением путей минимальной энергии (MEP) выполнено исследование особенностей миграции водорода по металлическим кластерным центрам Pt<sub>4</sub> и Pt<sub>3</sub>V со сравнительной оценкой возникающих при этом энергетических барьеров, а также определение структур ключевых интермедиатов и продуктов активации молекул H<sub>2</sub> кластерами. Показано, что на платиновых центрах происходит безбарьерная диссоциативная адсорбция молекул H<sub>2</sub>, тогда как на атоме ванадия в Pt<sub>3</sub>V – молекулярная адсорбция водорода с небольшим ослаблением связи H–H, но без ее разрыва. Отмеченные особенности координации молекул H<sub>2</sub> объяснены на уровне метода MO. В процессе миграции водорода выявлена значительная роль мостиковых групп Pt–H–Pt и V–H–Pt, способствующих переносу атомов H от одного металлического центра кластера к другому. В качестве тестовой реакции гидрирования с участием платиновых и платино-ванадиевых кластеров выбран двухэтапный процесс превращения формамида в метиламин. Оценены энергетические барьеры этой реакции, ранее не описанные в литературе. Показано, что основные изменения структурных характеристик реагентов, а также миграция одиночных атомов H инициируются на молекулярном уровне сдвигами, соответствующими векторам нормальных колебаний систем в переходных состояниях.

*Руководитель работ – проф., д.х.н. Буслаева Т.М. (МИРЭА - Российский технологический университет)*

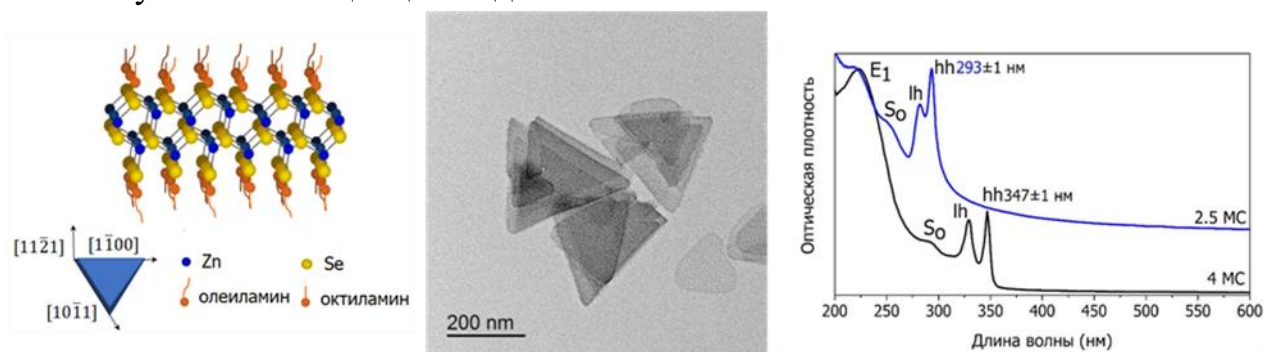
## 8. Исследование низкотемпературного фазообразования в системах из тугоплавких оксидов ( $ZrO_2-In_2O_3$ , $ZrO_2-Sc_2O_3$ ) и фторидов ( $BaF_2-RF_3$ )

С использованием солевых флюсов ( $Na_2SO_4$ ,  $NaNO_3$ ) исследовано низкотемпературное фазообразование в системах на основе тугоплавких оксидов ( $ZrO_2-In_2O_3$ ,  $ZrO_2-Sc_2O_3$ ) и фторидов ( $BaF_2-RF_3$ ). Использование флюсов позволяет резко ускорить достижение равновесия при минимальном уровне катионного загрязнения. Зафиксированы процессы распада (системы  $ZrO_2-In_2O_3$ ,  $BaF_2-LaF_3$ ) и упорядочения (системы  $ZrO_2-Sc_2O_3$ ,  $BaF_2-BaF_2-RF_3$ ,  $R = Pr, Nd$ ) гетеровалентных твердых растворов со структурой типа флюорита. Выявлено несколько кристаллических фаз, ранее не описанных в литературе.

*Руководитель работ – д.х.н. Федоров П.П. (Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН)*

## 9. Новые гибридные 2D полупроводники в системе АПВVI

Разработаны условия синтеза нового класса атомарно-тонких гибридных наноструктур халькогенидов кадмия и цинка [ $M(n+1)E(n)L(2)$ ],  $M$ -Cd или Zn,  $E$  – халькоген,  $L$  – лиганд с толщиной, заданной с точностью один монослой, коллоидным методом. Впервые получены 2D наноструктуры на основе ZnSe толщиной 0.6 нм (2.5 монослоя) при латеральном размере до 800 нм с узкими экситонными полосами в УФ спектральной области. Разработаны подходы к обмену лигандов на поверхности данных двумерных наноструктур, в том числе получены наноструктуры с составом [ $Zn_4Se_3L_2$ ], где  $L$  – лиганд X-типа, что позволило сдвигать спектральное положение экситонных полос поглощения в красную спектральную область, сохраняя экситонную люминесценцию в диапазонах УФ-А и УФ-В.



Схематическое изображение кристаллической структуры атомно-тонкой наноструктуры ZnSe (слева). Обзорное ПЭМ изображение наноструктур ZnSe толщиной менее 1 нм (центр). Спектры поглощения наноструктур ZnSe толщиной 2.4 и 4 монослоя, демонстрирующие узкие экситоны hh, lh, so (справа).

Руководитель работ – проф., д.х.н. Васильев Р.Б. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)

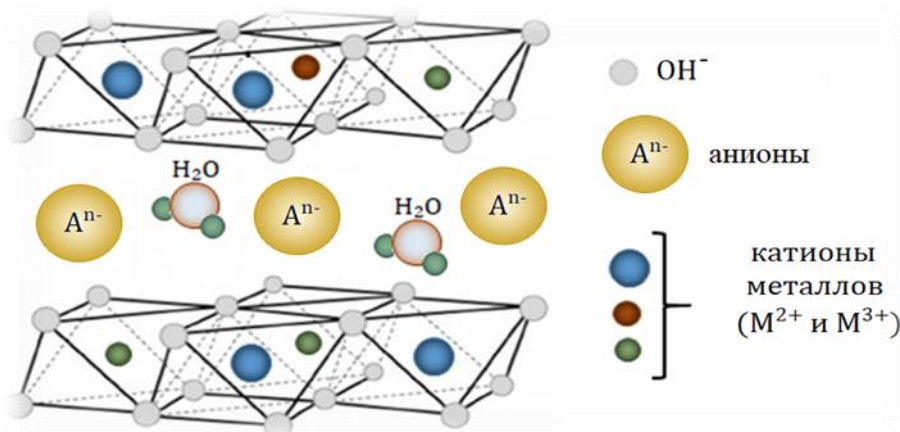
### Публикации:

Kurtina D.A., Grafova V.P., Vasil'eva I.S., Maksimov S.V., Zaytsev V.B., Vasiliev R.B. Induction of Chirality in Atomically Thin ZnSe and CdSe Nanoplatelets: Strengthening of Circular Dichroism via Different Coordination of Cysteine-Based Ligands on an Ultimate Thin Semiconductor Core // *Materials*. – 2023. – V. 16(3). – a.n. 1073. DOI: 10.3390/ma16031073

Basalaeva L.S., Duda T.A., Anikin K.V., Grafova V.P., Vasiliev R.B., Milekhin A.G. Phonons of atomically thin ZnSe nanoplatelets grown by colloidal method // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2023. – V.127, № 27. – P. 13112-13119. DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c02111

## 10. Синтез полного ряда никель-алюминиевых слоистых двойных гидроксидов со структурой гидроталькита

Реализован синтез полного ряда никель-алюминиевых слоистых двойных гидроксидов (СДГ) со структурой гидроталькита, в которых часть катионов алюминия заменена на трехзарядные ионы одного из следующих редкоземельных элементов: церия, празеодима, неодима, самария, европия, гадолиния, тербия, диспрозия, гольмия, эрбия, тулия, иттербия или лютеция. СДГ, содержащие в структуре металл-гидроксидных слоев катионы гольмия или катионы лютеция, синтезированы впервые. Хорошо окристаллизованные образцы получены методом соосаждения с последующей гидротермальной обработкой. Показано, что до 5% катионов алюминия в структуре СДГ могут быть заменены на катионы РЗЭ с сохранением кристалличности образцов.



Структура слоистых двойных гидроксидов.

Руководитель работ – проф., д.х.н. Лебедева О.Е. (Белгородский государственный национальный исследовательский университет)

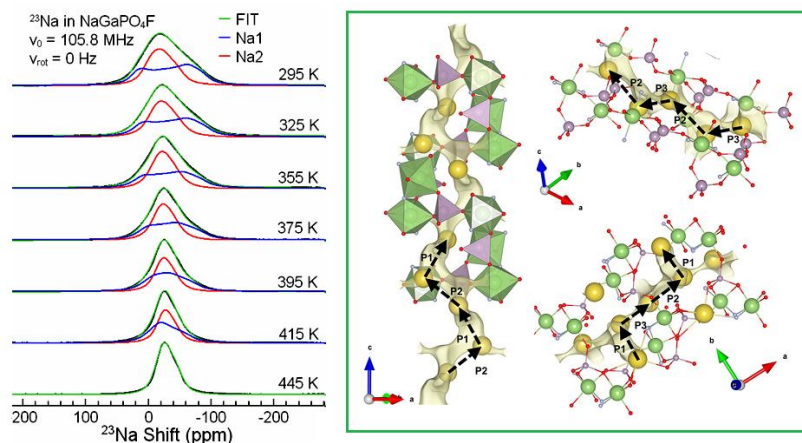


### Публикация:

Головин С.Н., Япрынцев М.Н., Лебедева О.Е. Слоистый двойной гидроксид со структурой гидроталькита состава Ni/Al<sub>2</sub>О<sub>3</sub> // Патент РФ № 2799181, опубл. 04.07.2023, Бюл. № 19

## 11. Исследование диффузии ионов натрия в NaGaPO<sub>4</sub>F со структурой KTiOPO<sub>4</sub>

Впервые исследована диффузия ионов натрия в NaGaPO<sub>4</sub>F со структурой KTiOPO<sub>4</sub>. Исследования ЯМР <sup>23</sup>Na позволили установить наличие быстрой диффузии ионов натрия с частотой элементарных ионных скачков ~10<sup>3</sup>–10<sup>4</sup> с<sup>-1</sup> при T ≈ 300–350 К и энергией активации 0.3–0.5 эВ. Результаты подтверждены результатами *ab initio* расчётов подтверждены результатами *ab initio* расчётов нескольких путей миграции ионов натрия, согласно которым энергетический барьер для диффузии ионов в объёме кристаллической решётки составляет 0.22–0.44 эВ. Установлено, что подвижность ионов натрия сравнима с таковой в соединениях со структурным типом NASICON, поэтому NaGaPO<sub>4</sub>F рассматривается как перспективный твердотельный электролит для натрий-ионных батарей. Работа выполнена совместно с сотрудниками Сколтеха, МГУ и ИФМ УрО РАН.



Эволюция спектров ЯМР <sup>23</sup>Na в соединении NaGaPO<sub>4</sub>F с разложением на составляющие от структурных позиций Na и пути диффузии ионов Na<sup>+</sup>.

Руководитель работ – д.х.н. Денисова Т.А. (Институт химии твердого тела УрО РАН)

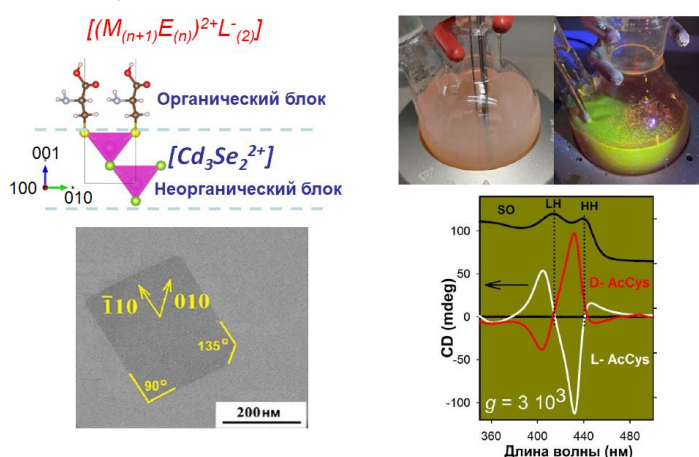
### Публикация:

Marshenya S.N., Dembitskiy A.D., Fedorov D.S., Scherbakov A.G., Trussov I.A., Emelianova O., Aksyonov D.A., Buzlukov A.L., Zhuravlev N.A., Denisova T.A., Medvedeva N.I., Abakumov A.M., Antipova E.V., Fedotov S.S. NaGaPO<sub>4</sub>F



## 12. Исследование индукции хиральности в атомарно тонких нанопластинках ZnSe и CdSe

Обнаружена и исследована индукция хиральности в атомарно тонких (толщиной 0,6–1,2 нм) нанопластинках ZnSe и CdSe, выращенных коллоидным методом и покрытых лигандами L-цистеина и N-ацетил-L-цистеина. Проведенный анализ оптических и хироптических свойств атомарно тонких нанопластинок ZnSe и CdSe показал наличие различных признаков кругового дихроизма для лигандов L-цистеина и N-ацетил-L-цистеина, что подтверждается различной координацией этих лигандов на базальных плоскостях нанопластинок. Максимальное значение коэффициента диссимметрии  $(2-3) \times 10^{-3}$  было обнаружено для лиганда N-ацетил-L-цистеина в случае самых тонких нанопластинок.



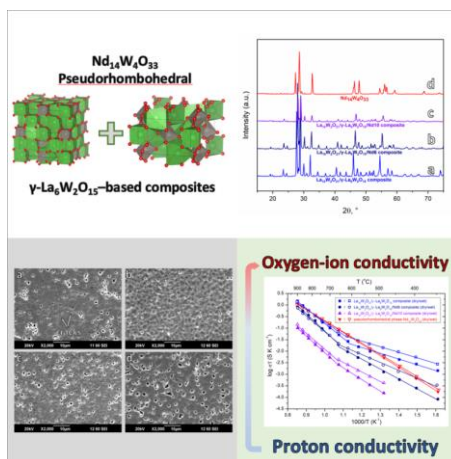
Схематическое изображение структуры атомарно-тонких хиральных полупроводников состава  $[M_{n+1}EnL_2]$ , где  $eM = Zn$  или  $Cd$ ,  $E =$  халькоген,  $L =$  хиральный лиганд, и ПЭМ изображение единичной наноструктуры толщиной менее 1 нм (слева). Фотографии дисперсии наноструктур в ростовом реакторе и их люминесценция. Спектр кругового дихроизма для NH, LH и SO экситонов в D- и L-энантиомерах хиральных наноструктур состава  $[Cd_3Se_2L_2]$ , где  $L = N$ -ацетил- L/D-цистеин (справа).

*Руководитель работ – проф., д.х.н. Васильев Р.Б. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

## 13. Наноструктурированные системы нового поколения с уникальными функциональными свойствами

Поиск новых материалов с высокой протонной и кислород-ионной проводимостью имеет большое значение для развития твердотельной ионики. Изучена структура, фазовые переходы и ионная проводимость чистых и Nd-содержащих композитов на основе  $\gamma$ -La<sub>6</sub>W<sub>2</sub>O<sub>15</sub> и псевдоромбоэдрических фаз La<sub>14-x</sub>Nd<sub>x</sub>W<sub>4</sub>O<sub>33</sub> ( $x = 12, 14$ ). Nd-содержащие

Композиты обладают протонной проводимостью, тогда как псевдоромбоэдрические вольфраматы  $\text{La}_{14-x}\text{Nd}_x\text{W}_4\text{O}_{33}$  ( $x = 12, 14$ ) – кислород-ионные проводники ( $\sigma_{\text{ion}} \sim 4 \times 10^{-4}$  См/см при 700 °С). По данным ДСК и СЭМ, фазовый переход вблизи 910 °С в композитах, приводящий к образованию трещин в керамике, подавляется введением неодима.



Руководители работ – д.х.н. Шляхтина А.В. и проф., д.ф.-м.н. Трахтенберг Л.И. (ФИЦ Химической физики им. Н.Н. Семенова РАН)

#### Публикация:

Shlyakhtina A.V., Baldin E.D., Vorobieva G.A., Kolbanov I.V., Stolbov D.N., Kasyanova A.V., Lyskov N.V. Proton /oxygen ion conductivity ratio of Nd containing  $\text{La}_{10}\text{W}_2\text{O}_{21}/\gamma\text{-La}_6\text{W}_2\text{O}_{15}$  tungstates // International Journal of Hydrogen Energy. – 2023. V.48, №59. – P. 22671-22684. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.03.259

#### 14. Синтез и исследование гексагонального h-WO<sub>3</sub>

Выполнен синтез и установлена перспективность использования гексагонального h-WO<sub>3</sub> в качестве УФ-фотокатализатора для глубокого разложения особо стойкого 1,2,4-трихлорбензола в среде метанола. С использованием квантово-химических DFT расчётов детально изучена взаимосвязь между энтальпией образования и стехиометрией фаз h-WO<sub>3</sub>, интеркалированных катионами аммония, гидроксония и молекулами воды. Установлен механизм действия катализатора, который заключается в активации и использовании растворителя, как жертвенного агента, реагирующего с трихлорбензолом. Глубокая деградация трихлорбензола с разрушением бензольного кольца приводит к образованию гидрокси-

производных и алифатических продуктов. Работа выполнена совместно с сотрудниками ИОС УрО РАН и ИЭФ УрО РАН.

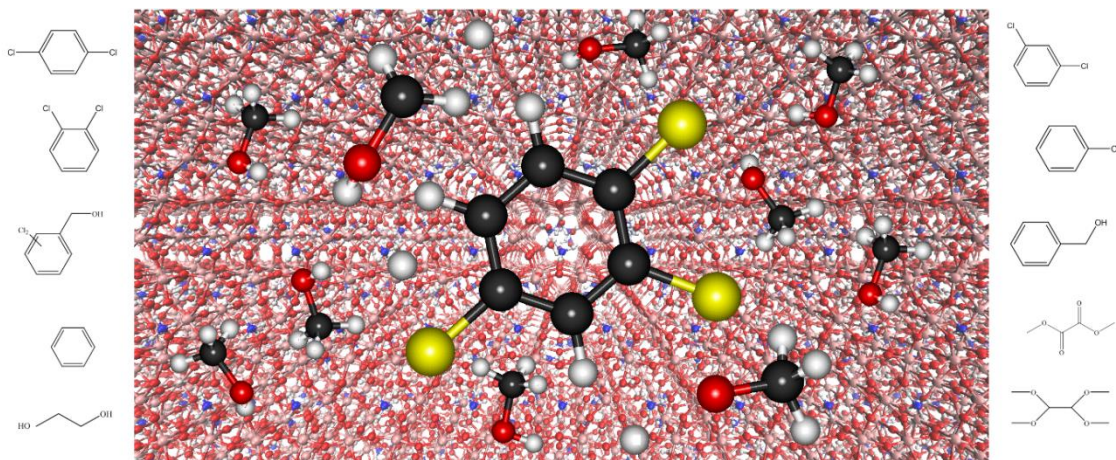


Схема адсорбции молекул метанола на поверхности гексагонального  $WO_3$ .

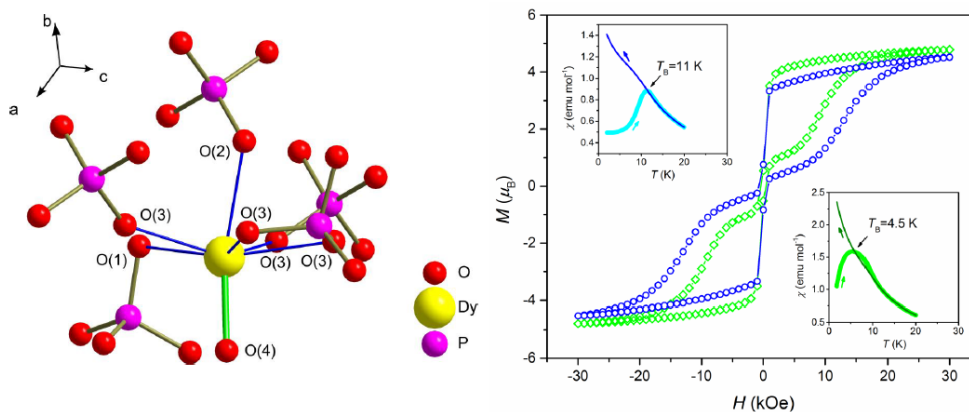
*Руководитель работ – д.х.н. Захарова Г.С. (Институт химии твердого тела УрО РАН)*

**Публикация:**

Zakharova G.S., Podvalnaya N.V., Gorbunova T.I., Pervova M.G., Murzakaev A.M., Enyashin A.N. Morphology-controlling hydrothermal synthesis of h- $WO_3$  for photocatalytic degradation of 1,2,4-trichlorobenzene // Journal of Alloys and Compounds. – 2023. – V. 938. – a.n.168620. DOI:10.1016/j.jallcom.2022.1686201

**15. Исследование образования катиона  $DyO^+$  в кристаллической решетке оксидного неорганического соединения**

Впервые установлено образование в кристаллической решетке оксидного неорганического соединения катиона «диспрозила»  $DyO^+$ , в котором ион кислорода создает сильное аксиальное кристаллическое поле, в результате действия которого на  $f$ -электроны  $Dy^{3+}$  возникает большой энергетический барьер перемагничивания  $U$ , достигающий  $1043\text{ см}^{-1}$  в легированном диспрозием апатите-фосфате стронция, что является рекордным значением для моноионного магнита в неорганической матрице. Впервые ионы кобальта были внедрены в тригональные каналы структуры апатита, в результате чего образовался уникальный изогнутый анион  $[OCoO]^{2-}$ , в котором кобальт(II) имеет координационное число 2 и проявляет свойства моноионного магнита с величиной  $U$ , достигающей  $380\text{ см}^{-1}$  (рекорд для  $d$ -элементов в неорганической матрице).



Фрагмент кристаллической структуры  $M_{10-x}Dy_x(PO_4)_6(OH_{1-x/2})_2$ ,  $M = Ca, Sr$ ,  $x = 0.1 - 1$  (слева) и гистерезисы намагниченности при 1.8 К и температурные зависимости восприимчивости (справа), где  $M = Ca$  (синий и голубой цвета) и  $Sr$  (зеленый цвет).

*Руководитель работ – проф., д.х.н. Казин П.Е. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

#### **Публикация:**

Vasiliev A.V., Sharifullin T.Z., Demidova E.D., Kremer R.K., Kazin P.E. A Dy-based single ion magnet in a SrLaGaO<sub>4</sub> matrix: enhanced parameters in an expanded crystal lattice // Dalton Transactions. – 2023. – V. 52. – P. 17747-17751. DOI: 10.1039/D3DT03387B

## **16. Особенности процессов фазообразования в высокоглиноземистой области системы CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

Исследовано влияние гранулометрического состава прекурсоров на высокотемпературный синтез кальций-алюминатных фаз в высокоглиноземистой области системы CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Установлено, что уменьшение медианного размера зерен  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> до 10 мкм и разрушение сферолитной микроструктуры смещает образование алюминатов кальция в область температур ниже 1250 °С, а также существенно увеличивает скорость их синтеза. Выявлен механизм последовательности образования кальций-алюминатных фаз по типу ядро-оболочка. На основе результатов исследований разработана и внедрена оригинальная промышленная технология получения высокоглиноземистого цемента из импортонезависимых отечественных сырьевых прекурсоров, где варьированием температурных режимов и гранулометрического состава сырьевых ингредиентов в неравновесных условиях обеспечивается стабильный выход продукта с преобладающей долей фазы СА.



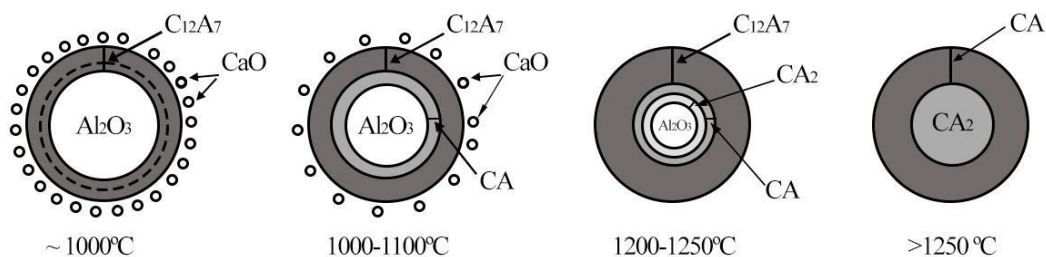


Схема последовательности образования кальций-алюминатных фаз по типу ядро-оболочка.

*Руководитель работ – к.т.н. Трубицын М.А. (Белгородский государственный национальный исследовательский университет)*

### **Публикации:**

Трубицын М.А., Фурда Л.В., Воловичева Н.А., Кузин В.И. Способ получения высокоглиноземистого цемента для низкоцементных огнеупорных литьевых масс // Патент РФ № 2794017; опубл. 11.04.2023, Бюл. № 11

Трубицын М.А., Фурда Л.В., Япрынцева М.Н., Воловичева Н.А., Михайлюкова М.О. Влияние гранулометрического состава прекурсоров на синтез кальций-алюминатных фаз // Журнал прикладной химии. – 2023. – Т. 96, Вып. 3. – С. 269 - 28. DOI: 10.31857/S0044461823030052

## **17. Изучение механизма формирования оксидной пленки на поверхности титановых сплавов**

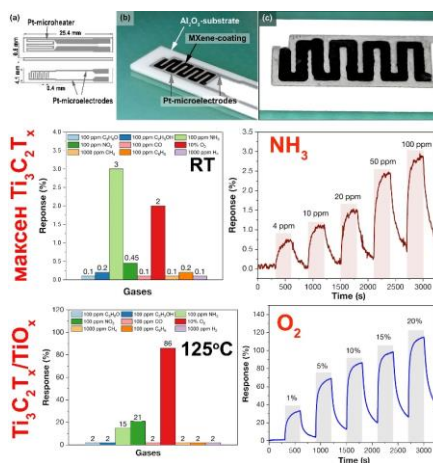
Выполнены работы по изучению механизма формирования оксидной пленки на поверхности титановых сплавов в условиях, моделирующих условия первого контура легководного ядерного реактора. Изучена динамика образования пленки: установлено, что плотная часть оксидной пленки, состоящая из кристаллитов размером до 30 нм, формируется уже через сутки после начала эксперимента. Толщина такой пленки составляет около 100-120 нм. В следующие дни наблюдается рост кристаллитов, входящих в состав пленки, до 60-80 нм к четвертому дню и до 100-120 нм к седьмому дню. Поверх плотносцепленной пленки присутствует "рыхлая" составляющая толщиной около 200 нм. Установлен существенный вклад процесса растворения - осаждения в формирование оксидной пленки: титан переходит в раствор в виде моноядерных оксо/гидрокси/аквакомплексов, в дальнейшем протекает процесс гидролитической полимеризации с образованием димерных и тетрамерных частиц и их осаждение на поверхности сплава. В присутствии железосодержащих конструкционных материалов в растворе наблюдается образование гетероядерных гидроксокомплексов железа и титана.

*Руководитель работ – к.х.н. Скрипкин М.Ю. (Санкт-Петербургский государственный университет)*

### III. НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ, ВКЛЮЧАЯ КОМПОЗИЦИОННЫЕ И НАНОМАТЕРИАЛЫ

#### 1. Разработка методов получения сложных двумерных карбидов $Ti_xV_{2-x}C_{2y}$ и $Ti_3C_2T_x$

Разработаны методы получения сложных двумерных карбидов из класса максенов (как многослойных, так и деламинарованных) с общей формулой  $Ti_xV_{2-x}C_{2y}$  и  $Ti_3C_2T_x$ , изучены их микроструктура, работа выхода электронов с поверхности материалов, термическое поведение, установлена высокая реакционная способность как при окислении в токе воздуха, так и при взаимодействии в водной дисперсии с растворенным кислородом; комплексно исследованы газочувствительные свойства. Показано, что применение максенов в составе нанокompозитов с полупроводниковыми оксидами металлов ( $TiO_2$ ,  $VO_x$ ,  $ZnO$ ) приводит к значительному повышению чувствительности к некоторым газообразным анализам ( $NO_2$ ,  $NH_3$ , ацетон), в том числе при комнатной температуре. Это открывает перспективы применения материалов в составе миниатюрных сенсорных элементов портативных электронных устройств для непрерывного контроля здоровья человека и состояния окружающей среды.



Внешний вид сенсорной подложки и нанесенного методом микроплоттерной печати рецепторного слоя на основе максенов, а также селективность исходного максена  $Ti_3C_2T_x$  и нанокompозита  $Ti_3C_2T_x/TiO_x$ .

*Руководитель работ – академик РАН Кузнецов Н.Т. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

#### **Публикации:**

Mokrushin A.S., Nagornov I.A., Gorobtsov Ph.Yu., Averin A.A., Simonenko T.L., Simonenko N.P., Simonenko E.P., Kuznetsov N.T. Effect of



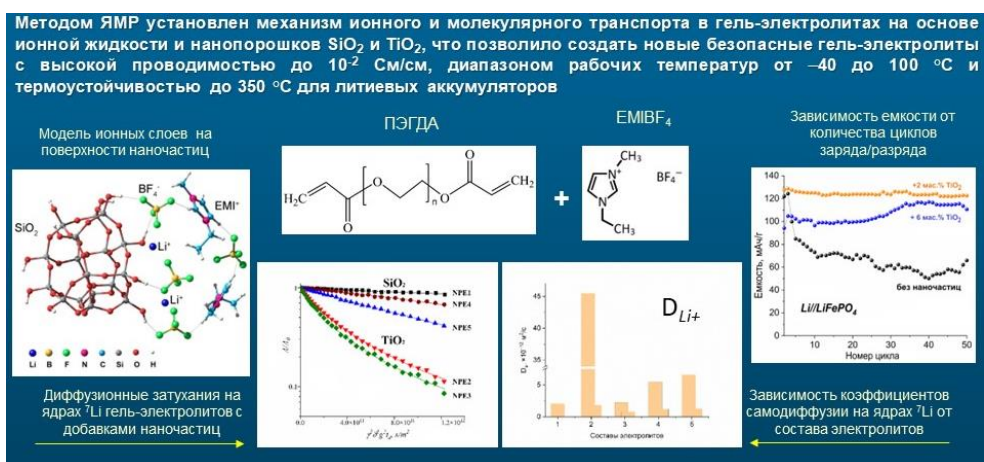
Ti<sub>2</sub>CTx MXene Oxidation on Its Gas-Sensitive Properties // Chemosensors. – 2023. – V. 11, № 1. – a.n. 13. DOI: 10.3390/chemosensors11010013

Mokrushin A.S., Nagornov I.A., Averin A.A., Simonenko T.L., Simonenko N.P., Simonenko E.P., Kuznetsov N.T. Chemoresistive Properties of V<sub>2</sub>CTx MXene and the V<sub>2</sub>CTx/V<sub>3</sub>O<sub>7</sub> Nanocomposite Based on It // Chemosensors. – 2023. – V. 11, № 2. – a.n. 42. DOI: 10.3390/chemosensors11020142

Simonenko E.P., Simonenko N.P., Mokrushin A.S., Simonenko T.L., Gorobtsov Ph.Yu., Nagornov I.A., Korotchenkov G., Sysoev V.V., Kuznetsov N.T. Application of Titanium Carbide MXenes in Chemiresistive Gas Sensors // Nanomaterials. – 2023. – V. 13, №5. – a.n. 850. DOI: 10.3390/nano13050850

## **2. Разработка литий-проводящих нанокompозитных электролитов с введением ионных жидкостей**

Впервые методом ЯМР изучены особенности ионного и молекулярного транспорта в пятикомпонентных электролитных системах на основе полимера (диакрилатаполиэтиленгликоля), растворителя – этиленкарбоната, соли LiBF<sub>4</sub>, ионной жидкости (1-этил-3-метилимидазолия тетрафторборат) и наночастиц SiO<sub>2</sub> (d ~ 7 нм) и TiO<sub>2</sub> (d ~ 21 нм). Методом ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля было обнаружено, что в электролите при одинаковом соотношении основных компонентов в присутствии SiO<sub>2</sub> существует один тип транспорта ионов и молекул, а в присутствии TiO<sub>2</sub> - два (быстрый и медленный), с заселенностью фаз 0.7 и 0.3, соответственно. При увеличении доли растворителя – этиленкарбоната – удалось повысить подвижность катионов лития (на порядок величины), что позволило создать электролиты с преобладающей литиевой проводимостью, конкурирующей с катионами имидазолиевой ионной жидкости и успешно испытать их в прототипе литиевого аккумулятора с LiFePO<sub>4</sub>-катодом. Кроме того, полученные электролиты имеют высокую проводимость в широком температурном интервале (10<sup>-2</sup> См/см при 100 °С, 10<sup>-3</sup> при 20 °С и 10<sup>-4</sup> при -40 °С) и термостабильны до 350 °С, что обеспечивает высокую безопасность аккумулятора в целом.



*Руководитель работ – академик РАН Алдошин С.М. (Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН)*

### **Публикации:**

Slesarenko N.A., Chernyak A.V., Khatmullina K.G., Baymuratova G.R., Yudina A.V., Tulibaeva G.Z., Shestakov A.F., Volkov V.I., Yarmolenko O.V. Nanocomposite Polymer Gel Electrolyte Based on  $\text{TiO}_2$  Nanoparticles for Lithium Batteries // *Membranes*. – 2023. – V. 13. – a.n. 776. DOI: 10.3390/membranes13090776

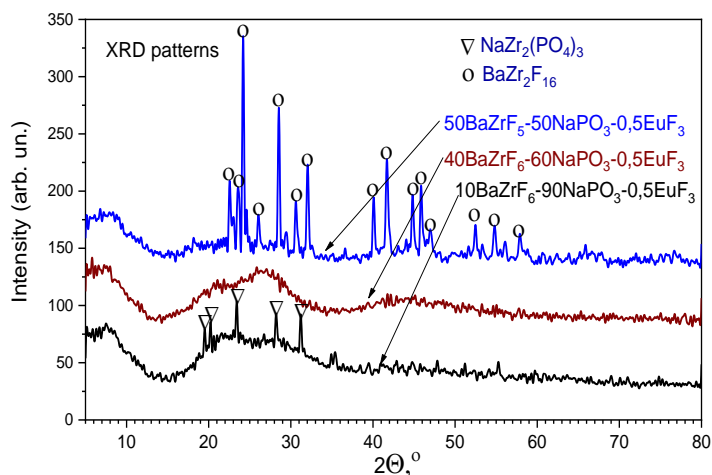
Khatmullina K.G., Slesarenko N.A., Chernyak A.V., Baymuratova G.R., Yudina A.V., Berezin M.P., Tulibaeva G.Z., Slesarenko A.A., Shestakov A.F., Yarmolenko O.V. New Network Polymer Electrolytes Based on Ionic Liquid and  $\text{SiO}_2$  Nanoparticles for Energy Storage Systems // *Membranes*. – 2023. – V. 13, №6. – a.n. 548. DOI: 10.3390/membranes13060548

Yarmolenko O.V., Khatmullina K.G., Baymuratova G.R., Emelianov N.A., Baymuratova R.K., Yudina A.V. Influence of  $\text{TiO}_2$  and  $\text{SiO}_2$  Nanoparticles on the Properties of Polymer Electrolytes Based on Ionic Liquid and Lithium Salt // *High Energy Chemistry*. – 2023. – V. 57. – P. S115–S122. DOI: 10.1134/S0018143923080258

### **3. Стекла и стеклокристаллические образцы системы $\text{BaZrF}_6\text{-NaPO}_3\text{-ErF}_3$ , обладающие люминесцентными свойствами**

Получены стекла и стеклокристаллические образцы системы  $\text{BaZrF}_6\text{-NaPO}_3\text{-ErF}_3$ , обладающие люминесцентными свойствами. Определены соотношения компонентов, при которых формируется стекло, стеклокерамика с кристаллами  $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ , стеклокерамика с включением кристаллических фаз  $\text{Ba}_4\text{Zr}_2\text{F}_{16}$ . Показано, что в стекле формируются две

независимые стеклофазы, фосфатная и фторцирконатная. Трифторид эрбия не влияет на строение стеклофаз в системе, но оказывает влияние на процесс кристаллизации стекла. Присутствие в системе трифторида эрбия обуславливает люминесцентные свойства как полученных стекол, так и стеклокерамик.



Рентгенограммы образцов в системе  $\text{BaZrF}_6 - \text{NaPO}_3 - 0.5\text{EuF}_3$ .

*Руководитель работ – академик РАН Сергиенко В.И. (Институт химии ДВО РАН)*

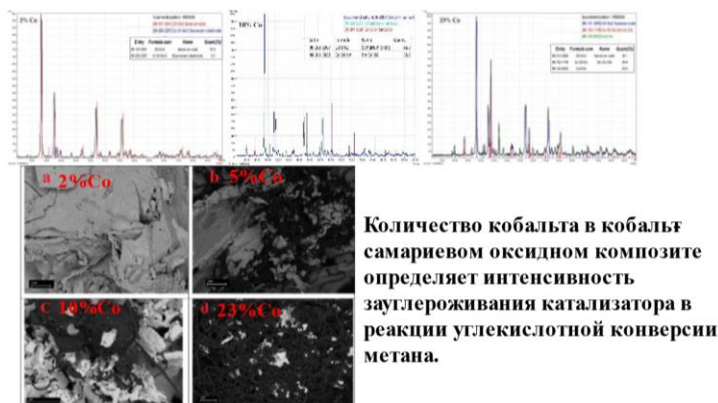
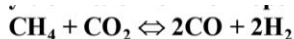
**Публикация:**

Ignatieva L., Marchenko Yu., Mashchenko V., Mirochnik A., Maslennikova I., Goncharuk V., Thermal behavior and photoluminescence properties of glassy objects in the system of  $\text{BaZrF}_6 - \text{NaPO}_3 - \text{EuF}_3$  // Transactions of the Indian Ceramic Society. – 2023. – V. 82, № 3. – P. 239-245. DOI: 10.1080/0371750X.2023.2231499

**4. Синтез кобальт-самариевых оксидных композитов, содержащих от 2 до 23% мас. кобальта**

Синтезированы кобальт-самариевые оксидные композиты, содержащие от 2 до 23% мас. кобальта. Синтез проводился простым выпариванием водных растворов нитратов указанных элементов с последующим прокаливанием порошков при 700-800 °С. В материале, содержащем 2% кобальта, присутствуют фазы кобальтита и оксида самария, образцы с содержанием кобальта 5 и 10% мас. содержат фазы кобальтата и оксида самария, а в образце, содержащем 23% мас. Кобальта, дополнительно присутствует фаза  $\text{Co}_3\text{O}_4$ . Все синтезированные материалы являются эффективными предшественниками катализаторов получения синтез-газа углекислотной конверсией метана, однако характеризуются различной

склонностью к образованию углеродистых отложений. После использования в катализе материалы содержат частицы металлического кобальта, диспергированные в матрице оксида самария. В то же время материал, содержащий 2% кобальта, практически не подвержен зауглероживанию, а в остальных материалах формируются углеродистые отложения, количество которых возрастает пропорционально содержанию кобальта.



*Руководитель работ – академик РАН Дедов А.Г. (Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН)*

#### **Публикации:**

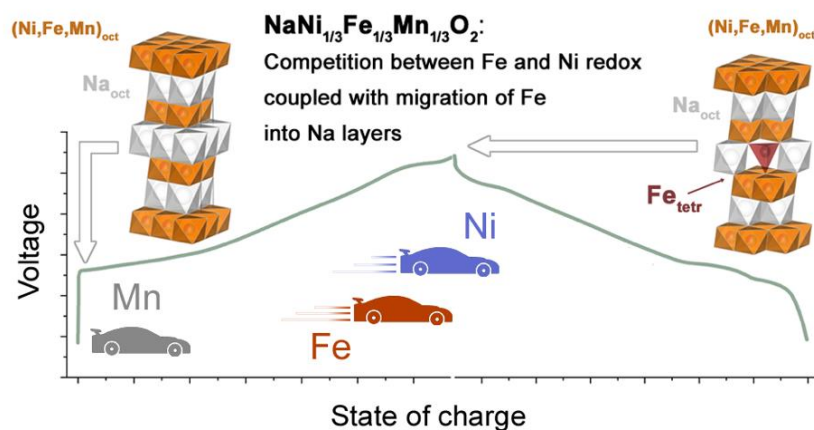
Dedov A.G., Loktev A.S., Arkhipova, V.A., Bykov, M.A., Sadovnikov A.A., Cherednichenko K.A., Shandryuk G.A. A New Approach to the Preparation of Stable Oxide-Composite Cobalt–Samarium Catalysts for the Production of Hydrogen by Dry Reforming of Methane // *Processes*. – 2023. – V. 11, №8. – a.n. 2296. DOI: 10.3390/pr11082296

Локтев А.С., Архипова В.А., Быков М.А., Садовников А.А., Дедов А.Г. Кобальт-самариевый оксидный композит - новый эффективный катализатор кислородной и углекислотной конверсии метана в синтез-газ // *Нефтехимия*. – 2023. – Т. 63, № 1. – С. 88-99. DOI: 10.31857/S0028242123010082

#### **5. Слоистые оксиды $\text{Na}(\text{Ni},\text{Fe},\text{Mn})\text{O}_2$ – перспективные катодные материалы натрий-ионных аккумуляторов**

Учеными Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова и Сколтеха исследовано влияние содержания Fe, Mn и Ni на фазовый состав, структуру, термическую стабильность и электрохимические свойства катодных материалов  $\text{NaNi}_{1/3}\text{Fe}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$  (NFM111),  $\text{NaNi}_{0.5}\text{Fe}_{0.25}\text{Mn}_{0.25}\text{O}_2$  (NFM211),  $\text{NaNi}_{0.25}\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.25}\text{O}_2$  (NFM121) и  $\text{NaNi}_{0.25}\text{Fe}_{0.25}\text{Mn}_{0.5}\text{O}_2$  (NFM112). Все рассмотренные материалы демонстрируют одинаковую разрядную емкость (125 – 131  $\text{mA}\cdot\text{ч}\cdot\text{г}^{-1}$ ) при

заряде-разряде в диапазоне потенциалов 1,9 – 4,0 В по сравнению с Na/Na<sup>+</sup>. Образцы NFM111 и NFM112 демонстрируют минимальное увеличение сопротивления переноса заряда при циклировании и приемлемую термическую стабильность. Низкотемпературные эксперименты показали хорошее сохранение емкости электродного материала NFM111 с потерей емкости всего ~20% при понижении температуры от +25 до -30 °С. Таким образом, оксид NFM111 демонстрирует сбалансированное сочетание электрохимических свойств и наряду с обогащенным марганцем составом может рассматриваться как хороший выбор для дальнейшей разработки катодных материалов для натрий-ионных аккумуляторов. Также были изучены фазовые и зарядовые переходы в слоистом оксидном материале NaNi<sub>1/3</sub>Fe<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>O<sub>2</sub>(NFM111). Выявлена последовательность окислительно-восстановительных переходов во время заряда/разряда O<sub>3</sub>-NaNi<sub>1/3</sub>Fe<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>O<sub>2</sub>. Полученные данные показывают, что, помимо окисления катионов никеля и железа до M<sup>4+</sup>, часть железа переходит в состояние «3+δ» за счет быстрого электронного обмена Fe<sup>3+</sup> + Fe<sup>4+</sup> ↔ Fe<sup>4+</sup> + Fe<sup>3+</sup>. При охлаждении до 35 К этот процесс подавляется, и на спектрах появляется компонента, отвечающая катионам Fe<sup>4+</sup>, мигрировавшим в тетраэдрические позиции. Очевидно, эта миграция приводит к деградации емкости при циклировании материала в широком окне потенциалов.



*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Антипов Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

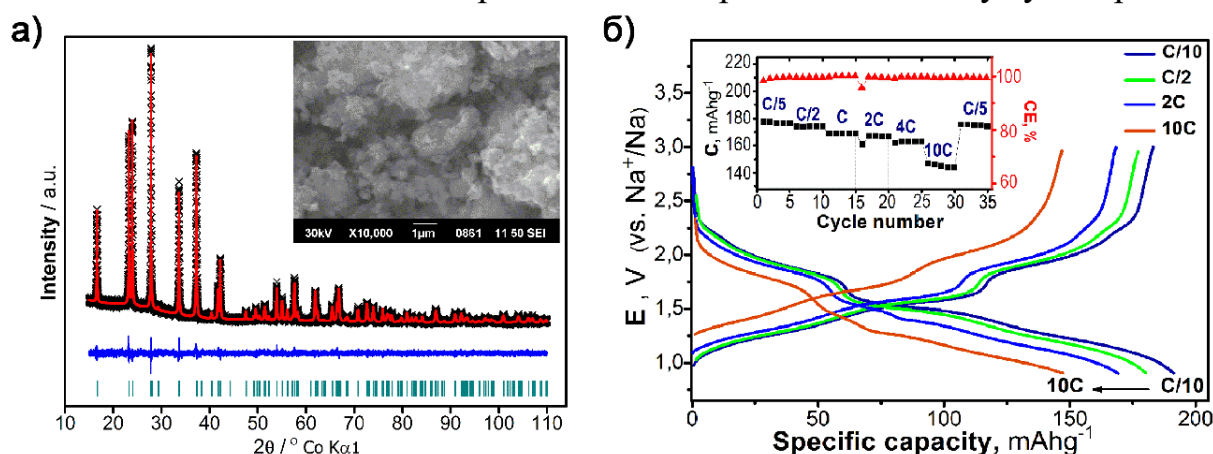
**Публикация:**

Shevchenko V.A., Glazkova I.S., Novichkov D.A., Skvortsova I., Sobolev A.V., Abakumov A.M., Presniakov I.A., Drozhzhin O.A., and E. V. Antipov Competition between the Ni and Fe Redox in the O<sub>3</sub>-NaNi<sub>1/3</sub>Fe<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>O<sub>2</sub>. Cathode Material for Na-Ion Batteries. Chemistry of Materials. 2023. – V. 35(10). – P. 4015-4025. DOI: 10.1021/acs.chemmater.3c00338



## 6. Новый анодный материал для натрий-ионных аккумуляторов

Разработан новый электродный материал  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  со структурой NASICON. Для его ополучения использовали золь-гель метод Печини, что позволило значительно снизить температуру отжига и получить композит  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3/\text{C}$  с субмикронным размером частиц (400-600 нм). Полученный материал демонстрирует обратимую удельную емкость  $\sim 170$  мАч/г за счет протекания многоэлектронных окислительно-восстановительных процессов, соответствующих redox-парам  $\text{Nb}^{5+}/\text{Nb}^{4+}$ ,  $\text{Nb}^{4+}/\text{Nb}^{3+}$  и  $\text{V}^{3+}/\text{V}^{2+}$ , которые были подтверждены в ходе XANES эксперимента в *operand* режиме. Исследование структурных превращений с привлечением *operand* и *ex situ* рентгеновской дифракции выявило асимметричный механизм внедрения/извлечения натрия, включающее обратимые фазовые переходы с умеренным изменением объема. Обратимое внедрение натрия происходит в узком диапазоне потенциалов (средний рабочий потенциал 1.55 В отн.  $\text{Na}^+/\text{Na}$ ), что делает возможным его применение в качестве анода натрий-ионных аккумуляторов. Рабочее напряжение  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  исключает возможность выделения натрия на высоких скоростях циклирования, обеспечивая тем самым преимущество перед углеродными анодами.  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  может быть отнесен к высокомоощным электродным материалам: он способен стабильно работать на высоких скоростях циклирования до 10С (время разряда 6 минут) с сохранением более 75% от первоначальной удельной емкости. С учетом привлекательных токонесущих характеристик, величины рабочего потенциала и высокой удельной емкости  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  может быть отнесен к высокомоощным анодным материалам для натрий-ионных аккумуляторов.



а) Результаты уточнения кристаллической структуры  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  методом Ритвельда, на вставке представлена микрофотография СЭМ; б) гальваностатические кривые  $\text{NaNbV}(\text{PO}_4)_3$  на разных скоростях циклирования, на вставке представлены величины емкостей на различных плотностях тока.

Руководитель работ – чл.-корр. РАН Антипов Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)

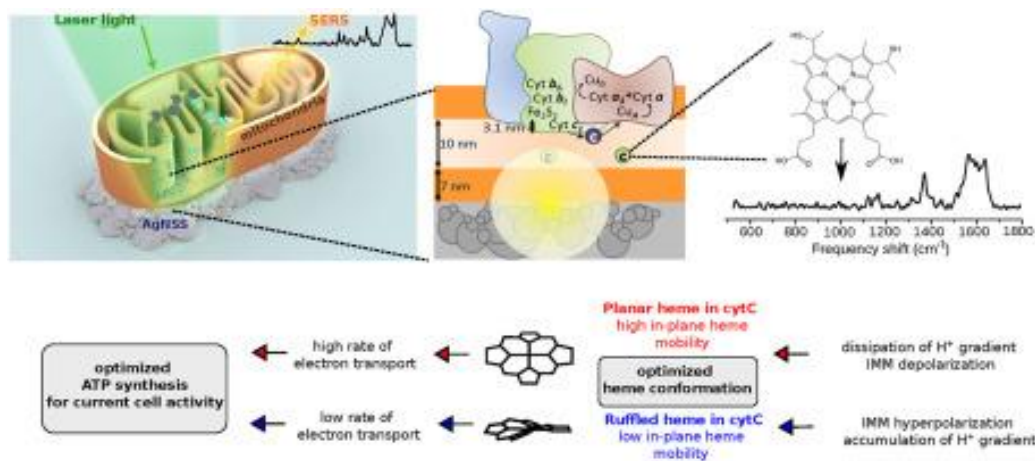


### **Публикация:**

Khasanova N.R., Panin R.V., Cherkashchenko I.R., Zakharkin M.V., Novichkov D.A., Antipov E.V. NaNbV(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>: Multielectron NASICON-Type Anode Material for Na-Ion Batteries with Excellent Rate Capability // ACS Applied Materials and Interfaces. – 2023. – V. 15, № 25. – P. 30272-30280

## **7. Разработка методов получения наноструктурированных материалов на основе серебра для использования в области спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния интактных биологических объектов**

Рассмотрены новые методы получения наноструктурированных материалов на основе серебра для использования в области спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния интактных биологических объектов. Установлены особенности функционирования дыхательной цепи митохондрий у лабораторных животных с различными нарушениями сердечно – сосудистой деятельности, с повышенным кровяным давлением и ожирением. Разработан новый сенсор, который использует уникальные свойства безметочной рамановской спектроскопии с поверхностным усилением (SERS) для идентификации конформационных изменений гема цитохрома С и выяснения их роли в функционировании митохондрий. Показано, что колебания связей в молекулах, оцениваемые методом SERS, являются надежным индикатором конформации гема при изменении потенциала внутренней мембраны митохондрий и активности ЭТЦ. Продемонстрировано обратимое переключение гема цитохрома между «planar» и «ruffled» конформациями в ответ на потенциал внутренней мембраны митохондрий ( $\Delta\Psi$ ) и концентрацию  $H^+$  в межмембранном пространстве. Это регулирует эффективность дыхательной цепи митохондрий, подстраивая митохондриальное дыхание под потребление клеткой АТФ и общую активность. Обнаружено, что в условиях гипертензии гем цитохрома С теряет чувствительность к  $\Delta\Psi$ , что может влиять на регуляцию активности ЭТЦ. Способность предлагаемого сенсора на основе SERS отслеживать функцию митохондрий открывает широкие перспективы в клеточной биоэнергетике.



*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

**Публикация:**

Brazhe N.A., Nikelshparg E.I., Baizhumanov A.A., Grivennikova V.G., Semenova A.A., Novikov S.M., Volkov V.S., Arsenin A.V., Yakubovsky D.I., Evlyukhin A.B., Bochkova Z.V., Goodilin E.A., Maksimov G.V., Sosnovtseva O., Rubin A.B., SERS uncovers the link between conformation of cytochrome c heme and mitochondrial membrane potential // Free Radical Biology and Medicine. – 2023. – V. 196. – P. 133-144. DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2023.01.013

**8. Подходы к использованию порошковых прекурсоров типа для получения ион – проводящих керамических электролитов**

Предложены новые подходы использования порошковых прекурсоров с мультимодальным распределением кристаллических и / или аморфных фаз типа NASICON на основе  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$  для получения ион – проводящих твердых (керамических) электролитов с целью их использования во вторичных источниках тока с улучшенными характеристиками. Показано, что постадийная оптимизация процессов керамического синтеза приводит к перспективным результатам в области разработки материалов электрохимической энергетики.

*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

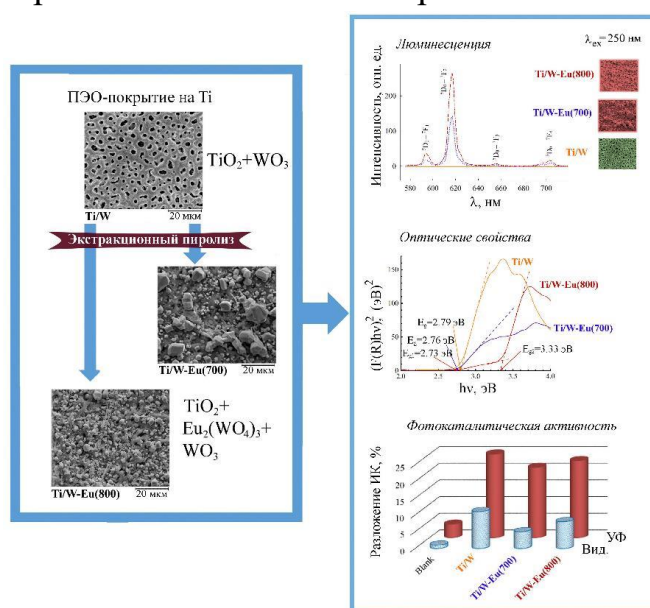
**Публикация:**

Xu X., Kirianova A.V., Evdokimov P.V., Liu Ya., Jiao X., Volkov V.S., Goodilin E.A., Veselova I. A., Putlayev V.I., Kapitanova O.O.  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$

ceramicelectrolytefabricated from bimodalpowder precursor // Journal of the European Ceramic Society. – 2023. – V.43, № 14. – P. 6170-6179. DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2023.06.057

## 9. Получение пленочных композитов $\text{Ti}/\text{TiO}_2\text{-WO}_3\text{-Eu}_2(\text{WO}_4)_3$

Показано, что сочетание плазменно-электролитического оксидирования и экстракционного пиролиза является эффективным методом получения пленочных композитов  $\text{Ti}/\text{TiO}_2\text{-WO}_3\text{-Eu}_2(\text{WO}_4)_3$ , обладающих уникальными люминесцентными свойствами и являющихся перспективными материалами для фотокатализа.  $\text{Eu}(\text{III})$  придает композитам люминесцентные свойства в красной области спектра, которые усиливаются с увеличением температуры предварительного отжига материала.



СЭМ изображения поверхности (слева) вольфрамсодержащих ПЭО-покрытий на титане (композит  $\text{Ti}/\text{W}$ ) до и после трехкратного нанесения органической пасты экстракта европия (композиты  $\text{Ti}/\text{W-Eu}(700)$  и  $\text{Ti}/\text{W-Eu}(800)$ ) после отжига на воздухе в течение 2 ч при 700 и 800 °С, соответственно, а также свойства композитов (справа): люминесцентные, оптические (графики Тауца для определения ширины запрещенной зоны) и фотокаталитические (степень разложения индигокармина через 3 ч облучения образцов УФ и видимым светом).

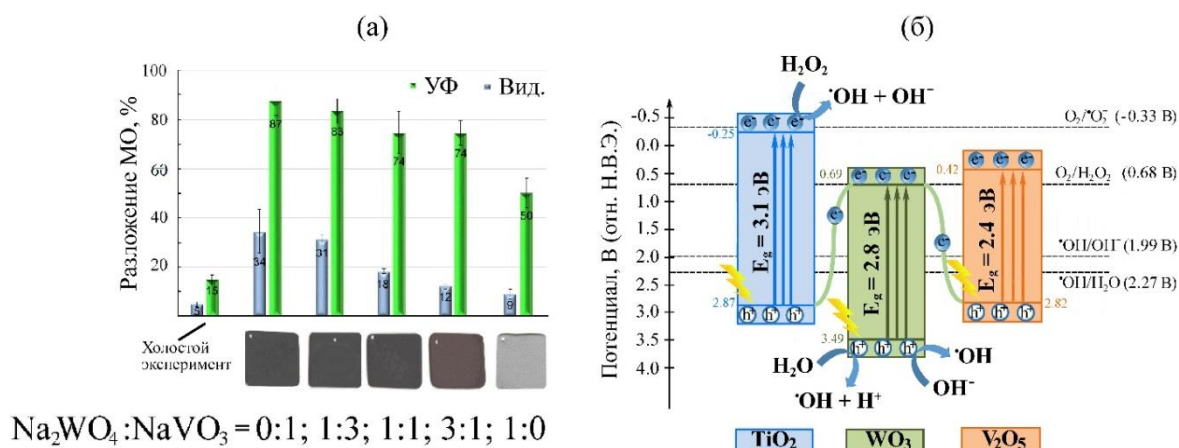
*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гнеденков С.В. (Институт химии ДВО РАН)*

### Публикация:

Lukiyanchuk I.V., Vasilyeva M.S., Steblevskaya N.I., Belobeletskaya M.V., Ustinov A.Yu., Tkachev V.V., Budnikova Yu.B., Rybalka A.A., Sergeeva K.A.  $\text{TiO}_2\text{-WO}_3\text{-Eu}_2(\text{WO}_4)_3$  film heterostructures: Synthesis, luminescent, optoelectronic and photocatalytic properties // Journal of Alloys and Compounds. – 2023. – V. 955. – a.n. 170318. DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.170318

## 10. Формирование стабильных оксидных пленочных фотокатализаторов на титановом носителе

Методом плазменно-электролитического оксидирования на титановом носителе сформированы стабильные оксидные пленочные фотокатализаторы, активные в деградации красителя метилового оранжевого (10 мг/л МО) в нейтральной среде под действием УФ и видимого излучения в присутствии перекиси водорода (10 ммоль/л  $\text{H}_2\text{O}_2$ ). Для получения металлоксидных структур использован водный электролит на основе гексафосфата натрия ( $\text{Na}_6\text{P}_6\text{O}_{18}$ ), содержащий ванадат ( $\text{NaVO}_3$ ) и вольфрамата натрия ( $\text{Na}_2\text{WO}_4$ ) в различных соотношениях. Установлено, что ванадий (до 10.5 ат. %) и вольфрам (до 5.2 ат. %) внедряются в поверхностные слои пропорционально их концентрациям в электролите. По мере замены ванадия вольфрамом ширина запрещенной зоны  $E_g$  V-содержащих композитов уменьшается от 2.22 до 1.97 эВ, в то время как для W-содержащих композитов (без V)  $E_g=3.19$  эВ. Одновременно происходит снижение фотоактивности композитов (от 87 до 50% и с 32 до 9% при 3-часовом УФ и видимом облучении) и увеличение их стабильности за счет снижения выщелачивания ванадия в раствор. Показано, что для формирования фотоактивных и стабильных композитов оптимальным является электролит с соотношением  $\text{Na}_2\text{WO}_4:\text{NaVO}_3 = 1:3$ . Рассмотрен механизм фотокаталитического действия композитов смешанных композитов  $\text{Ti}/\text{TiO}_2\text{-V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3$  с установлением роли перекиси водорода.



Степень разложения красителя метилового оранжевого на композитах  $\text{Ti}/\text{TiO}_2\text{-V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3$ , сформированных методом ПЭО в электролитах с различным отношением  $\text{Na}_2\text{WO}_4:\text{NaVO}_3$  (а); двойная Z-схема для объяснения механизма фотокаталитического действия смешанных композитов (б).

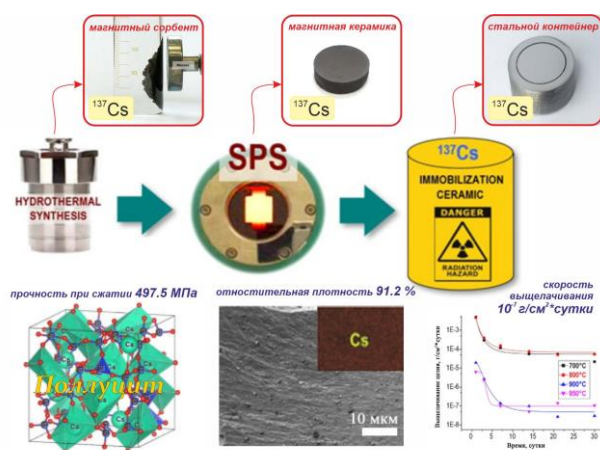
Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гнеденков С.В. (Институт химии ДВО РАН)

## Публикация:

Lukiyanchuk I.V., Vasilyeva M.S., Yarovaya T.P., Nedozorov P.M., Tkachev V.V., Ustinov A.Yu., Budnikova Yu.B., Parotkina Yu.A. Photoactive  $\text{TiO}_2\text{-V}_2\text{O}_5\text{-WO}_3$  film composites immobilized in titanium phosphate matrix by plasma electrolytic oxidation // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. – 2023. – V. 445. – a.n. 115047. DOI: 10.1016/j.jphotochem.2023.115047

## 11. Разработка синтеза наноструктурированного алюмосиликатного сорбента магнитного типа

Предложен оригинальный синтез наноструктурированного алюмосиликатного сорбента магнитного типа для сорбции радионуклидов цезия из жидких сред и разработан эффективный способ его отверждения искровым плазменным спеканием (ДВФУ совместно с ИХТРЭМС РАН и с ИОНХ НАН Беларуси). Способ обеспечивает высокоскоростное (минуты) формирование высококачественной минералоподобной керамики структуры Fe-замещенного поллуцита  $\text{CsFeSi}_2\text{O}_6$  с аномально низкой скоростью выщелачивания цезия из его объема ( $10^{-7}\text{-}10^{-8}$  г/см<sup>2</sup>·сутки). Отвержденная форма отработанного сорбента в виде керамической матрицы соответствуют требованиям ГОСТ Р 50926-96 и ISO 6961:1982 для отвержденных форм отходов, содержащих радиоактивный цезий, и может быть интегрирована в объем стальных контейнеров для надежного захоронения или использования в конструкции радиоизотопных источников.



Общая схема получения магнитного сорбента и его керамической формы на основе поллуцита с иммобилизованным цезием, для надежной изоляции в герметичном контейнере и захоронения.

Руководитель работ – чл.-корр. РАН Тананаев И.Г. (Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского научного центра РАН)

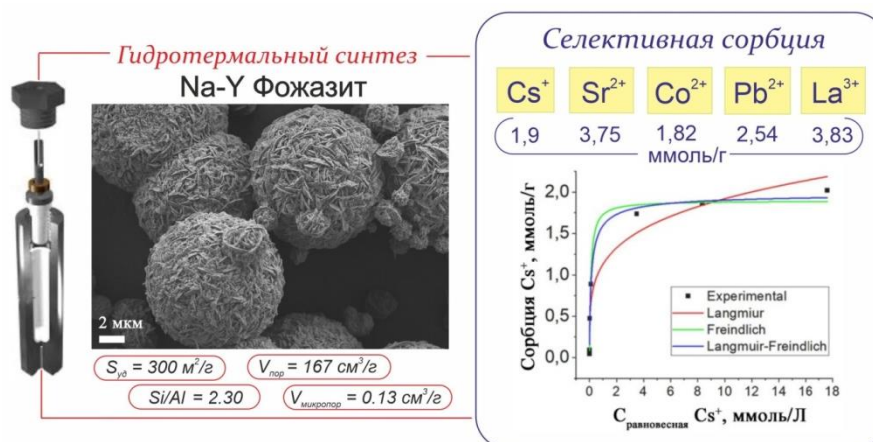


### Публикация:

Papynov E.K., Shichalin O.O., Belov A.A., Pechnikov V.S., Ognev A.V., Shkuratov A.L., Buravlev I.Y., Dvornik M.I., Chigrin P.G., Vlasova N.M., Fedorets A.N., Azon S.A., Kapustina O.V., Lembikov A.O., Nepomnyushchaya V.A., Kornakova Z.E., Gridasova E.A, Tananaev I.G., Shi Y., Ivanets A.I. Solidification of cesium containing magnetic zeolite sorbent by spark plasma sintering // Materials Chemistry Physics. – 2023. – V. 302. – P. 127648. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2023.127648

## 12. Синтез и адсорбционные свойства кристаллического алюмосиликата микромезопористой структуры фожазита

Синтезирован кристаллический алюмосиликат микромезопористой структуры Фожазита с микросферической морфологией частиц размером 1-4 мкм и развитой площадью поверхности 370 м<sup>2</sup>/г. Оценена сорбционная эффективность материала и проведено моделирование изотерм адсорбции ионов металлов Cs<sup>+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup>, Pb<sup>2+</sup>, La<sup>3+</sup>, представляющих собой потенциальные источники токсичного и радиоактивного загрязнения водных сред. Доказано, что синтетический материал имеет высокую сорбционную емкость согласно моделям изотерм Ленгмюра, Фрейндлиха, Ленгмюра-Фрейндлиха и представляет перспективу в качестве универсального сорбента для обеспечения селективной очистки водных сред от радионуклидов <sup>137</sup>Cs, <sup>90</sup>Sr, <sup>60</sup>Co, извлечения тяжелого металла Pb<sup>2+</sup>, а также концентрирования ценного РЗЭ в виде La<sup>3+</sup>. Дополнительно доказана эффективность перевода отработанного сорбента в керамическую отвержденную форму для потенциального длительного и безопасного захоронения. Работа выполнена в ДВФУ совместно с ИХТРЭМС РАН и ИОНХ НАН Беларуси.



РЭМ изображение микросферического алюмосиликата структуры Фожазита и его адсорбционные характеристики по отношению к потенциальным радиоактивным и токсичным загрязнителям, а также ценным редкоземельным металлам.



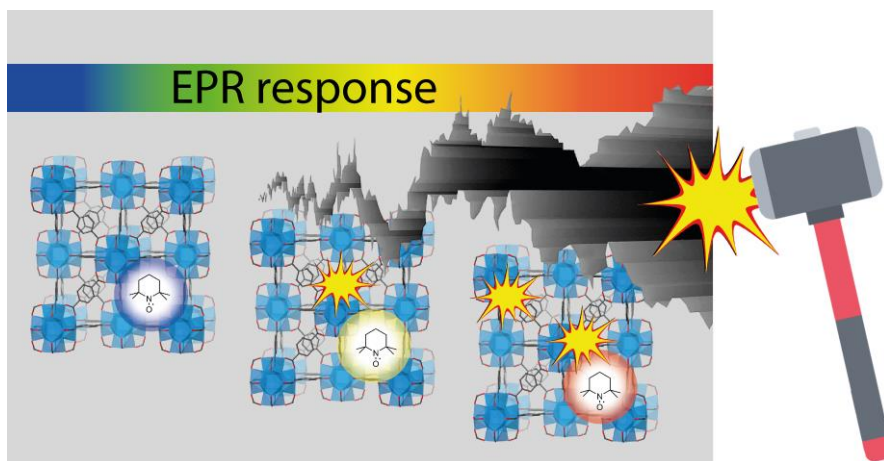
*Руководители работ – к.х.н. Папынов Е.К. (Дальневосточный федеральный университет) и чл.-корр. РАН Тананаев И.Г. (Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского научного центра РАН)*

**Публикация:**

Shichalin O.O., Papynov E.K., Ivanov N.P., Balanov M.I., Dran'kov A.N., Shkuratov A.L., Zarubina N.V., Fedorets A.N., Mayorov V.Yu., Lembikov A.O., Yun Shi, Tananaev I.G., Ivanets A.I. Study of adsorption and immobilization of Cs<sup>+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup>, Pb<sup>2+</sup>, La<sup>3+</sup> ions on Na-Faujasite zeolite transformed in solid state matrices // Separation and Purification Technology. – 2023. – V. – 332. – a.n. 125662. DOI: 10.1016/j.seppur.2023.125662

**13. Металл-органический координационный полимер UiO-66 с инкапсулированным спиновым зондом: синтез и исключительная чувствительность к механическому давлению**

Разработка подходов для исследования распределения механических нагрузок в различных материалах является актуальной задачей. Перспективным “сенсором”, который может быть внедрен в материалы различной природы являются металл-органические координационные полимеры (МОКП) благодаря их уникальной возможности претерпевать структурные перестройки в широком диапазоне механических давлений. Однако остается открытым вопрос как определять структурные перестройки МОКП неразрушающими методами. Учеными Центрального института «Международный томографический центр» СО РАН и Института катализа имени Г.К. Борескова СО РАН совместно представлен высокочувствительный сенсор механического давления на основе МОКП UiO-66, содержащего следовые количества инкапсулированного в полости спинового зонда (0,03 мас. %). Определение структурных перестроек системы UiO-66 возможно с помощью спектроскопии электронного парамагнитного резонанса и позволяет отслеживать деградацию дефектной структуры МОКП при достаточно низких давлениях (<0,1 ГПа). Разработанный подход может быть использован *in* и *ex situ* анализа механических напряжений, а также для неразрушающего картирования распределения механических нагрузок в различных материалах.



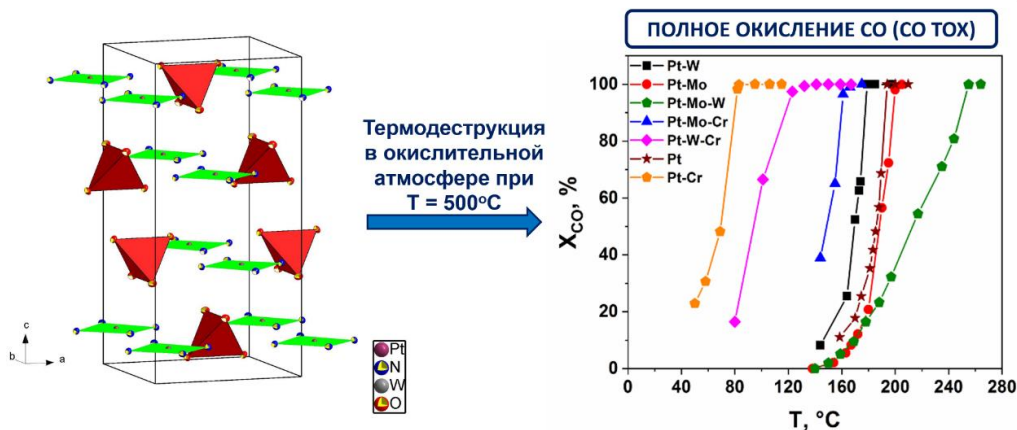
*Руководитель работ – профессор РАН, д.ф.-м.н. Федин М.В. (Центральный Институт «Международный томографический центр» СО РАН)*

**Публикация:**

Poryvaev A.S., Larionov K.P., Albrekht Y.N., Efremov A.A., Kiryutin A.S., Smirnova K.A., Evtushok V.Y., Fedin M.V. UiO-66 Framework with an Encapsulated Spin Probe: Synthesis and Exceptional Sensitivity to Mechanical Pressure // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2023. – V. 25. – P. 13846-13853. DOI: 10.1039/D3CP01063E

**14. Перспективные катализаторы на основе платины для реакции окисления монооксида углерода**

Получены эффективные катализаторы в системах Pt–Cr/Mo/W для промышленно значимой реакции окисления CO. Комплексные соли, содержащие в составе одновременно два металла, один из которых благородный, являются перспективными предшественниками для получения наноразмерных биметаллических частиц. Выбор центральных атомов и лигандного окружения позволяет контролировать соотношение между металлами, а при термическом разложении таких соединений возможно варьировать различные параметры (температура, скорость нагрева, атмосфера термодеструкции), что влияет на состав и морфологию конечных продуктов и открывает широкие возможности для получения наночастиц с требуемыми свойствами. Работа выполнена совместно с ИК СО РАН, НГУ, НГТУ.



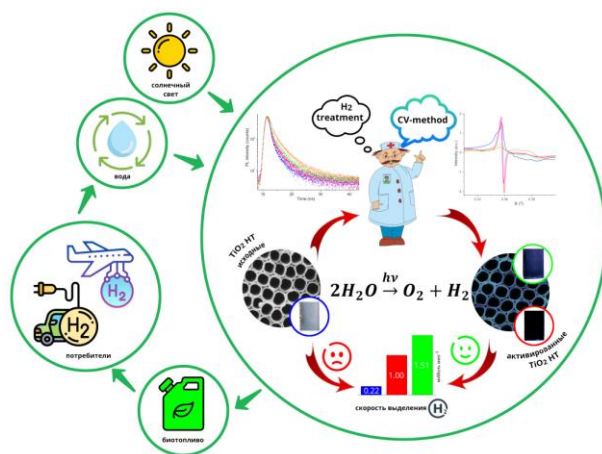
*Руководитель работ д.х.н. Корнев С.В. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)*

### **Публикация:**

Lagunova V., Filatov E., Plyusnin P., Kostin G., Urlukov A., Potemkin D., Korenev S. Metal-oxide catalysts for CO TOX and PROX processes in the Pt–Cr/Mo/W systems // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2023. – V.8, №64. – a.n. 25133 DOI: 10.1016/j.ijhydene.2022.09.086

## **15. Новый метод активации нанотрубок TiO<sub>2</sub> для повышения эффективности выделения H<sub>2</sub> в реакции фотоэлектрохимического разложения воды под видимым светом**

Предложено использовать метод циклической вольтамперометрии как способ активации фотоанодов TiO<sub>2</sub> для увеличения фотоактивности в УФ и видимом диапазоне спектра. Методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и фотолюминесценции (ФЛ) исследовано поведение специфических дефектов до и после активации анодных нанотрубок TiO<sub>2</sub>. Активация методом ЦВА приводит к уменьшению концентрации дефектов, способствующих рекомбинации носителей зарядов, снижению безызлучательной рекомбинации, увеличению времени жизни электрона. Эти данные коррелирует с высокой фотоэлектрокаталитической активностью в реакции разложения воды (выделения водорода). При длине волны 400 нм скорость выделения водорода после активации ЦВА в 0,5М Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> увеличилась 6,8 раза.



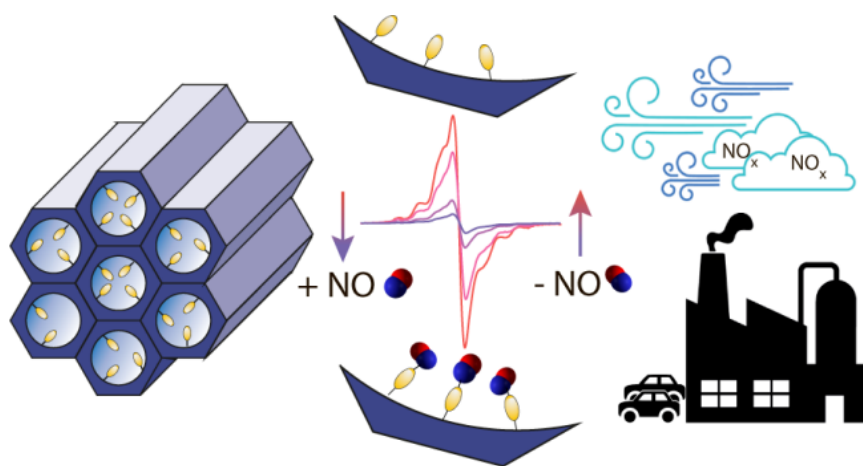
Руководитель работ – д.х.н. Таран О.П. (Институт химии и химической технологии СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН)

**Публикация:**

Zos'ko N.A., Aleksandrovsky A.S., Kenova T.A., Gerasimova M.A., Maksimov N.G., Taran O.P. // Cyclic Voltammetry as an Activation Method of TiO<sub>2</sub> Nanotube Arrays for Improvement of Photoelectrochemical Water Splitting Performance // ChemPhotoChem. – 2023. – V. 7, №. 9. – a.n. e202300100. DOI: 10.1002/cptc.202300100

**16. Новые перспективные материалы для сорбции оксида азота NO из воздуха**

Оксиды азота – токсичные газы, присутствующие в атмосфере и оказывающие нежелательное воздействие на здоровье человека и окружающую среду. В данной работе мы предлагаем новый тип мезопористых материалов, способных улавливать монооксид азота (NO) из воздуха. Разработанный материал сочетает в себе стабильный каркас из диоксида кремния SBA-15 и ультрастабильные радикалы типа Блаттера, действующие как ловушки NO. Используя *in situ* спектроскопию электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), было продемонстрировано, что улавливание NO из воздуха является селективным и обратимым в естественных условиях, что делает диоксид кремния с нанесенными радикалами Блаттера весьма перспективным для экологических приложений.



*Руководитель работ – профессор РАН, д.ф.-м.н. Федин М.В. (Центральный Институт «Международный томографический центр» СО РАН)*

**Публикация:**

Poryvaev A.S., Gjuzi E., Yazikova A. A., Polyukhov D.M., Albrekht Y.N., Efremov A.A., Kudriavykh N.A., Yanshole V.V., Hoffmann F., Fröba M., Fedin M.V. Blatter Radical-Decorated Silica as a Prospective Adsorbent for Selective NO Capture from Air // ACS Applied Materials and Interfaces. – 2023. – V. 15 – P. 5191-5197. DOI: 10.1021/acsami.2c19183

**17. Синтез и исследование физико-химических свойств органо-неорганических гибридных молекулярных систем**

В рамках исследований, посвященных дизайну, синтезу и исследованию физико-химических свойств органо-неорганических гибридных молекулярных систем получена серия уникальных молекулярных гибридов, состоящих из функционализованного полиоксованадата, несущего два золотоорганических фрагмента с различным лигандным окружением атома Au(I). Вольтамперные характеристики этих гибридов были измерены на поверхности Au(111) в составе монослойного покрытия, при этом была продемонстрирована их беспрецедентная способность принимать большое количество электронов, а также их функционирование в качестве переключаемых молекулярных резисторов. Эти результаты представляют интерес с точки зрения разработки устройств памяти на основе молекулярной электроники с высокой емкостью данных. В рамках выполнения работ, связанных с созданием и изучением гибридных молекулярных систем на основе металлорганических комплексов переходных металлов, синтезирована серия комплексов Pt(II), несущих на

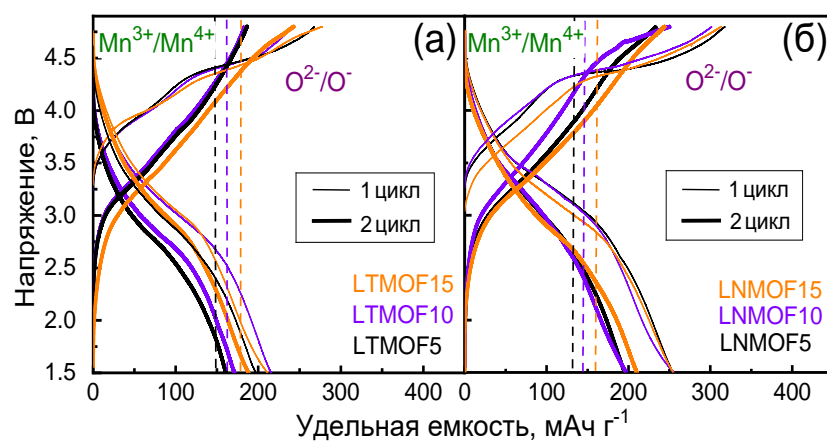
периферии лигандного окружения фосфониевые группы. Эти комплексы представляют собой уникальные металлорганические триплетные D-π-A люминофоры и демонстрируют люминесцентные свойства, которые реагируют на внешние условия.

*Руководитель работ – проф., д.х.н. Грачева Е.В. (Санкт-Петербургский государственный университет)*

### **18. Синтез и исследование свойств новых многоэлектронных катодных материалов – оксифторидов $\text{Li}_{1+x}(\text{MeMn}^{3+})_{1-x}\text{O}_{2-y}\text{F}_y$ , где Me ( $d^0$ ) = $\text{Ti}^{4+}$ и $\text{Nb}^{5+}$**

Синтезированы и исследованы свойства новых перспективных катодных материалов для литий-ионных аккумуляторов на основе литий-избыточных смешанно-катионных оксидов переходных металлов с общей формулой  $\text{Li}_{1+x}(\text{M1M2})_{1-x}\text{O}_2$  с разупорядоченной структурой каменной соли (DRX). Высокая удельная емкость достигается путем введения в структуру избытка лития при условии активации двух редокс-пар: катионной  $\text{Me}^+/\text{Me}^{(n+1)+}$  и анионной  $\text{O}^{2-}/\text{O}^-$ . Стабилизация структуры данных соединений при обратимой интеркаляции ионов лития осуществляется благодаря присутствию электрохимически неактивных ( $d^0$ ) высоковалентных ионов переходных металлов (TM). Установлено, что в отсутствие диффузионных каналов диффузия ионов  $\text{Li}^+$  в DRX происходит по прыжковому механизму путем перескока из одной октаэдрической позиции в другую через промежуточную тетраэдрическую пустоту (*o-t-o* диффузия), имеющую общие грани с четырьмя октаэдрами, которые могут быть заняты Li или TM. Частичное замещение кислорода фтором приводит к повышению доли электрохимически активного марганца ( $\text{Mn}^{3+}$ ) и удельной емкости материала, а также к стабилизации редокс-пары кислорода при циклировании.





Зарядно-разрядные кривые первых двух циклов образцов  $\text{Li}_{1+x}(\text{MeMn}^{3+})_{1-x}\text{O}_{2-y}\text{F}_y$ , где  $\text{Me} = \text{Ti}^{4+}$  (а) и  $\text{Nb}^{5+}$  (б).

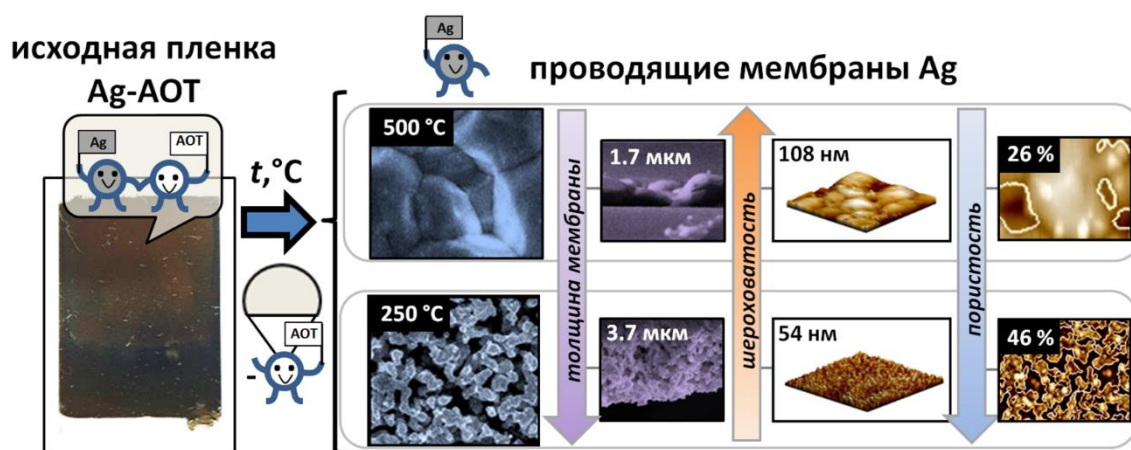
*Руководитель работ – д.х.н. Косова Н.В. (Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН)*

**Публикация:**

Мищенко К.В., Подгорнова О.А., Семькина Д.О., Шиндров А.А., Косова Н.В. Влияние природы  $d^0$  на стабильность анионной редокс пары в оксифторидах с разупорядоченной структурой каменной соли // Электрохимия. – 2023. – Т.59, №3. – С. 158-166. DOI: 10.31857/S0424857023030088

**19. Электропроводящие серебряные мембраны Януса с настраиваемыми поверхностными свойствами: толщиной, шероховатостью и пористостью**

Разработана методика получения серебряных мембран Януса с терморегулируемыми функциональными параметрами: шероховатостью, пористостью, смачиваемостью и электропроводностью. Мембраны обладают гибкостью, устойчивостью к деформациям и могут работать как в свободном состоянии в качестве фильтрующих и фотокаталитических систем, так и в фиксированном на различных подложках (элементы микроэлектроники, ткани для «умной» одежды и перевязочные материалы с бактерицидными свойствами).



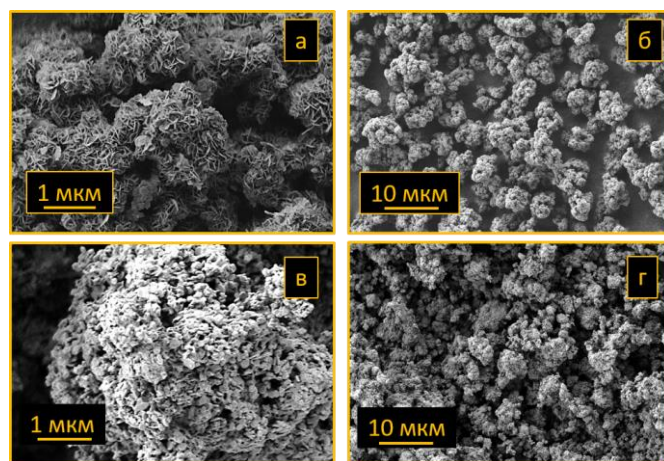
*Руководитель работ – д.х.н. Булавченко А.И. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)*

**Публикация:**

Kolodin A.N., Bulavchenko O.A., Syrokvashin M.M., Maksimovskiy E.A., Bulavchenko A.I. Conductive silver films with tunable surface properties: thickness, roughness and porosity // *Applied Surface Science*. – 2023. – V. 629. – a.n. 157392. DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.157392

**20. Синтез катодных материалов на основе обогащенных по никелю литированных оксидов**

Работа посвящена синтезу катодных материалов на основе обогащенных по никелю литированных оксидов. Слоистые оксиды  $\text{LiNi}_x\text{Mn}_y\text{Co}_z\text{O}_2$  с содержанием никеля 80% (NMC811) получены методом соосаждения прекурсора с последующей твердофазной реакцией с источником лития. Исследовано влияние состава прекурсора (карбонат, гидроксид), исходных реактивов (сульфаты, нитраты), и ряда параметров осаждения прекурсора и отжига на твердофазной стадии. Образцы показали высокую кулоновскую эффективность первого цикла – 95-98% для скорости 0.1 С и 90- 92% для скорости 0.5 С. Падение емкости составило около 0.2% на цикл для обеих скоростей 0.1 С и 0.5 С. Образцы, полученные при одинаковых условиях, отличаются хорошей воспроизводимостью электрохимических параметров.

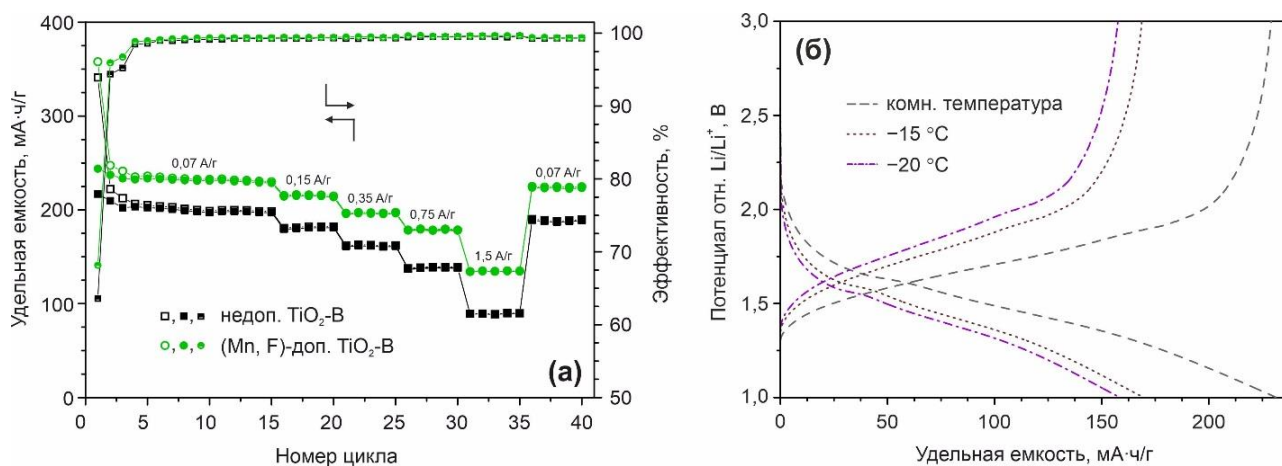


Типичный гидроксидный прекурсор (а,б) и отожжённый NMC811 (в,г).

*Руководитель работ – к.х.н. Махонина Е.В. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

## **21. Разработка способа получения анодного материала для литий-ионных аккумуляторов на основе допированного марганцем и фтором диоксида титана**

Разработан новый способ получения анодного материала для литий-ионных аккумуляторов на основе допированного марганцем и фтором диоксида титана бронзовой модификации ( $\text{TiO}_2\text{-B}$ ) с нанотрубчатой структурой. Установлено, что допирование марганцем вызывает искажение кристаллической решетки  $\text{TiO}_2\text{-B}$  (объем элементарной ячейки увеличивается на  $\sim 1,5\%$ ) и уменьшает ширину запрещенной зоны (с 3,14 до 2,18 эВ). Показано, что это способствует улучшению транспорта носителей заряда, обеспечивая ускоренную диффузию ионов  $\text{Li}^+$  (почти в 2 раза), а также быстрый перенос электронов (проводимость после допирования увеличивается примерно в 40 раз). Допирование фтором способствует стабилизации бронзовой фазы, предотвращая ее трансформацию в анатаз. В качестве материала анода для литий-ионных аккумуляторов (Mn, F)-допированный  $\text{TiO}_2\text{-B}$  демонстрирует хорошие показатели цикличности (удельная емкость равна 231,5 мА·ч/г после 100 циклов заряда/разряда при плотности тока 0,07 А/г) и устойчивости к высоким токовым нагрузкам (134 мА·ч/г при 1,5 А/г). Полученный материал сохраняет способность к эксплуатации в условиях пониженных температур, обеспечивая емкость на уровне 70% от номинальной при  $-20\text{ C}$  (для коммерческих аналогов этот показатель меньше 50%).



Эволюция емкости материала при циклировании различными плотностями тока (а) и зарядно-разрядные кривые при различных температурах (б) для (Mn, F)-допированного  $\text{TiO}_2\text{-B}$  в литиевых ячейках.

*Руководитель работ – к.х.н. Опра Д.П. (Институт химии ДВО РАН)*

### **Публикация:**

Opra D.P., Sinebryukhov S.L., Modin E.B., Sokolov A.A., Podgorbunsky A.B., Ziatdinov A.M., Ustinov A.Yu., Mayorov V.Yu., Gnedenkov S.V. Manganese, fluorine, and nitrogen co-doped bronze titanium dioxide nanotubes with improved lithium-ion storage properties // *Batteries*. 2023. – V. 9, №4. – a.n. 229. DOI: 10.3390/batteries9040229

## **22. Разработка люминесцентных неорганических материалов и полимерных композитов на их основе**

Разработаны методы синтеза магнитоуправляемых оптических люминесцентных зондов на основе оксида графена, наночастиц оксидов железа и фторидов РЗЭ, использованных при определении градиентного строения эпоксиаминного композита. Получен люминесцентный термореактивный полимер с необычно высоким содержанием ионов европия(III), пригодный для использования в качестве оптического полимерного материала. Разработан оригинальный метод получения люминесцентного термопластичного полимерного композита, содержащего перовскитные квантовые точки (КТ) на основе галогенидов свинца. Устойчивые к влаге КТ не требуют предварительного синтеза и получены экструзионной переработкой полимера с прекурсорами. Полимерные гранулы с КТ могут быть далее переработаны, например, методом 3D-печати.



*Руководитель работ – проф., д.х.н. Амиров Р.Р. (Казанский (Приволжский) федеральный университет)*

### **Публикации:**

Solodov A.N., Balkaev D., Amirov R., Gataullina R., Nurtdinova L., Yusupov R., Kharintsev S.S., Dimiev A.M. Polymer Composites with Magnetically Tunable Optical Anisotropy // ACS Applied Polymer Materials. – 2023. – V. 5, № 8. – P. 6338-6345. DOI: 10.1021/acsapm.3c00954

Amirov R.R., Akhmadiev Kh.A., Gaifutdinov A.M., Andrianova K.A., Shmelev A., Gatiatulin A.K., Zagidullin A.A., Milyukov V.A., Amirova L.M. The interaction of triglycidyl phosphate with europium nitrate and properties of obtained metal-containing polymer // Materials Today Chemistry. – 2023. – V. 29. – a.n. 101464. DOI: 10.1016/j.mtchem.2023.101464

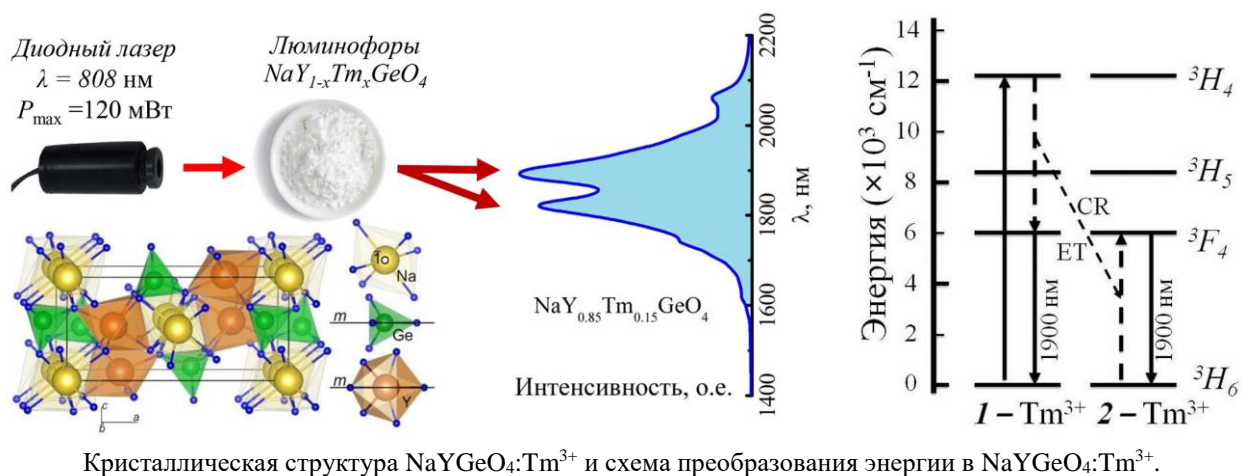
Солодов А.Н., Зимин К.С., Амиров Р.Р., Димиев А.М. Полимерный композитный материал с перовскитными квантовыми точками, способ его получения и способ использования в 3D-печати // патент РФ № 2803307, опубл. 12.09.2023. Бюл. № 26.

### **23. NaYGeO<sub>4</sub>:Tm<sup>3+</sup> люминесцентный материал для фотоники, преобразующий возбуждающее излучение с E = 1.53 эВ в излучение с E = 0.68 эВ**

На основе NaYGeO<sub>4</sub>:Tm<sup>3+</sup> разработан новый люминесцентный материал для фотоники, преобразующий возбуждающее излучение с E = 1.53 эВ в излучение с E = 0.68 эВ. Преобразование основано на явлении кооперативной кросс-релаксации в тулиевых оптических центрах. Коэффициент преобразования равен двум: при поглощении одного фотона возникает два фотона эмиссии. Области применения: в качестве компонентов (преобразователей, излучателей, усилителей) в оптических линиях связи и коммуникациях, работающих в диапазоне 1.9 мкм; компонент камуфляжа, позволяющий снизить идентификацию объектов при использовании приборов ночного видения 1-го и 2-го поколений; в портативных



спектрометрах для экспресс анализа на содержание молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{ROH}$ ,  $\text{RCO}_2\text{H}$ ,  $\text{RCO}_2\text{R}'$ ,  $\text{CONH}_2$ .



Руководитель работ – д.ф.-м.н. Зубков В.Г. (Институт химии твердого тела УрО РАН)

#### Публикация:

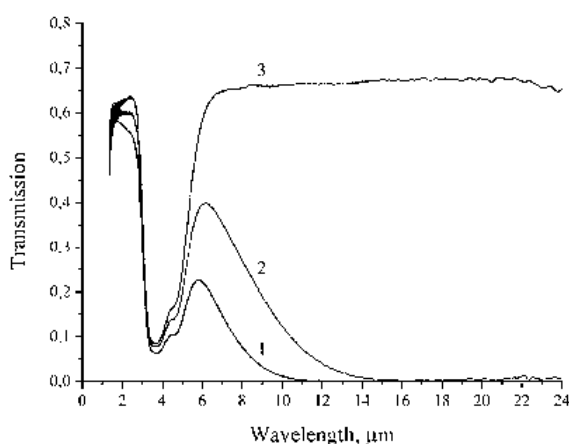
Melentsova A.A., Lipina O.A., Chufarov A.Y., Tyutyunnik A.P., Zubkov V.G. Microwave-assisted synthesis and luminescence properties of  $\text{NaYb}_{1-x}\text{Er}_x\text{GeO}_4$ ,  $\text{NaY}_{1-y}\text{Yb}_{3y/4}\text{Er}_{y/4}\text{GeO}_4$  olivines // Journal of Solid State Chemistry. – 2023. – V. 322. – a.n. 123946. DOI: 10.1016/j.jssc.2023.123946

## 24. Развитие перспективных функциональных материалов для оптических применений в ИК диапазоне

Предложена методика выращивания монокристаллов  $\text{Fe}:\text{CdTe}$  из расплава под давлением аргона с использованием модифицированного метода вертикального замораживания в поле градиента температуры (VGF) в сочетании с синтезом  $\text{CdTe}$  из исходных компонентов под слоем флюса  $\text{V}_2\text{O}_5$ . Из выращенных слитков вырезались образцы, которые использовались для регистрации спектров пропускания на ИК Фурье-спектрометре Тензор-27 (Bruker) и последующей высокотемпературной обработки. На рисунке (кр. 1) представлен спектр пропускания исходного образца. Наблюдается широкая полоса поглощения в области 3-6 мкм, обусловленная наличием ионов  $\text{Fe}^{2+}$  в решетке  $\text{CdTe}$ . Пропускание в длинноволновой области ИК спектра 6-12 мкм заметно снижено (по сравнению с теоретическим значением), что указывает на наличие в материале свободных носителей заряда. Проведены исследования по подбору условий термической постростовой обработки образцов  $\text{Fe}:\text{CdTe}$  с целью снижения концентрации носителей заряда и



повышения оптического пропускания кристаллов в длинноволновой области. Отжиг образцов в кварцевой ампуле в атмосфере аргона при давлении 101 кПа и температуре 650 °С в течение 12 ч позволил несколько снизить концентрацию свободных носителей (кр. 2). Горячее изостатическое прессование (ГИП-обработка) при давлении 90 МПа и температуре 750°С в течение 4 ч привело к существенному уменьшению концентрации носителей и увеличению длинноволнового пропускания образцов до значений, близких к теоретическим (кр. 3). Изготовленные образцы с концентрацией ионов Fe<sup>2+</sup>  $6,1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  использовались в качестве рабочей лазерной среды Fe:CdTe-лазера с накачкой НФ-лазером при комнатной температуре. Были получены рекордные значения выходной энергии, эффективности генерации и полного КПД по поглощенной энергии: 350 мДж, 57% и 42% соответственно.



Спектры пропускания 2-мм образца Fe:CdTe: 1 – исходный образец, вырезанный из выращенного кристалла; 2 – образец после отжига в кварцевой ампуле в атмосфере аргона при температуре 650 °С в течение 12 ч; 3 – образец после ГИП-обработки в течение 4 ч при давлении 90 МПа и температуре 750 °С.

*Руководитель работ – д.х.н. Гавришчук Е.М. (Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Десятых РАН)*

### **Публикации:**

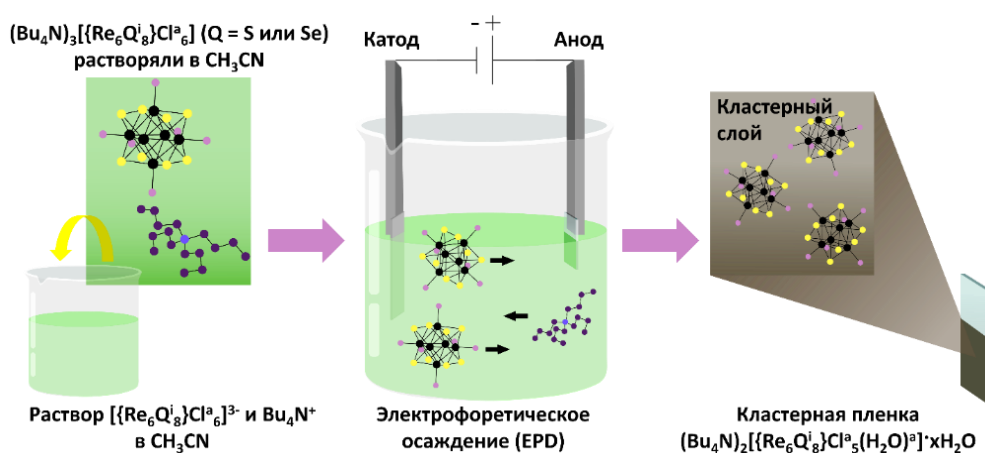
Antonov V.A., Firsov K.N., Gavrishchuk E.M., Ikonnikov V.B., Kononov I.G., Kurashkin S.V., Podlesnykh S.V., Savin D.V., Zhavoronkov N.V. Lasing and luminescence characteristics of Fe:CdTe single crystal at room temperature // *Optical Materials*. – 2023. – V. 139. – a.n. 113768. DOI: 10.1016/j.optmat.2023.113768

Antonov V.A., Firsov K.N., Gavrishchuk E.M., Ikonnikov V.B., Kononov I.G., Kurashkin S.V., Podlesnykh S.V., Savin D.V., Zhavoronkov N.V. DF laser pumped single-crystal Fe:CdTe laser operating at room temperature // *Laser Physics Letters*. – 2023. – V. 20. – a.n. 045802. DOI: 10.1088/1612-202X/acbf3e

Antonov V.A., Firsov K.N., Garishchuk E.M., Ikonnikov V.B., Kononov I.G., Kurashkin S.V., Podlesnykh S.V., Savin D.V., Zhavoronkov N.V. Efficient Fe:CdTe laser with an output energy of 350 mJ at room temperature // Laser Physics Letters. – 2023. – V. 20. – a.n. 065801. DOI: 10.1088/1612-202X/accf76

## 25. Наноразмерные кластеры рения для дизайна фотоэлектродов с настраиваемыми свойствами, подходящими для интегрирования в состав солнечных элементов

Путем электрофоретического осаждения получены пленочные фотоэлектроды на основе допированного оксида олова с нанесенным на него с покрытием из кластерных комплексов с ядрами  $\{\text{Re}_6\text{Q}_8\}$  ( $\text{Q} = \text{S}, \text{Se}$ ). В зависимости от состава кластеров и способа нанесения фотоэлектроды проявляют амбиполярные свойства или свойства полупроводников  $p$ -типа; а совместное осаждение кластеров с ядрами  $\{\text{Re}_6\text{S}_8\}$  и  $\{\text{Re}_6\text{Se}_8\}$  приводит к созданию  $p$ - $n$  перехода. Это позволяет оптимизировать фотофизические характеристики пленочных материалов на основе кластеров и рассматривать их в качестве компонентов в фотокаталитических и фотогальванических системах.



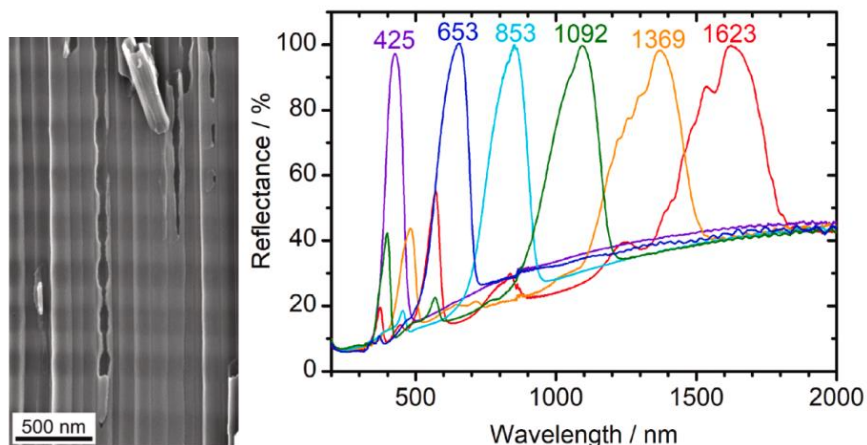
Руководитель работ – д.х.н. Наумов Н.Г. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)

### Публикация:

Lappi T., Cordier S., Gayfulin Y., Ababou-Girard S., Grasset F., Uchikoshi T., Naumov N.G., Renaud A. Nanoarchitectonics of Metal Atom Cluster-Based Building Blocks Applied to the Engineering of Photoelectrodes for Solar Cells // Solar RRL. – 2023. – V. 7, №6. – a.n. 2201037. DOI: 10.1002/solr.202370064

## 26. Фотонные кристаллы на основе анодного оксида титана

Впервые показана взаимосвязь между зарядом анодирования и степенью растворения стенок пор анодного оксида титана. Найденная зависимость позволила разработать метод получения фотонных кристаллов из оксида титана с точно контролируемым положением фотонных запрещенных зон. Полученные материалы перспективны для фотокаталитической очистки воды от органических соединений.



РЭМ изображение поперечного скола фотонного кристалла из анодного оксида титана (слева) и спектры отражения образцов с заданным положением фотонных запрещенных зон (справа).

*Руководитель работ – к.х.н. Напольский К.С. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

### **Публикации:**

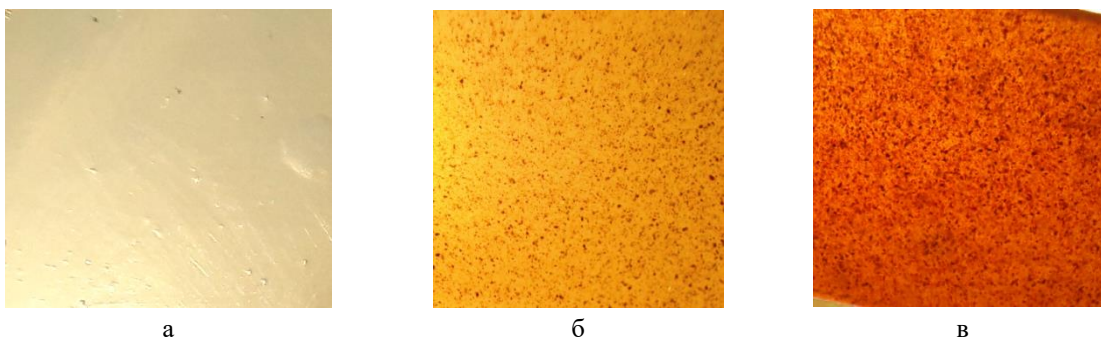
Belokozenko M.A., Kushnir S.E., Sapoletova N.A., Napolskii K.S. Anodizing charge density controls the porosity of anodic titanium oxide photonic crystals // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2023. – V. 362. – a.n. 112802. DOI: DOI: 10.1016/j.micromeso.2023.112802

Cherepanova Yu.M., Sapoletova N.A., Kushnir S.E., Roslyakov I.V., Napolskii K.S. A new approach to the synthesis of anodic titania photonic crystals with desired position and high reflectance of photonic band gaps // *Optical Materials*. – 2023. – V. 146. – a.n. 114534. DOI: 10.1016/j.optmat.2023.114534

Sapoletova N.A., Kushnir S.E., Ulyanov A.N., Valeev R.G., Boytsova O.V., Roslyakov I.V., Napolskii K.S. Effect of post-treatment on photocatalytic activity of anodic titania photonic crystals // *Optical Materials*. – 2023. – V. 144. – a.n. 114350. DOI: 10.1016/j.optmat.2023.114350

## 27. Синтез MgFeGa- и ZnFeGa-слоистых гидроксидов и исследование их влияния на огнестойкие и механические свойства композитов на основе полиуретана

Впервые проведен синтез слоистых тройных гидроксидов, содержащих катионы магния, железа и галлия (MFG-СТГ) и цинка, железа и галлия (ZFG-СТГ). Установлено, что ZFG-СТГ с мольным соотношением катионов 2:0.5:0.5 и MFG-СТГ с соотношением катионов 2:0.67:0.33 демонстрируют максимальные эндотермические эффекты при термическом разложении и, следовательно, являются перспективными антипиренами. Применение слоистых гидроксидов для получения композиционных материалов на основе полиуретана способствует повышению его огнестойкости и механических свойств по сравнению с исходным полимером. Показано, что применение частиц слоистых гидроксидов размером 3.5 мкм приводит к более высоким огнестойким и механическим характеристикам по сравнению с использованием частиц размером 0.06 мкм. Полученные результаты могут быть использованы для получения полимерных композиционных материалов с улучшенной огнестойкостью и механическими свойствами, которые могут найти применение как негорючие материалы в авиастроении и автомобилестроении.



СЭМ изображения исходного полиуретана (ПУ)(а) и композитов: MFG-СТГ (1 масс. %)/ПУ (б) и MFG-СТГ (5 масс. %)/ПУ (в).

*Руководитель работ – д.х.н. Толочко Б.П. (Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН)*

### **Публикация:**

Нгуен Т.В.А., Толочко Б.П., Горбунов Ф.К., Фади́на А.А., Михайленко М.А. Влияние на механические характеристики полиуретана облучения электронами и модифицирующих добавок на основе слоистых тройных гидроксидов MgFeGa // Химия в интересах устойчивого развития. – 2023. – Т. 31, №6. – С. 753-758.

## 28. Новый подход к полиольному синтезу композитных наночастиц кобальта

Созданы основы одностадийного двухкомпонентного полиольного синтеза нанокompозитов кобальта (CoNPs) с использованием наноразмерных полиэфирополиолов 3D архитектуры. Определены условия, в которых сверхразветвленный полиэфирополиол (СРПО) может быть одновременно и стабилизатором, и восстановителем ионов  $\text{Co}^{2+}$ . Синтезированный нанокompозит CoNPs представляет собой сфероидные наноагрегаты СРПО с иммобилизованными наночастицами кобальта с  $d=5-7$  нм и обладает высокой коллоидной стабильностью. Разработанный подход позволяет повысить биосовместимость CoNPs, коэффициент гемолиза  $\text{HC}_{50} > 8$  г/мл. Новые материалы на основе CoNPs - перспективные многофункциональные адаптивные агенты со свойствами синтетического модулятора ферментативной активности, антимикотика, а также  $T_1$ -реagenta для МРТ-диагностики.

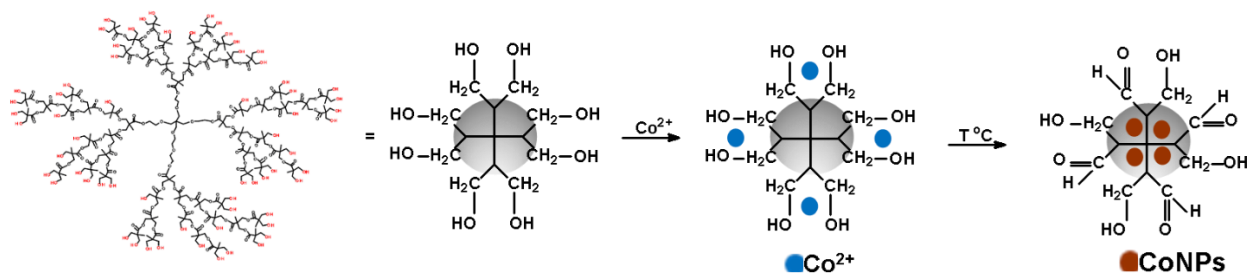
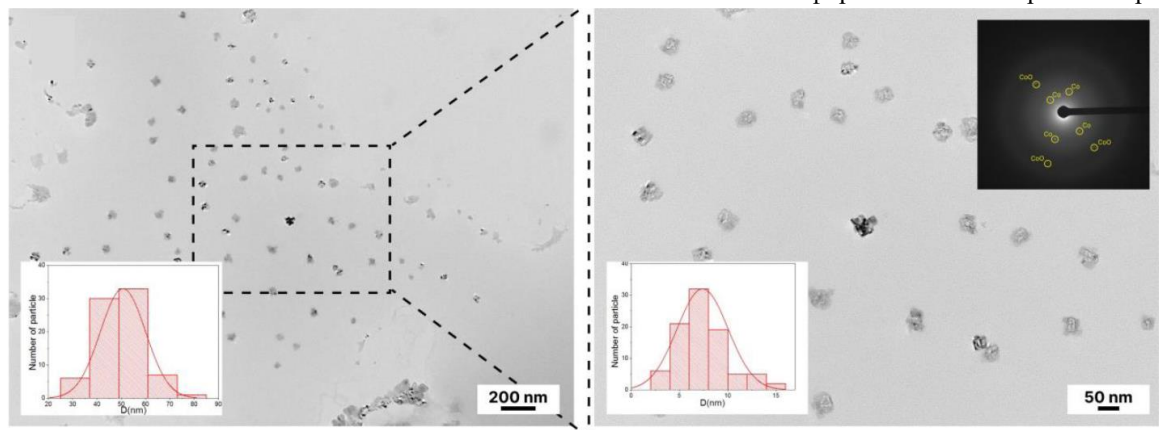


Схема полиольного синтеза нанокompозита CoNPs с использованием полиэфирополиола четвертой генерации.



ПЭМ изображения, диаграммы размерного распределения частиц и данные электронной дифракции CoNPs.

*Руководитель работ – к.х.н. Кутырева М.П. (Казанский (Приволжский) федеральный университет)*

### **Публикации:**

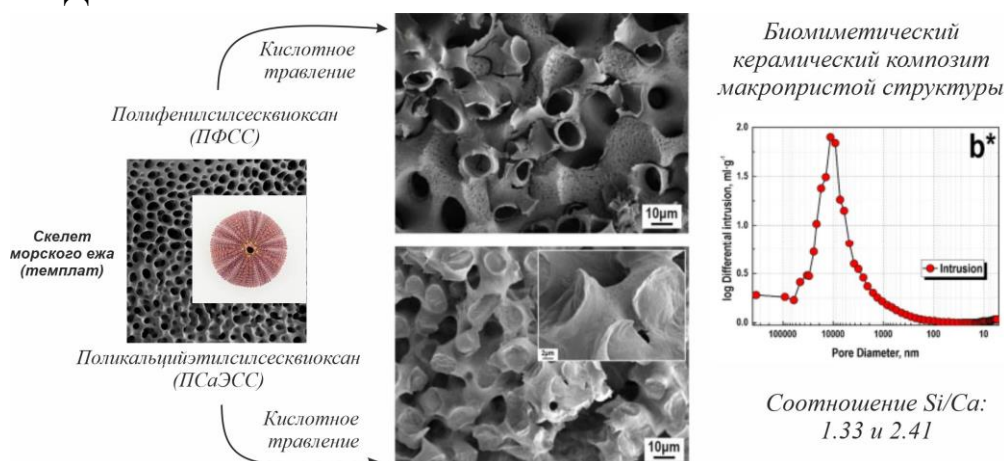
Кутырева М.П., Бурматова А.Е., Ханнанов А.А., Евтюгин В.Г. Высокотемпературный синтез наночастиц кобальта в среде сверхразветвленного полиэфирополиола // Журнал общей химии. – 2023. - Т.93, № 1. – С. 146-152. DOI: 10.31857/S0044460X23010171



Burmatova A., Khannanov A., Gerasimov A., Ignat'eva K., Khaldeeva E., Gorovaia A., Kiiamov A., Evtugyn V., Kutyreva M. Hyperbranched polyol process for designing and manufacturing nontoxic cobalt nanocomposite // *Polymers*. – 2023. – V.15. – a.n. 3248. DOI: 10.3390/polym15153248

## 29. Разработка способа темплатного синтеза пористых биомиметических композитов

Разработан способ темплатного синтеза пористых биомиметических композитов путем химического взаимодействия элементарорганических полимеров (полифенилсилсеквиоксана и поликальцийэтилсилсеквиоксана) со скелетом морского ежа, используемого в качестве порообразующего темплата, с последующим кислотным травлением. Получены новые формы объемно-структурированных биомиметиков на основе силикатов кальция с соотношением Si/Ca 1.33 и 2.41, соответственно, применимых в качестве макропористых мембран и фильтрационных элементов для технологий сорбции, а также в качестве биосовместимых материалов для персонализированной медицины. Работа выполнена в ДВФУ совместно с НИЦМБМ ДВО РАН.



Общая схема синтеза биомиметических керамических композитов с использованием элементарорганических полимеров и скелета морского ежа в качестве порообразующего темплата.

*Руководитель работ – к.х.н. Папынов Е.К. (Дальневосточный федеральный университет)*

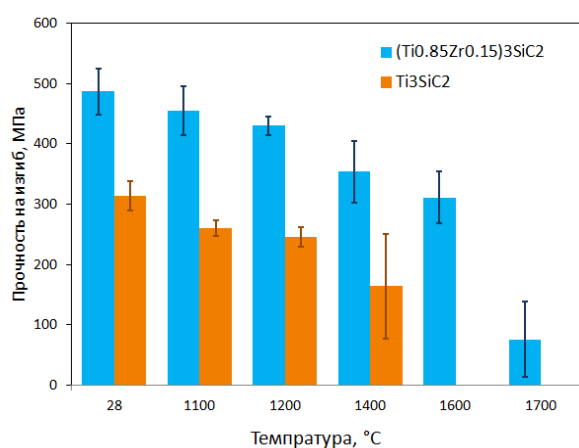
### Публикация:

Shapkin N.P., Khalchenko I.G., Drozdov A.L., Fedorets A.N., Buravlev I.Yu., Andrasyuk A.A., Maslova N.V., Pervakov K.A., Papynov E.K. Silica-containing biomimetic composites based on sea urchin skeleton and polycalciumorganylsilsequioxane // *Biomimetics*. – 2023. – V. 8. – a.n. 300. DOI: 10.3390/biomimetics8030300



### 30. Жаропрочная керамика на основе $(\text{Ti}_{0.85}\text{Zr}_{0.15})_3\text{SiC}_2$

Получена жаропрочная керамика на основе МАХ фазы  $(\text{Ti}_{0.85}\text{Zr}_{0.15})_3\text{SiC}_2$ , характеризующаяся рекордными для МАХ фаз показателями высокотемпературной прочности: температура перехода от хрупкого разрушения к пластической деформации лежит в интервале 1600 – 1700 °С, а прочность на изгиб при 1600 °С составляет 60 – 65% от прочности при комнатной температуре. Исследована высокотемпературная прочность горячепрессованной керамики на основе твёрдорастворных МАХ фаз  $(\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x)_3\text{SiC}_2$ , где  $x = 0 \div 0.15$ , полученных методом вакуумного карбосиликотермического восстановления оксидов титана и циркония. Показано, что введение циркония в структуру МАХ фазы позволяет значительно улучшить высокотемпературную прочность керамики и увеличить температуру перехода из хрупкого состояния в пластичное. Установлено, что для керамики на основе МАХ фазы  $(\text{Ti}_{0.85}\text{Zr}_{0.15})_3\text{SiC}_2$  температура перехода от хрупкого разрушения к пластической деформации лежит выше 1600°С. Прочность на изгиб при комнатной температуре и при 1600 °С составляют  $490 \pm 40$  МПа и  $310 \pm 45$  МПа, соответственно. Полученные результаты являются лучшими среди достигнутых на сегодняшний день для всего класса МАХ фаз.

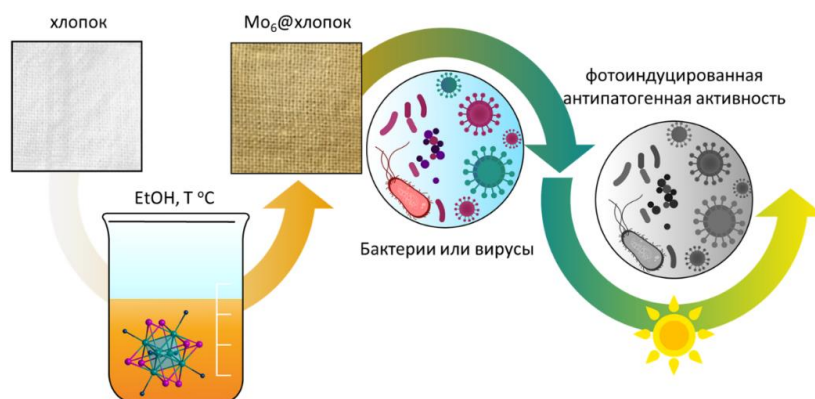


*Руководитель работ – к.х.н. Истомин П.В. (Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН)*

### 31. Хлопковая ткань, модифицированная нанокластерами молибдена, с фотоиндуцируемыми антибактериальными и противовирусными свойствами

Получены материалы на основе хлопковой ткани и октаэдрического кластерного комплекса молибдена  $[\{\text{Mo}_6\text{I}_8\}(\text{DMSO})_6](\text{NO}_3)_4$  (DMSO – диметилсульфоксид) путем пропитки хлопка раствором кластерного комплекса, в результате чего образуется равномерно окрашенная ткань.

Комплекс прочно связывается с тканью, что обеспечивает высокую стабильность материалов (при стирке ткани в стиральной машине с использованием стирального порошка вымывание комплекса не происходит). При облучении ткани светом запускается процесс генерации синглетного кислорода, благодаря чему материал проявляет фотоиндуцированную антипатогенную активность по отношению к бактериям, грибкам, вирусам COVID-19 (SARS-CoV-2) и гриппа В.



*Руководитель работ – д.х.н. Шестопалов М.А. (Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН). Работа выполнена совместно с ФИЦ ФТМ и Институтом физической химии Чешской академии наук*

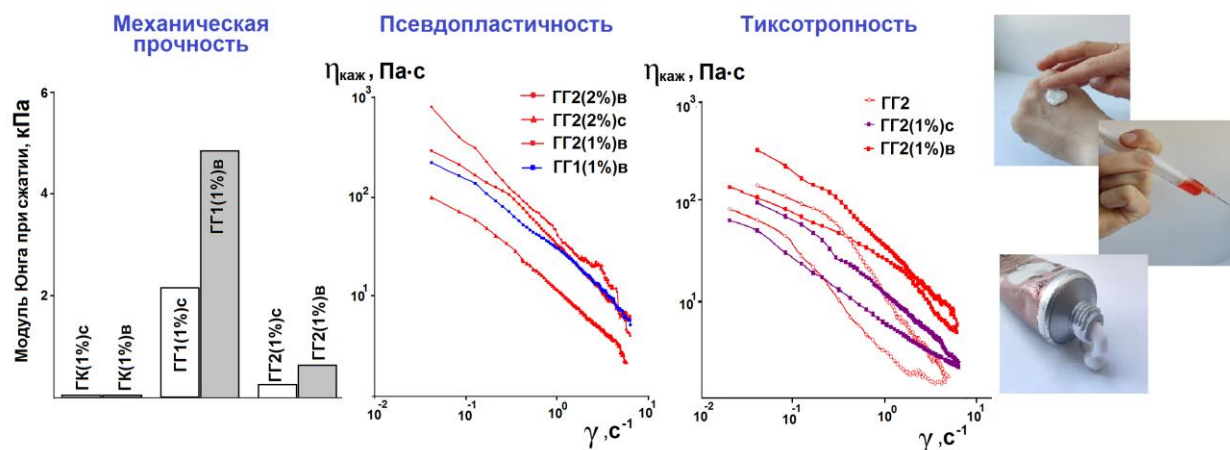
#### **Публикация:**

Novikova E.D., Pronina E.V., Vorotnikov Y.A., Adamenko L.S., Alekseev A.Y., Shestopalov A.M., Tsygankova A.R., Gusel'nikova T.Y., Kubát P., Kirakci K., Lang K., Shestopalov M.A. Cotton fabrics modified with molybdenum nanoclusters for photodynamic inactivation of bacteria and viruses // Journal of Environmental Chemical Engineering. – 2023. – V.11, № 5. – a.n. 110796 DOI: 10.1016/j.jece.2023.110796

### **32. Гидрогели диоксида кремния как платформа для создания новых гибридных материалов гиалуроновой кислоты биомедицинского назначения**

Синтезированы гидрогели диоксида кремния, содержащие гиалуроновую кислоту различного среднего молекулярного веса, что позволило улучшить механические свойства и управлять скоростью выхода гиалуроновой кислоты в ткани организма. Инкапсулирование 2% высокомолекулярной гиалуроновой кислоты в гидрогелевую матрицу диоксида кремния привело к ускорению процесса проникновения кислоты через кожный барьер по сравнению со свободной кислотой. Гель,

содержащий гиалуроновую кислоту с низким и средним молекулярным весом, замедляет процесс ее проникновения через кожу. Полученные данные открывают перспективу для разработки новых мягких лекарственных форм гиалуроновой кислоты с улучшенными фармакологическими и потребительскими свойствами, которые могут найти потенциальное применение в медицине и косметологии.



Модуль Юнга при сжатии и реологические свойства некоторых синтезированных гидрогелей ГК-диоксид кремния. ГГ были синтезированы при концентрациях кислотного катализатора 0.03М или 0.125М (ГГ1 или ГГ2), содержали 1% или 2% ГК на грамм гидрогеля со средним (50-100 кДа) и высоким (1.0-1.5 МДа) молекулярным весом.

*Руководитель работ – к.х.н. Парфенюк Е.В. (Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН)*

### **Публикация:**

Parfenyuk E.V., Dolinina E.S. Inorganic hydrogels: synthetic strategies, properties and applications // *Reviews in Inorganic Chemistry*. – 2023. DOI: 10.1515/revic-2023-0019

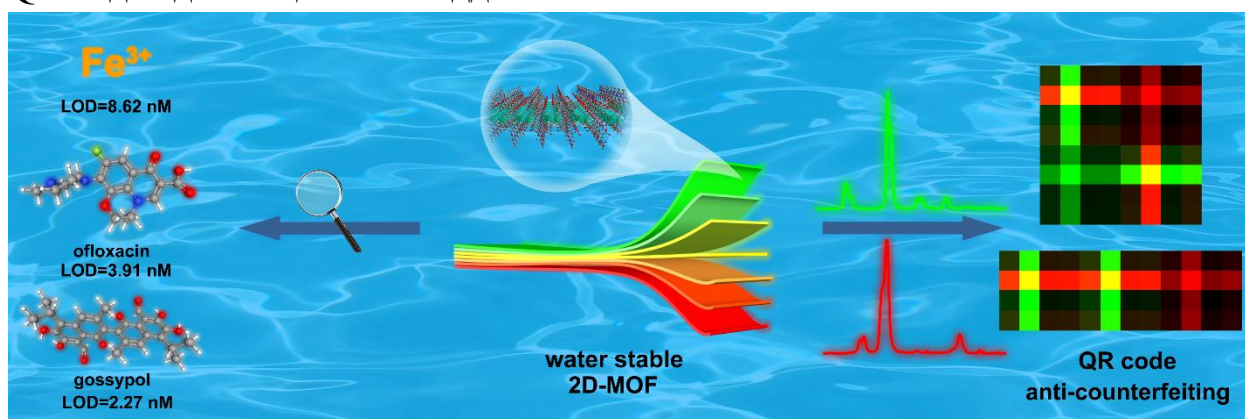
Parfenyuk E.V., Dolinina E.S. Silica Hydrogels as Platform for Delivery of Hyaluronic Acid // *Pharmaceutics*. – 2023. – V.15. – a.n. 77. DOI: 10.3390/pharmaceutics15010077

Dolinina E.S., Parfenyuk E.V. Effect of Hyaluronic Acid Encapsulation in a Silica Hydrogel Matrix on Drug Penetration through the Skin // *Mendeleev Communications*. – 2023. – V.33. – P. 556-558. DOI: 10.1016/j.mencom.2023.06.037

## IV. МЕТОДЫ АНАЛИЗА НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ И МАТЕРИАЛОВ

### 1. Использование координационного полимера NiC-3-Tb для селективного обнаружения ионов $Fe^{3+}$ , офлоксацина или госсипола в воде или физиологических жидкостях

Металл-органический координационный полимер NiC-3-Tb был использован для селективного обнаружения ионов  $Fe^{3+}$ , офлоксацина или госсипола в воде или физиологических жидкостях с пределами обнаружения в области наномолярных концентраций (2-8 нмоль/л) и коротким временем отклика. Предложено использование биметаллических комплексов NiC-3- $Eu_xTb_{1-x}$  в качестве люминесцентных красителей с цветом эмиссии, модулируемым в зависимости от состава, длины волны возбуждения и задержки времени перед регистрацией спектра люминесценции. Предложено применение данных красителей для нанесения оригинальных двухмерных QR-кодов для защиты от подделок.



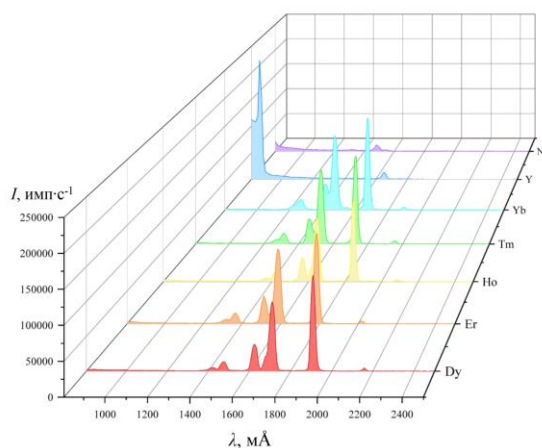
*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Федин В.П. (Новосибирский государственный университет и Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН)*

#### **Публикация:**

Yu X., Ryadun A.A., Pavlov D.I., Guselnikova T.Y., Potapov A.S., Fedin V.P. Highly Luminescent Lanthanide Metal-Organic Frameworks with Tunable Color for Nanomolar Detection of Iron(III), Ofloxacin and Gossypol and Anti-counterfeiting Applications // *Angewandte Chemie*. – 2023. – V.62, №35. – a.n. 202306680. DOI: 10.1002/anie.202306680

## 2. Методика рентгенофлуоресцентного определения основных элементов в образцах высокоэнтропийной керамики на основе ниобатов редкоземельных элементов вида

Разработана методика рентгенофлуоресцентного определения основных элементов в образцах высокоэнтропийной керамики (ВЭК) на основе ниобатов РЗЭ вида  $Ln_3NbO_7$  ( $Ln = Y, Dy - Yb$ ) со структурой флюорита. Решена значимая проблема в одновременном определении нескольких редкоземельных элементов – исследованы физико-химические особенности возбуждения спектров редкоземельных элементов при анализе керамической матрицы и аналитические линии с учетом взаимных спектральных наложений. Разработан подход, сочетающий экспрессную идентификацию методом фундаментальных параметров без использования стандартных образцов и количественное определение аналитов с использованием внешней градуировки на основе созданной серии образцов сравнения. Диапазон определяемых содержаний редкоземельных элементов: Y (3,16-56,55 % масс.), Yb (8,78-71,70 % масс.), Nb (12,83-19,70 % масс.) в образцах ВЭК состава  $Y_{3-x}Yb_xNbO_7$  с относительной погрешностью не более 1,6%.



Спектральные наложения аналитов в ВЭК на основе ниобатов РЗЭ со структурой флюорита в рентгенофлуоресцентном анализе.

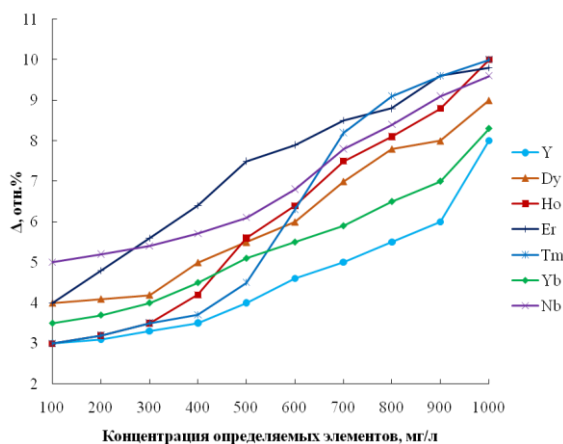
*Руководитель работ – д.х.н. Барановская В.Б. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

## 3. Методика атомно-эмиссионного с индуктивно связанной плазмой определения основных элементов в солях редкоземельных элементов и ниобия для получения высокоэнтропийной керамики

Разработана методика атомно-эмиссионного с индуктивно связанной плазмой определения основных элементов в солях РЗЭ и ниобия для получения высокоэнтропийной керамики (ВЭК). Актуальность проблемы



связана с необходимостью точного определения содержания основных компонентов при синтезе ВЭК. Значения погрешности при определении основных компонентов при стандартных рабочих параметрах спектрометра (мощность высокочастотного генератора – 1200 Вт, скорость распылительного потока – 0,65 л/мин, скорость ввода образца в плазму – 50 об/мин) растет с ростом концентрации определяемых аналитов и достигает 7 – 10 масс. % (рис.), что связано с изменением термических характеристик плазмы и, соответственно, с изменением ионного равновесия, а также с эффектом подавления интенсивности сигнала определяемых элементов при росте их концентрации, который возникает за счет поглощения излучения из центрального канала факела в его периферийных, более холодных областях, что вызывает изменение интенсивности сигнала и изменение формы пика. Выбор «робастных» параметров позволяет компенсировать данный эффект. В результате проведенной серии экспериментов исследованы и выбраны условия анализа для определения концентрации основных элементов в растворах  $Y(NO_3)_3$ ,  $Dy(NO_3)_3$ ,  $Ho(NO_3)_3$ ,  $Er(NO_3)_3$ ,  $Tm(NO_3)_3$ ,  $Yb(NO_3)_3$ ,  $NbCl_5$ : мощность высокочастотного генератора – 1100 Вт, скорость распылительного потока аргона – 0,5 л/мин, скорость введения образца в плазму – 30 об/мин, концентрация определяемого аналита – не более 500 мг/л. Правильность полученных результатов подтверждена с помощью анализа модельных растворов и растворов известной концентрацией 25 г/л. Достигнутое стандартное отклонение составило 2–3 отн. %.

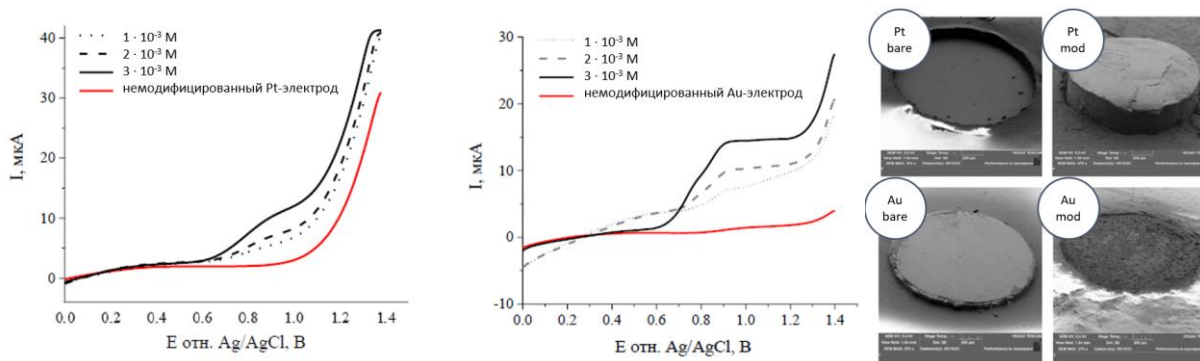


Зависимость относительной погрешности от концентрации аналита при стандартных рабочих параметрах спектрометра.

*Руководитель работ – д.х.н. Барановская В.Б. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

#### 4. Разработка электрохимических сенсоров для идентификации биологически активных соединений в растворах

Разработаны методы модификации рабочей поверхности твердых индикаторных электродов металлокомплексами макрогетероциклов с целью увеличения селективности анализа и воспроизводимости аналитического сигнала. Исследовано влияние состава и свойств смешанных водно-органических растворителей на термодинамику сольватации и электрохимические свойства сульфозамещенных фталоцианинатов кобальта(II), никеля(II) и меди(II). Аргументировано применение фталоцианинатов *d*-металлов как наиболее эффективных модификаторов для аналитического определения витамина В<sub>6</sub> в широком диапазоне концентраций. Получены химически модифицированные сульфозамещенным фталоцианинатов кобальта(II) золотой и платиновый электроды, пригодные для использования в качестве сенсора на витамин В<sub>6</sub> (пиридоксин) в водных растворах. Полученные сигналы окисления форм витамина В<sub>6</sub> можно использовать в качестве аналитических для разработки методик их определения в составах, где преимущественно присутствует пиридоксин.



*Руководитель работ – д.х.н. Вашурин А.С. (Ивановский государственный химико-технологический университет)*

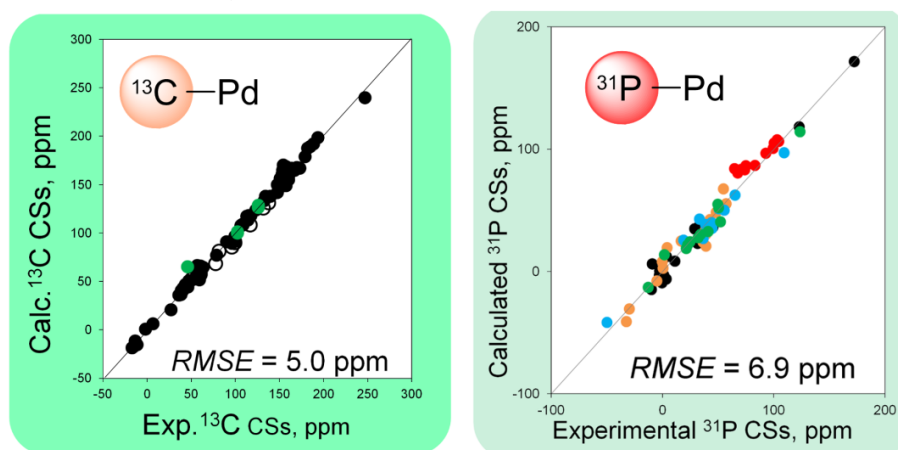
#### **Публикации:**

Kovanova M.A., Kuz'mina I.A., Postnov A.S., Korneva A.O., Vashurin A.S. Solvation and Electrochemical Properties of Cobalt Tetrasulfophthalocyaninate in Water – N,N-Dimethylformamide Mixtures // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2023. – V.97, № 3. – P. 477-481. DOI: 10.1134/S0036024423030147

Kovanova M.A., Tikhomirova T.V., Sakhapov I.F., Gafurov Z.N., Yakhvarov D.G., Vashurin A.S. Peculiarities of the Electrochemical Behavior of Chlorophenoxy-Substituted Phthalocyanines of Cobalt and Copper in Non-

## 5. Расчетный протокол для оценки химических сдвигов ЯМР $^{13}\text{C}$ и $^{31}\text{P}$ атомов, непосредственно связанных с палладием

Разработан расчетный протокол для оценки химических сдвигов (ХС) ЯМР  $^{13}\text{C}$  и  $^{31}\text{P}$  атомов, непосредственно связанных с палладием. Показано, что ХС ЯМР  $^{31}\text{P}/^{13}\text{C}$  можно рассчитать в рамках уровня теории Кона–Шэма для большинства комплексов с классическими координационными связями. Для комплексов с ковалентно связанными лигандами для оценки  $^{13}\text{C}$  ХС атомов, непосредственно связанных с Pd, необходимо использование полностью релятивистского уровня теории Дирака–Кона–Шэма (mDKS). Предложенный подход позволяет надежно идентифицировать тип координации и исправить ряд ошибок в литературе, в том числе сделать ревизию метода Хьюна (*Chem. Rev.* 2018, 118, 19, 9457).



Руководитель работ – д.х.н. Латыпов Ш.К. (Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова – обособленного структурного подразделения ФИЦ КазНЦ РАН)

### Публикация:

Kondrashova S.A., Latypov Sh.K. DFT Approach for Predicting  $^{13}\text{C}$  NMR Shifts of Atoms Directly Coordinated to Pd // *Organometallics*. – 2023. – V. 42, №15. – P. 1951-1962. DOI: 10.1021/acs.organomet.3c00186

## 6. Оригинальный метод определения времени пролета ионов

Во времяпролетных масс-спектрометрах в качестве детектора ионов используются микроканальные пластины (МСП) для регистрации ионов и преобразователь (TDC) для определения времени пролета ионов в масс-

анализаторе. Значительный разброс амплитуд импульсов для ионов одной массы приводит к ошибке в определении времени их пролета (рис. 1). Этот эффект ограничивает разрешение масс-спектрометра, которое является важнейшей характеристикой прибора. Разработан оригинальный метод определения времени пролета ионов посредством одновременной регистрации в параллельных каналах TDC переднего и заднего фронтов импульса ( $t_1, t_2$ ); время пролета  $((t_1+t_2)/2)$  не зависит от амплитуды импульса и используется при построении спектра. Предложенный метод позволил увеличить величину массового разрешения времяпролетного масс-спектрометра с 35000 до 55000 FWHM (рис. 2), что соответствует мировому уровню для приборов данного типа.

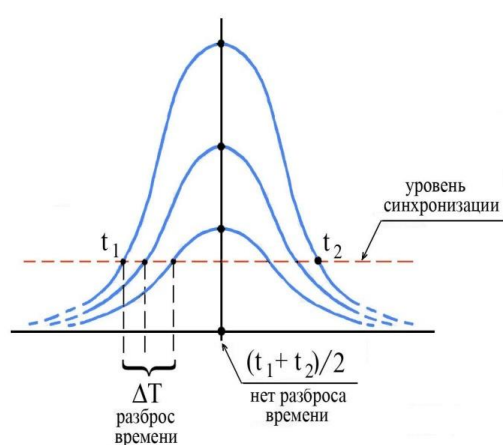


Рисунок 1.

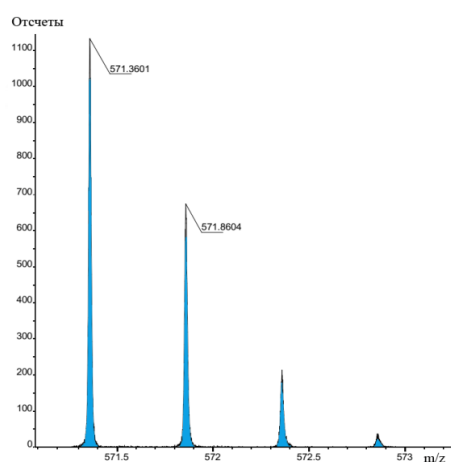


Рисунок 2.

*Руководитель работ – к.ф.-м.н. Козловский В.И. (ФИЦ Химической физики им. Н.Н. Семенова РАН (Филиал))*

**Публикация:**

Filatov V.V., Filatov S.V., Pikhtelev A.R., Zhu H., Sulimenkov I.V., Huang Z., Brusov V.S., Kozlovskiy V.I. Ion detector of time-of-flight mass spectrometer with registration of leading and trailing edges // Review of Scientific Instruments. – 2023. – V. 94, № 10. – a.n. 103303. DOI: 10.1063/5.0160716

## V. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ НЕОРГАНИЧЕСКИХ И ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

### 1. Изучение процесса синтеза оксидов NiO, $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$ (LSCF) и $(\text{CeO}_2)_{0.8}(\text{Sm}_2\text{O}_3)_{0.2}$

С целью разработки экспериментальных подходов к получению миниатюрных ТОТЭ изучены процессы синтеза оксидов NiO,  $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$  (LSCF) и  $(\text{CeO}_2)_{0.8}(\text{Sm}_2\text{O}_3)_{0.2}$  (SDC), характеризующихся различной микроструктурой. Разработаны методики получения функциональных чернил на основе оксидных порошков для последовательной микроэкструзионной печати анодных, электролитных и катодных покрытий с формированием трехслойных структур состава (NiO-SDC)/SDC/(LSCF-SDC). Установлено, что материалы являются наноразмерными и не содержат дефектов в виде отслоений, разрывов или примесных включений, а для слоёв NiO-SDC и LSCF-SDC подтверждена их композитная структура. Выполненное исследование демонстрирует возможности разработанной технологии микроэкструзионной печати многослойных иерархически организованных проводящих наноструктур заданной геометрии, что важно для развития подходов к миниатюризации ТОТЭ.

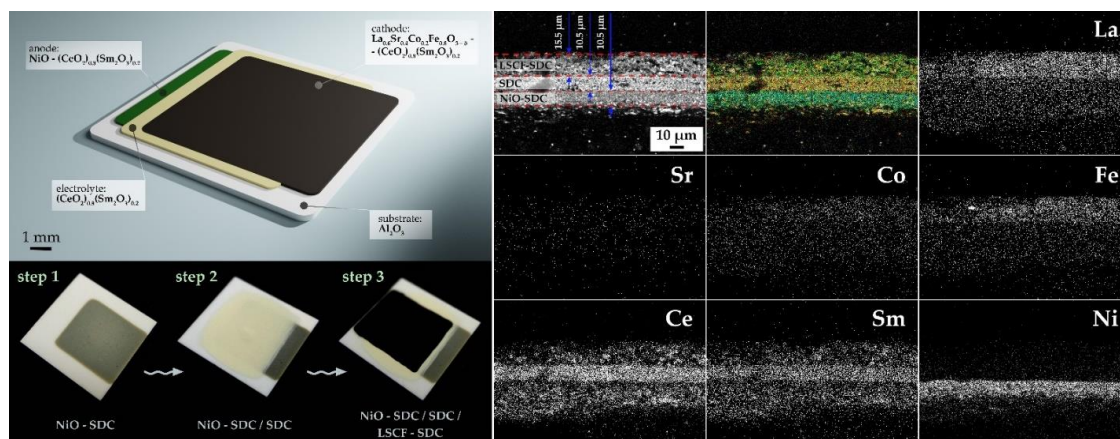


Схема формируемой трёхслойной структуры (NiO-SDC)/SDC/(LSCF-SDC) (сверху слева) и внешний вид функциональных слоёв (снизу слева), последовательно нанесённых на поверхность  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -подложки (слой композитного анода, слой электролита на поверхности анода, слой композитного катода на поверхности электролита). Микроструктура (справа сверху) поперечного среза напечатанной трёхслойной структуры состава (NiO-SDC)/SDC/(LSCF-SDC), а также карты распределения химических элементов по его поверхности.

*Руководитель работ – академик РАН Кузнецов Н.Т. (Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН)*

#### **Публикации:**

Simonenko T.L., Simonenko N.P., Gorobtsov Ph.Y., Simonenko E.P., Kuznetsov, N.T. Microextrusion Printing of Multilayer Hierarchically Organized

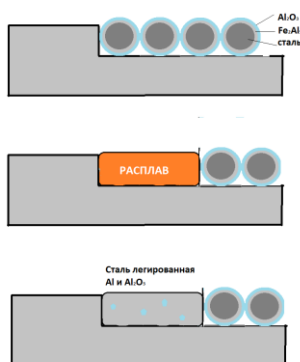


Planar Nanostructures Based on NiO,  $(\text{CeO}_2)_{0.8}(\text{Sm}_2\text{O}_3)_{0.2}$  and  $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Fe}_{0.8}\text{O}_{3-\delta}$  // *Micromachines*. – 2023. – V. 14. – a.n. 3. DOI: 10.3390/mi14010003

Simonenko T.L., Simonenko N.P., Gorobtsov P.Y., Volkov I.A., Simonenko E.P., Kuznetsov N.T. Hydrothermal Synthesis of Nickel Oxide and Its Application in the Additive Manufacturing of Planar Nanostructures // *Molecules*. – 2023. – V. 28. – a.n. 2515. DOI: 10.3390/molecules28062515

## 2. Химическая технология плакированных металлических и керамических порошков для аддитивных технологий

Разработана химическая технология плакирования металлических и керамических порошков для аддитивных технологий. В результате улучшаются технологические свойства (текучесть, поглощение лазерного излучения) и коррозионная стойкость порошков. Физико-химические взаимодействия вводимых компонентов с основой формируют в процессе 3D печати лазерным сплавлением трехмерную упрочняющую сетку новых фаз, что увеличивает прочность, твердость износостойкость изделий. Также снижается коробление и дефекты печати. Разработана технология изготовления и печати порошками и смесями порошков ядро/оболочка: 45ХН2МФА/ $\text{Fe}_2\text{Al}_5$ , WC/Ni, WC/Ni, WC/Co. Разработана технология металлокерамики 45ХН2МФА – WC.



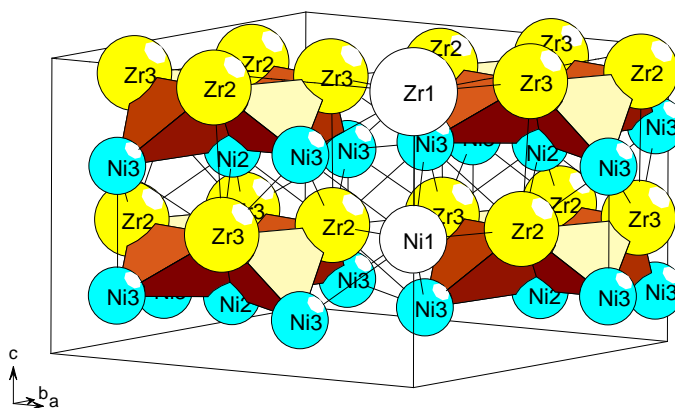
Лазерная 3D печать плакированным порошком и формирование упрочняющих фаз.

*Руководитель работ – академик РАН Шевченко В.Я. (Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН)*

## 3. Комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур

Осуществлен комбинаторно-топологический анализ и моделирование самосборки кристаллических структур. Для кристаллической структуры  $\text{Zr}_{72}\text{P}_{36}$  установлены 40 вариантов кластерного представления 3D атомной

сетки с числом структурных единиц 5, 6, 7. Определены структурные единицы в виде пирамиды, тетраэдра, супратетраэдра из четырех связанных тетраэдров. Реконструирован симметричный и топологический код процессов самосборки 3D структур из кластеров-прекурсоров в виде: первичная цепь → слой → каркас.



Слой, формирующий структуру  $Zr_{72}P_{36}$ .

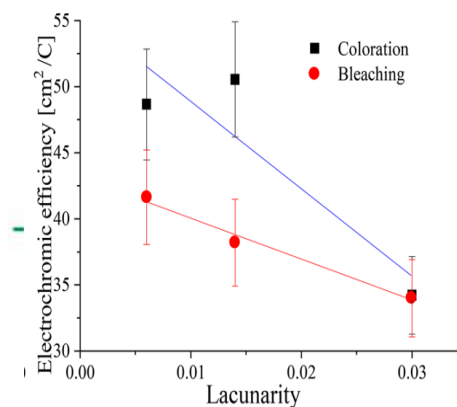
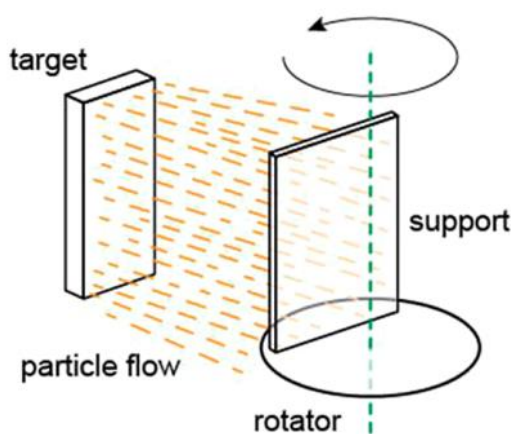
*Руководитель работ – академик РАН Шевченко В.Я. (Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН)*

**Публикация:**

Shevchenko V.Ya., Ilyushin G.D. Cluster Self-Organization of Intermetallic Systems: Cluster Precursors K4, K5, and K9 for the Self-Assembly of  $Zr_{72}P_{36}$  -  $oS108$ ,  $Zr_{18}Ni_{22}$  -  $tI40$ , and  $Zr_4Ni_4$  -  $oS8$  Crystal Structures // *Glass Physics and Chemistry*. – 2023. – V. 49, №3. – P. 224-233. DOI: 10.1134/S1087659623600096

**4. Новый метод формирования наноструктурированных тонких пленок: периодическая модуляция угла напыления**

Разработан новый метод формирования наноструктурированных тонких пленок: периодическая модуляция угла напыления (Periodic Modulation of the Deposition Angle, PMDA). На примере оксида вольфрама продемонстрирована эффективность метода для высокопроизводительного формирования электрохромных устройств с высокими характеристиками. С помощью инструментов цифрового материаловедения – фрактального анализа и построения бар-кодов – показано, что функциональные характеристики пленок коррелируют с особенностями их микроструктуры, обусловленными технологией формирования.



Метод формирования наноструктурированных слоев (слева) и взаимосвязь лакуарности и электрохромной эффективности (справа).

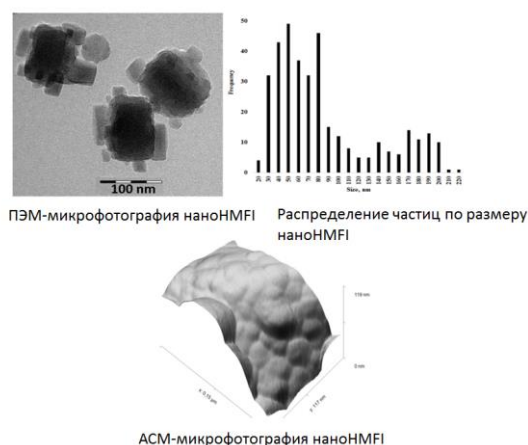
*Руководитель работ – академик РАН Шевченко В.Я. (Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН) и д.х.н. Скорб Е.А. (ИТМО)*

#### **Публикация:**

Sychov M., Eruzin A., Semenova A., Katashev P., Mjakin S., Zhukov M., Aglikov A., Nosonovsky M., Skorb E. Deposition of Nanostructured Tungsten Oxide Layers by a New Method: Periodic Modulation of the Deposition Angle // *Langmuir*. – 2023. – V.39, №35. – P. 12336-12345. DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c01290

### **5. Гидротермально-микроволновой метод синтеза наноразмерного цеолита ZSM-5 в протонной форме**

Разработан гидротермально-микроволновой метод синтеза наноразмерного цеолита ZSM-5 (HMFI) в протонной форме. Синтезированный материал образован частицами цеолита размером 30-80 нм, за счёт чего имеет высокие значения удельной поверхности, объема микропор, межчастичной пористости. Синтезированный материал содержит 195 мкмоль/г кислотных центров десорбции аммиака. Свойства синтезированного материала позволяют рассматривать его в качестве перспективного катализатора ряда нефтехимических процессов.



*Руководитель работ – академик РАН Дедов А.Г. (Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН)*

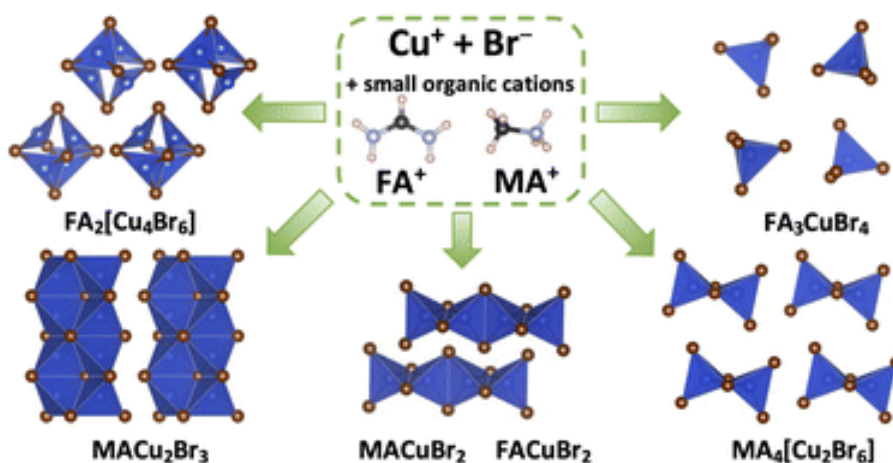
**Публикация:**

Дедов А.Г., Караваев А.А., Локтев А.С., Землянский П.В. Способ получения наноразмерного цеолита структурного типа ZSM-5 в протонной форме. // Патент РФ № 2787374. Опубл. 09.01.2023. Бюл. № 1.

**6. Корреляционные зависимости состава, структуры и свойств гибридных материалов на основе сложных галогенидов меди с катионами метиламмония и формамидиния**

Рассмотрены новые корреляционные зависимости состава, структуры и свойств гибридных материалов на основе сложных галогенидов меди с катионами метиламмония и формамидиния. Установлены ключевые структурные зависимости и соответствующие синтетические подходы для целевого формирования новых фаз, включая  $MA_2Cu_2Br_3$ ,  $FA_2[Cu_4Br_6]$ ,  $MA_2CuBr_2$ ,  $FA_2CuBr_2$ , и  $FA_3CuBr_4$ , с уникальными оптическими и оптоэлектронными свойствами. Гибридные галокупраты(I) в настоящее время являются предметом интенсивных исследований как перспективные материалы для различных оптоэлектронных приложений. Этот класс материалов характеризуется большим структурным разнообразием, обусловленным большим разнообразием размеров и формы органических катионов. Поэтому изучение связи состав-структура-свойства является ключевым шагом для рационального создания новых галокупратных материалов с заданными свойствами. В данной работе всесторонне исследованы системы  $MA_2Br/CuBr$  и  $FA_2Br/CuBr$  ( $MA^+ =$  метиламмоний и  $FA^+ =$  формамидиний) и установлено существование пяти новых фаз (а именно

MACu<sub>2</sub>Br<sub>3</sub>, FA<sub>2</sub>[Cu<sub>4</sub>Br<sub>6</sub>], MACuBr<sub>2</sub>, FACuBr<sub>2</sub> и FA<sub>3</sub>CuBr<sub>4</sub>), относящихся к четырем различным структурным типам и трем различным стехиометриям A<sup>+</sup>:Cu<sup>+</sup> (A<sup>+</sup> = MA<sup>+</sup>/FA<sup>+</sup>). Оптические свойства обнаруженных фаз изучены методами абсорбционной и низкотемпературной фотолюминесцентной спектроскопии. На основе кристаллохимического анализа удалось объяснить уникальное структурное разнообразие бромкупратов на основе МА и ФК, а также выявить новые связи структура-свойство.



*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

#### **Публикация:**

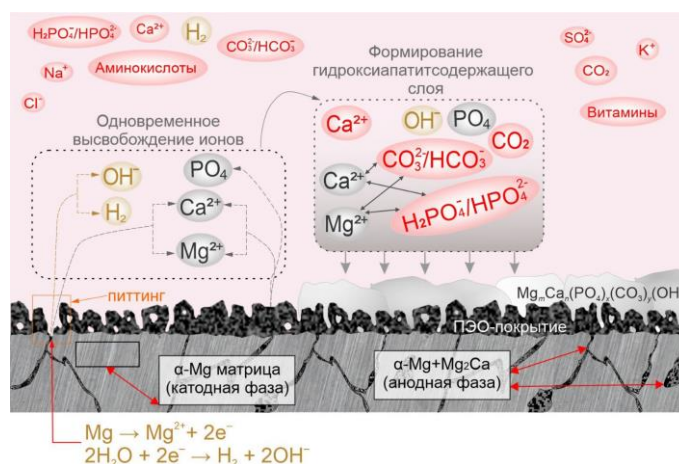
Belikova D.E., Fateev S.A., Khrustalev V.N., Marchenko E.I., Goodilin E.A., Wang Sh., Tarasov A.B. Exceptional structural diversity of hybrid halocuprates(I) with methylammonium and formamidinium cations // Dalton Transactions. – 2023. – V. 52. – P. 7152-7160. DOI: 10.1039/D3DT00687E

### **7. Способ формирования «умных систем, обладающих эффектом самозалечивания»**

Разработан способ формирования «умных систем, обладающих эффектом самозалечивания» – гибридных покрытий на биорезорбируемых магниевых сплавах для имплантационной хирургии. Поверхностные слои, сформированные с использованием метода плазменного электролитического окисления, в пористой части содержат гидроксиапатит (естественный компонент костной ткани), органические биосовместимые ингибиторы коррозии (олеат натрия, бензотриазол, 8-оксихинолин) и биodeградируемый полимерный материал (поликапролактон). Высокие защитные и остеоиндуктивные свойства покрытий подтверждены результатами



испытаний *in vitro* в среде для культивирования клеток млекопитающих (MEM). Предложен механизм биорезорбции материала с покрытием, учитывающий состав и микроструктуру защитного слоя.



Установленный механизм коррозионной деградации сплава Mg–0,8Ca с ПЭО-покрытием в среде для культивирования клеток млекопитающих MEM.

*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гнеденков С.В. (Институт химии им. ДВО РАН).*

#### **Публикации:**

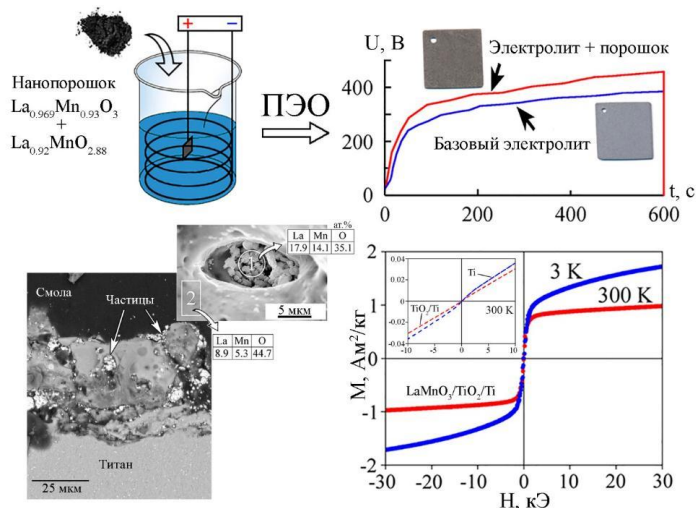
Gnedenkov A.S., Sinebryukhov S.L., Filonina V.S., Gnedenkov S.V. Hydroxyapatite-containing PEO-coating design for biodegradable Mg-0.8Ca alloy: Formation and corrosion behaviour // *Journal of Magnesium and Alloys*. – 2023 DOI: 10.1016/j.jma.2022.12.002

Gnedenkov A.S., Sinebryukhov S.L., Filonina V.S., Ustinov A.Y., Sukhoverkhov S.V., Gnedenkov S.V. New polycaprolactone-containing self-healing coating design for enhance corrosion resistance of the magnesium and its alloys // *Polymers*. – 2023. – V. 15, №1. – a.n. 202. DOI: 10.3390/polym15010202

### **8. Разработка подходов к формированию слоистых композитов $\text{LaMnO}_3 + \text{La}_{7.58}(\text{Si}_{1.048}\text{O}_4)_6\text{O}_2 / \text{TiO}_2/\text{Ti}$**

Предложен новый подход к формированию слоистых композитов  $\text{LaMnO}_3 + \text{La}_{7.58}(\text{Si}_{1.048}\text{O}_4)_6\text{O}_2 / \text{TiO}_2/\text{Ti}$  с использованием плазменно-электролитической обработки титана в силикатном электролите, содержащем порошок манганита лантана, предварительно синтезированного твердофазным методом. Полученные покрытия толщиной  $55 \pm 6$  мкм состоят из  $\text{TiO}_2$  (рутила),  $\text{LaMnO}_3$  и  $\text{La}_{7.58}(\text{Si}_{1.048}\text{O}_4)_6\text{O}_2$  и содержат в поверхностном слое до 3.3 ат. % La и 3.7 ат.% Mn. В сформированном композите присутствуют фрагменты, проявляющие ферромагнитное упорядочение с  $H_c$

= 300 Э при 300 К. Снижение температуры до 3 К не приводит к существенным изменениям магнитных характеристик. Предложенный подход открывает новые возможности для направленного синтеза мультиферроидных материалов (пленок, покрытий) в результате ПЭО-обработки металлических подложек в электролитах с дисперсными частицами мультиферроиков.



Формирование магнитоактивных композитов  $\text{LaMnO}_3/\text{TiO}_2/\text{Ti}$  в силикатном электролите, содержащем частицы манганита лантана (вверху); полевые зависимости магнитного момента, поперечное сечение покрытия и пора на поверхности, заполненная частицами (внизу).

*Руководитель работ – чл.-корр. РАН Гнеденков С.В. (Институт химии ДВО РАН)*

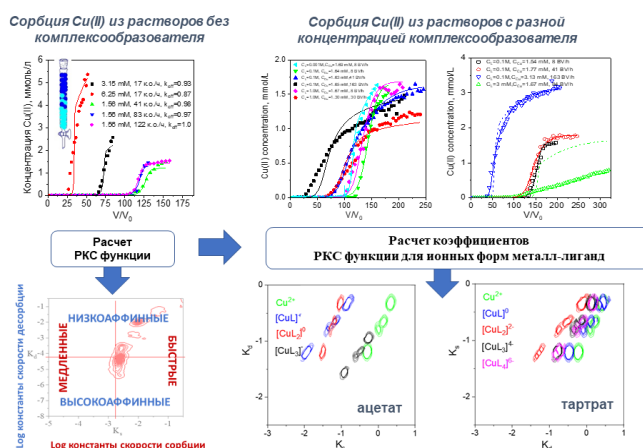
### Публикация:

Adigamova M.V., Malyshev I.V., Lukiyanchuk I.V., Tkachenko I.A. A novel approach to obtaining  $\text{LaMnO}_3/\text{TiO}_2/\text{Ti}$  composites: Features of plasma electrolytic formation, composition, and magnetic properties // Journal of Alloys and Compounds. – 2023. – V. 967. – a.n. 171675. DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.171675

## 9. Разработка модели распределения сорбционных центров материалов

Разработана новая версия модели распределения сорбционных центров материалов по константам скоростей сорбции и десорбции (РКС модель), учитывающая равновесия комплексообразования в растворе. С применением модели и программного комплекса для ее реализации можно рассчитать коэффициенты функции РКС для сорбции различных ионных форм металлов и использовать полученные данные для предсказания свойств сорбентов в широком интервале концентраций комплексообразователей в растворе. Верификация модели проведена на выходных кривых сорбции ионов меди на

монолитных полиаминных сорбентах из растворов, содержащих тартраты и ацетаты. Было установлено, что, несмотря на низкие константы устойчивости ацетатных комплексов меди, присутствие ацетатов оказывает большое влияние на кинетику сорбции ионов меди. Полученные результаты подтверждают важность информации о константах скоростей сорбции разных ионных форм металлов для оптимизации работы сорбционных фильтров.



Руководитель работ – чл.-корр. РАН Братская С.Ю. (Институт химии ДВО РАН)

## Публикации:

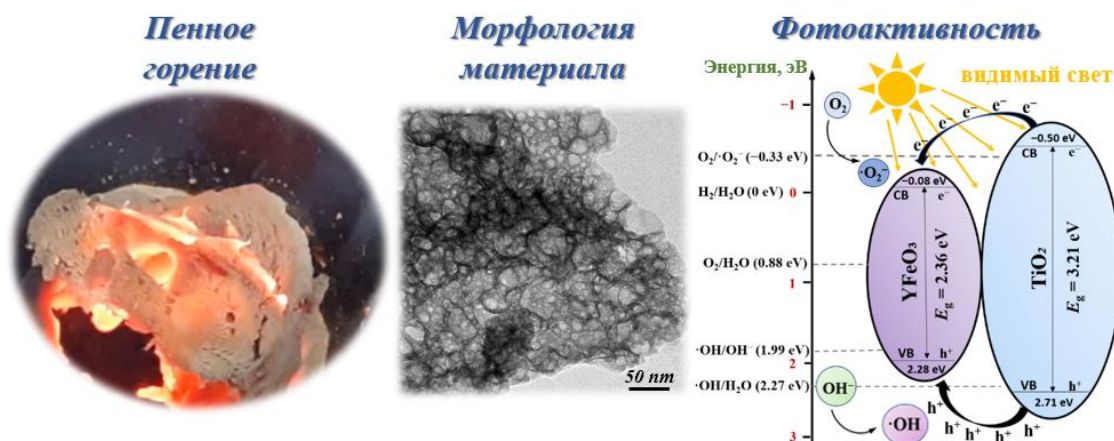
Golikhov A., Privar Y., Balatskiy D., Polyakova N., Bratskaya S. Extended rate constants distribution (RCD) model for sorption in heterogeneous systems: 4. Kinetics of metal ions sorption in the presence of complexing agents – Application to Cu(II) sorption on polyethyleneimine cryogel from acetate and tartrate Solutions // International Journal of Molecular Sciences. 2023. – V. 24, №15. – a.n. 12385. DOI: 10.3390/ijms241512385

Программа ЭВМ «Моделирование динамики сорбции с учетом комплексообразования» / Голиков А.П. Свидетельство № 2023684587, дата регистрации 16.11.2023. Опубликовано 16.11.2023, бюл. №11.

## 10. Фотоактивные наноконкомпозиты YFeO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub>, синтезированные методом пенного горения

В условиях горения геля, полученного из водного раствора нитратов железа (III) и иттрия и глицина, с включениями наночастиц TiO<sub>2</sub> получен наноконкомпозит YFeO<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub>. Обнаружены режимы горения, при которых происходит ограничение роста наночастиц за счёт самоорганизации в реакционной среде квазидвумерных нанореакторов – пенных структур, в

которых и взаимодействуют реагенты. Варьирование размеров частиц продуктов реакции при этом осуществляется путём изменения толщины пенных оболочек и концентрации в них реагентов. Метод растворного горения в таких случаях трансформируется в новый, предложенный авторами метод – метод пенного горения. Методом пенного горения синтезированы как однофазные, так и композиционные наноструктуры. Показано, что наноккомпозит  $\text{YFeO}_3/\text{TiO}_2$  перспективен в качестве функциональной основы каталитических материалов для фотоиндуцируемой очистки водных сред от органических загрязнителей.



Руководитель работ – профессор РАН, д.х.н. Альмяшева О.В. (Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН)

**Публикация:**

Cam T.S., Seroglazova A.S., Chebanenko M.I., Mardiyev B., Dzhevaga E.V., Almjasheva O.V., Popkov V.I. Colloidal solution combustion synthesis of *am*-TiO<sub>2</sub>/*o*-YFeO<sub>3</sub> nanocomposites: effect of titania loading on the photo-Fenton-like activity // Journal of Sol-Gel Science and Technology. – 2023. – V. 108. – P. 502-513 DOI: 10.1007/s10971-023-06206-7

**11. Влияние механической активации и введения легкоплавких добавок на ионную проводимость твердого электролита  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$**

Синтезирован перспективный твердый электролит  $\text{Li}_{1.3}\text{Al}_{0.3}\text{Ti}_{1.7}(\text{PO}_4)_3$  (LATP) с повышенной проводимостью. Для увеличения межзеренной проводимости использованы два подхода: путем уплотнения структуры в процессе спекания за счет введения легкоплавких добавок и с использованием механической активации (МА), приводящей к уменьшению размера частиц и аморфизации поверхности. В работе проведено сравнительное исследование двух подходов к увеличению межзеренной

проводимости LATP: с использованием механической активации в мельнице АГО-2 и введением легкоплавких добавок  $\text{LiPO}_3$  ( $t_{\text{пл}} = 656^\circ\text{C}$ ) и  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  ( $t_{\text{пл}} = 917^\circ\text{C}$ ). Показано, что механическая активация приводит к увеличению общей проводимости LATP от  $0,57 \cdot 10^{-4}$  до  $1,20 \cdot 10^{-4}$   $\text{См} \cdot \text{см}^{-1}$ , в то время как введение легкоплавких добавок  $\text{LiPO}_3$  и  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$  в количестве 5 мас. % увеличивает проводимость до  $1,53 \cdot 10^{-4}$  и  $1,50 \cdot 10^{-4}$   $\text{См} \cdot \text{см}^{-1}$ , соответственно.



Схема синтеза твердого электролита  $\text{Li}_{1,3}\text{Al}_{0,3}\text{Ti}_{1,7}(\text{PO}_4)_3$  с использованием механической активации в мельнице АГО-2 и введением легкоплавких добавок  $\text{LiPO}_3$  и  $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ .

*Руководитель работ – д.х.н. Косова Н.В. (Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН)*

### Публикация:

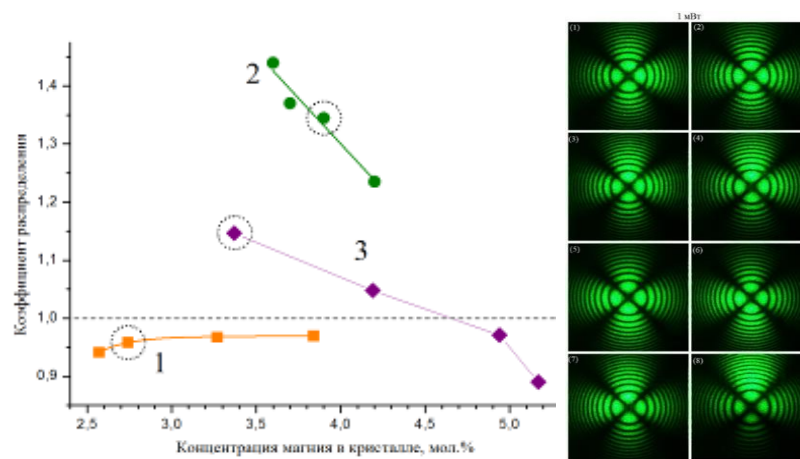
Шиндров А.А., Косова Н.В. Сравнительное исследование влияния механической активации и введения легкоплавких добавок на ионную проводимость  $\text{Li}_{1,3}\text{Al}_{0,3}\text{Ti}_{1,7}(\text{PO}_4)_3$  // *Электрохимия*. – 2023. – Т. 59, № 3. – С. 176-182. DOI: 10.31857/S042485702303012X

## 12. Создание технологических основ получения кристаллов ниобата лития двойного легирования магнием и бором $\text{LiNbO}_3:\text{Mg},\text{B}$

Впервые получены кристаллы ниобата лития, легированные магнием и бором, в которых повышение оптической стойкости происходит при гораздо более низкой концентрации магния (2.5 молекулярных процента), чем в применяемых в оптической промышленности кристаллах ниобата лития, легированных только магнием (5.5 молекулярных процентов), и в отличие от этих кристаллов полностью отсутствуют ухудшающие качество кристаллов полосы роста. Эффект достигнут за счет введения в расплав сильного комплексообразователя - бора. Определены оптимальные технологические подходы к выращиванию оптически совершенных кристаллов ниобата лития, легированных магнием и бором. Выращены и исследованы две серии кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg},\text{B}$ , легированных нефоторефрактивной металлической



примесью (Mg), понижающей эффект фоторефракции, и неметаллической примесью (В), также понижающей фоторефрактивную чувствительность и повышающей оптическую и композиционную однородность кристалла  $\text{LiNbO}_3$ . Рассмотрены физико-химические особенности выращивания кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}:\text{В}$  из легированного бором расплава с использованием шихты, полученной по разным технологиям с использованием двух методов легирования. Проведено сравнение структурных и физико-химических характеристик кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}:\text{В}$  с характеристиками кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$  разного генезиса и кристалла  $\text{LiNbO}_{3\text{stoich}}$ . Установлены физико-химические и структурные причины различия коэффициентов распределения  $K_D$  магния при выращивание кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$  и  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$  из шихты гомогенного и твердофазного легирования. Методами оптической спектроскопии, лазерной коноскопии и фотоиндуцированного рассеяния света исследованы оптические характеристики кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$ . Проведена оценка влияния присутствия бора в расплаве на процесс роста кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$  разного генезиса, их микроструктуру, композиционную и оптическую стойкость и однородность. Определены оптимальные технологические подходы к выращиванию оптически однородных кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$  с высокой стойкостью к оптическому повреждению как нового эффективного оптического материала для преобразования лазерного излучения.



Зависимость коэффициента распределения  $K_D$  от концентрации магния в кристаллах  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$ , выращенных из шихты твердофазного легирования (1), шихты гомогенного легирования (2), а также в кристаллах  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$ , выращенных из шихты твердофазного легирования (3). Кружками отмечены кристаллы  $\text{LiNbO}_3:\text{В}:\text{Mg}$  и  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}$ , выращенные из расплавов с одинаковой концентрацией магния.

Исследование кристаллов  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg}:\text{В}$  методами лазерной коноскопии (справа).

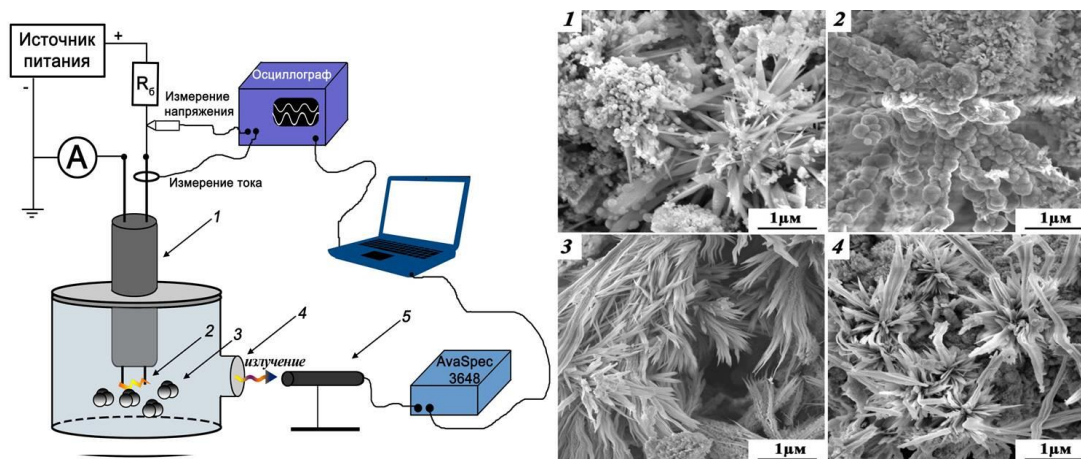
*Руководители работ – д.т.н. Палатников М.Н. и д.ф.-м.н. Сидоров Н.В. (Институт химии и технологии редких элементов и минерального сырья им. И.В. Тананаева Кольского научного центра РАН)*

### **Публикация:**

Palatnikov M., Makarova O., Kadetova A., Sidorov N., Teplyakova N., Biryukova I., Tokko O. // Structure, optical properties and physicochemical features of  $\text{LiNbO}_3:\text{Mg,B}$  crystals grown in a single technological cycle: an optical material for converting laser radiation // *Materials*. – 2023. – V. 16. – a.n. 4541. DOI: 10.3390/ma16134541

### **13. Разработка нового инновационно привлекательного плазмохимического подхода для получения ферромагнетиков в растворе**

Впервые с использованием низкотемпературной подводной плазмы синтезированы наночастицы  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  и  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ . Источником металлов для формирования наноструктур являлись электроды, распыляемые в процессе горения подводной плазмы. Варьирование параметров плазмы (ток разряда, полярность материалов электродов, время горения) позволяет получить композиты с заданным соотношением никелевого феррита. Это обеспечивает низкие значения ширины линии ферромагнитного резонанса  $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$ . Размеры частиц составляют 70 – 400 нм в зависимости от условий их получения.



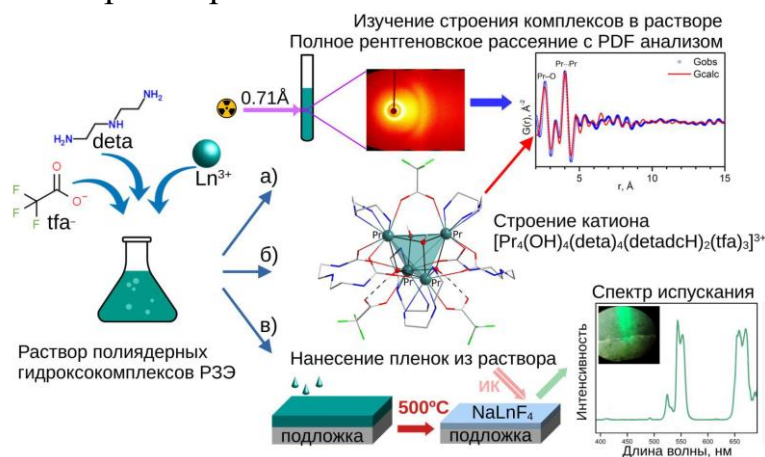
*Руководитель работ – проф., д.х.н. Агафонов А.В. (Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН)*

### **Публикация:**

Хлюстова А.В., Шипко М.Н., Степович М.А., Агафонов А.В., Сироткин Н.А., Савченко Е.С. Особенности состава и магнитных свойств композитов на основе ультрадисперсных частиц  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ , полученных в условиях низкотемпературной подводной плазмы // *Известия РАН. Серия Физическая*. – 2023. – Т.87, №10. – С. 1517-1520. DOI: 10.31857/S0367676523702654

## 14. Разработка комплексного подхода к нанесению тонких пленок из растворов координационных соединений

Разработан комплексный подход к нанесению тонких пленок из растворов координационных соединений, в том числе а) предложен и широко используется метод исследования строения комплексов в растворе с помощью анализа функции парного распределения (PDF) по результатам измерения полного рентгеновского рассеяния на лабораторном дифрактометре; б) установлено кристаллическое строение полиядерных гидроксокомплексов РЗЭ, а по совпадению PDF для кристаллического комплекса ( $G_{\text{calc}}$ ) и для раствора ( $G_{\text{obs}}$ ) доказано существование комплексов такого же строения в растворе.



Общая схема нанесения тонких пленок функциональных материалов из растворов координационных соединений и их исследования.

*Руководитель работ – к.х.н. Цымбаренко Д.М. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

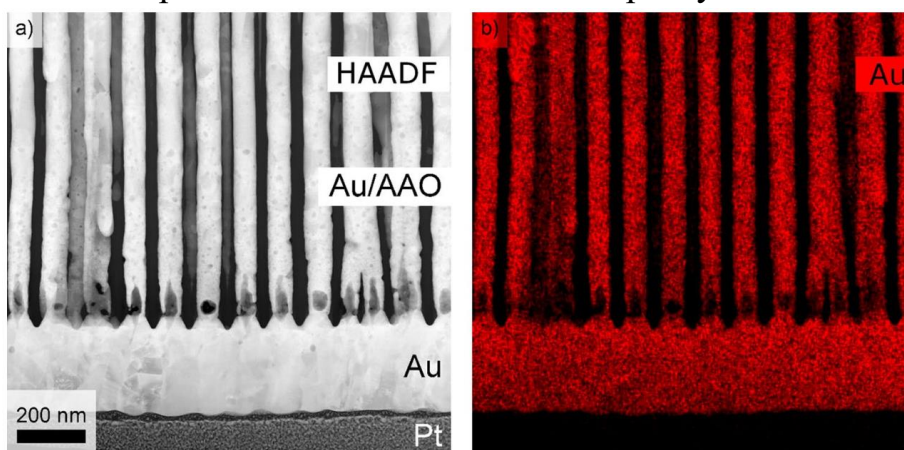
### **Публикация:**

Gashigullin R., Kendin M., Martynova I., Tsybarenko D. Diverse Coordination Chemistry of the Whole Series Rare-Earth L-Lactates: Synthetic Features, Crystal Structure, and Application in Chemical Solution Deposition of  $\text{Ln}_2\text{O}_3$  Thin Films // *Molecules*. – 2023. – V. 28. – a.n. 5896. DOI: 10.3390/molecules28155896

## 15. Разработка теоретических моделей темплатного электроосаждения металлов в пористые пленки анодного оксида алюминия

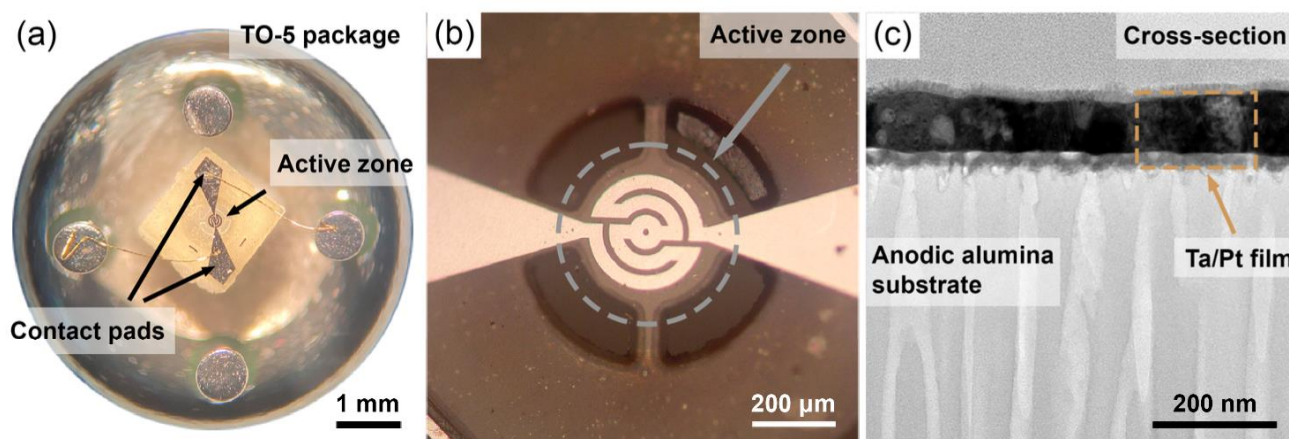
Разработаны теоретические модели темплатного электроосаждения металлов в пористые пленки анодного оксида алюминия с учетом влияния неактивных пор, конусности пор, естественной конвекции. Показаны особенности роста металла на ранних стадиях темплатного

электроосаждения, связанные с ростом нанотрубок. Численные результаты согласуются с экспериментальными данными по росту нанонитей Cu и Au.



ПЭМ изображение поперечного среза наноконструкта Au/ААО (а) и распределение золота по данным энергодисперсионного анализа (b).

Получены тонкопленочные микронагреватели на подложках из пористого анодного оксида алюминия и предложены пути увеличения их операционной стабильности за счет добавления легирующих добавок. Исследован температурный диапазон устойчивости пористых плёнок анодного оксида алюминия, сформированных в электролите на основе смеси кислот.



Платиновый микронагреватель на подложке из пористого анодного оксида алюминия. Представлены изображения устройства на разных масштабах.

*Руководитель работ – к.х.н. Напольский К.С. (Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова)*

**Публикации:**

Kalinin I.A., Davydov A.D., Napolskii K.S., Sobolev A., Shatalov M., Zinigrad M., Bograchev D. Template-assisted electrodeposition of metals: A method for determining the fraction of active nanopores // *Electrochemistry*



Communications. – 2023. – V. 149. – a.n. 107469. DOI: 10.1016/j.elecom.2023.107469

I.A. Kalinin, A.D. Davydov, A.P. Leontiev, K.S. Napolskii, A. Sobolev, M. Shatalov, M. Zinigrad, D. Bograchev Influence of natural convection on the electrodeposition of copper nanowires in anodic aluminium oxide templates // *Electrochimica Acta*. – 2023. – V. 441. – a.n. 141766. DOI: 10.1016/j.electacta.2022.141766

Росляков И.В., Колесник И.В., Белокозенко М.А., Япрынцева А.Д., Напольский К.С. Термические превращения пористого анодного оксида алюминия, сформированного в электролитах на основе смесей серной и щавелевой кислот // *Журнал неорганической химии*. – 2023. – Т. 68, № 7. – С. 988-996. DOI: 10.31857/S0044457X22602061

## **16. Волоконные световоды из особоцистых оксидных и неоксидных стекол с новым уровнем функциональных свойств**

Методом MCVD получена серия заготовок волоконных световодов с бороалюмосиликатной сердцевиной, легированной хромом. С использованием дифференциально-термического анализа установлено, что добавка оксида бора эффективно снижает температуру кристаллизации системы. Снижение температуры кристаллизации более чем на 40 °С позволило использовать более мягкие условия термообработки относительно алюмосиликатной матрицы. Исследована зависимость оптических свойств световодов от параметров термообработки. В целом происходит отжиг полос поглощения иона  $\text{Cr}^{4+}$  с одновременным увеличением интенсивности полос поглощения иона  $\text{Cr}^{3+}$ . После проведенной термообработки наблюдается кратное возрастание интенсивности люминесценции ионов хрома в образце волоконного световода относительно исходного образца волоконного световода, что указывает на упорядочение окружения иона хрома. Методом рентгенофазового анализа подтверждено образование муллита без дополнительных кристаллических фаз. Из новых составов стекол сформированы заготовки с волноводной структурой. Преформы характеризуются высокой оптической однородностью, низким поглощением гидроксильных групп в характеристических полосах ИК-диапазона (до  $n \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$  около  $\sim 3 \text{ мкм}$ ). Вытянуты образцы волоконных световодов для передачи излучения в диапазоне длин волн 2-3 мкм. Внешние диаметры многомодовых волокон 200-250 мкм, диаметры сердцевины 30-70 мкм. Волокна механически прочны, с высоким качеством геометрии волокна и границы раздела сердцевина/оболочка. Оптические потери в лучших образцах не более 0,5



дБ/м в диапазоне 1,1-2,7 мкм, числовая апертура  $NA = 0,12$  на длине волны 1,56 мкм;  $NA = 0,13$  на длине волны 2 мкм.

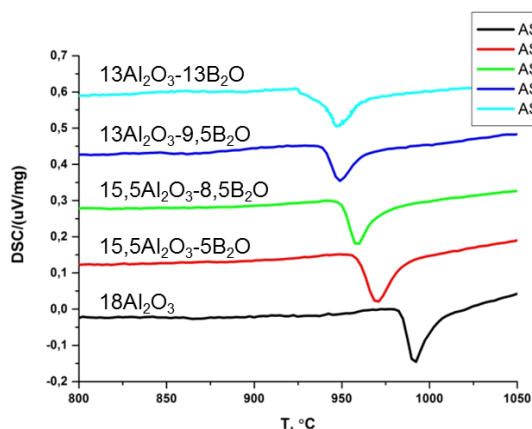


Рисунок 1. Термограммы бороалюмосиликатного стекла сердцевины световода.

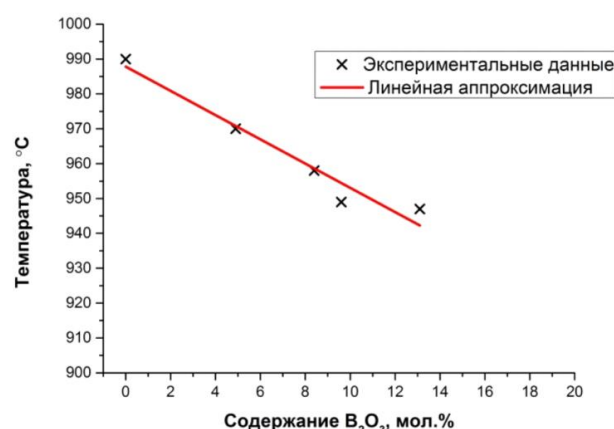


Рисунок 2. Зависимость температуры кристаллизации системы от концентрации оксида бора в стекле.

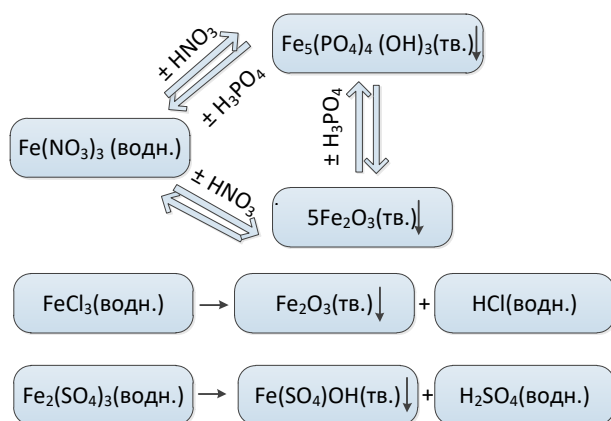
*Руководитель работ – к.х.н. Липатов Д.С. (Институт химии высокочистых веществ им. Г. Г. Девятовых РАН)*

### **Публикация:**

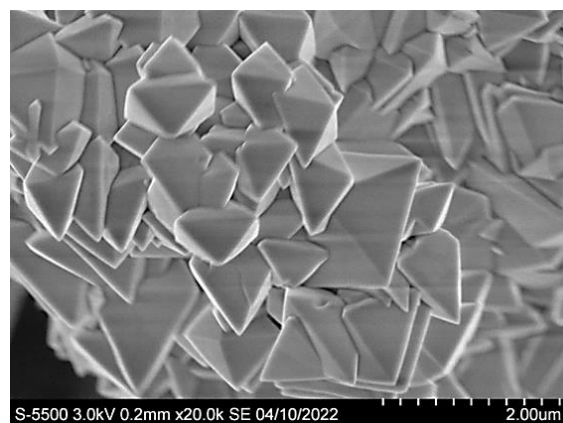
Абрамов А.Н., Лобанов А.С., Яшков М.В., Плехович А.Д., Комшина М.Е., Афанасьев Ф.В., Умников А.А., Липатов Д.С. Разработка волоконных световодов с сердцевиной из стеклокерамики на основе бороалюмосиликатного стекла, легированного хромом // Фотон-экспресс. 2023. – Т. 6, № 190. – С. 156-157.

## **17. Получение гиниита в процессах гидротермального разложения железосодержащих азотно-фосфорнокислых растворов**

Гиниит- $Fe_5(PO_4)_4(OH)_3$ , который был обнаружен как основная твердая фаза при гидротермальном азотнокислом извлечении редкоземельных металлов из железосодержащих руд Чуктуконского месторождения, является перспективным предшественником для получения электродных материалов литиевых батарей. Разработан новый метод синтеза этого соединения. Установлено, что наиболее эффективным процессом его получения является гидротермальное разложение нитратов железа(III) в азотно-фосфорнокислых растворах при температуре 180-210 °С. Оценена константа равновесия процесса. Установлен эндотермический характер реакции (энтальпия ~70 кДж/моль).



Маршруты гидролиза солей железа(III) в гидротермальных условиях.



Агломерат сросшихся октаэдрических частиц гиниита.

*Руководитель работ – к.х.н. Кузьмин Д.В. (Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН)*

### **Публикации:**

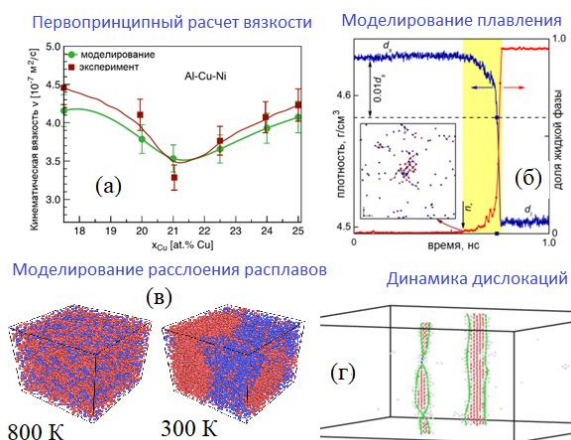
Kuzmin D.V., Gudkova N.V., Leskiv M.N., Kuzmina A.A., Kuzmin V.I. Dephosphorization of nitric acid solutions from the leaching of monazite ferrous ores under hydrothermal conditions by selective precipitation of iron (III) hydroxyphosphate (giniite) // Hydrometallurgy. – 2023. – V.217. – a.n. 106042. DOI: 10.1016/j.hydromet.2023.106042

Kuzmin D.V., Gudkova N.V., Kuzmina A.A., Vorobyov S.A., Leskiv M.N., Kuzmin V.I. Hydrothermal transformations of lanthanum phosphate with iron(3+) oxides (hydroxides) in acidic solutions // Journal of Siberian Federal University. Chemistry. – 2023. – V.16, № 2. – P. 276-286

## **18. Машинно-обучаемые нейросетевые потенциалы для металлургических сплавов**

Методами искусственного интеллекта получены межатомные потенциалы для металлургических сплавов. Впервые показано, что нейросетевые потенциалы позволяют с экспериментальной точностью рассчитывать значения вязкости и воспроизводить экспериментально наблюдаемые экстремумы на концентрационных зависимостях свойств металлургических сплавов. Впервые на основе первопринципных расчетов верифицированы уравнения классической теории зародышеобразования. Показано, что разработанные потенциалы позволяют решать задачи предсказания кристаллической структуры материалов, моделировать структурные дефекты в кристаллах и процессы расслоения расплавов.

Полученные результаты показывают перспективы применения методов искусственного интеллекта для первопринципного атомистического моделирования коллективных процессов в многокомпонентных системах и количественного расчета их свойств.



(а) Концентрационная зависимость вязкости расплавов  $\text{Al}_{100-x}\text{Cu}_x\text{Ni}_{10}$  при  $T = 1673 \text{ K}$ . Красные кривые – эксперимент, зеленые кривые – расчет; (б) моделирование плавления кристалла AlCu; (в) расслоение в расплаве Ga-Bi; (г) структура кристалла алюминия в окрестности диполя винтовых дислокаций.

*Руководители работ – д.ф.-м.н. Рыльцев Р.Е. (Институт металлургии УрО РАН), к.ф.-м.н. Кондратюк Н.Д. (Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)), д.ф.-м.н. Щелкачев Н.М. (Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН)*

### **Публикации:**

Kondratyuk N., Ryltsev R., Ankudinov V., Chtchelkatchev N., First-principles calculations of the viscosity in multicomponent metallic melts: Al-Cu-Ni as a test case // *Journal of Molecular Liquids* – 2023. – V. 380. – a.n. 121751. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121751

Tipeev A.O., Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M., Ramprakash S., Zanutto E.D. Machine learning-assisted MD simulation of melting in superheated AlCu validates the Classical Nucleation Theory // *Journal of Molecular Liquids*. – 2023. – V. 387. – a.n. 122606. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.122606

Хазиева Е.О., Щелкачев Н.М., Типеев А.О., Рыльцев Р.Е. Точность, производительность и переносимость межчастичных потенциалов для сплавов Al-Cu: сравнение моделей погруженного атома и глубокого машинного обучения // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. – 2023. – Т. 164. – С. 980-995. DOI: 10.31857/S004445102312012X

## 19. Формирование износостойких защитных покрытий на алюминиевых поверхностях изделий специального назначения

Методом сверхзвукового плазменного напыления порошкового материала выполнено восстановление изношенного рабочего колеса пожарного насоса, изготовленного из алюминиевого сплава. Для нанесения покрытия использована созданная в ИМЕТ УрО РАН многофункциональная плазменная установка МАК-100. Определены характеристики процесса нанесения Ni-Cr-B-Si-C содержащего порошка, обеспечившие максимальное сцепление износостойкого покрытия с поверхностью восстанавливаемой детали. Установлено, что твердость покрытия превышает исходную твердость материала рабочего колеса в два раза. Промышленными испытаниями показано, что стойкость к гидроабразивному и кавитационному износу модернизированной поверхности крыльчатки рабочего колеса увеличивается в пять раз, что дает высокий экономический эффект и доказывает перспективность применения метода при восстановлении деталей сложной конфигурации.



Рабочее колесо пожарного насоса НЦПН-40/100: слева – изношенное колесо, справа – восстановленное методом плазменного напыления.

*Руководитель работ – д.ф.-м.н. Гельчинский Б.Р. (Институт металлургии УрО РАН)*

### **Публикация:**

Криворогова А.С., Ильиных Н.И., Ильиных С.А., Беззапонная О.В., Гельчинский Б.Р., Девяткин Н.О. Повышение надежности противопожарного оборудования и систем пожарного водоснабжения // Техносферная безопасность. – 2023. – № 1(38). – С. 72-86.

## 20. Технология переработки бедных тантал-ниобиевых концентратов

Разработана новая технологическая схема комплексной переработки бедных тантал-ниобиевых концентратов, в основе которой лежит пирометаллургическое обогащение – восстановительная плавка с переводом редких металлов и олова в сплав-коллектор на основе железа. Инновацией разработки является использование для восстановления алюмо-кальциевой лигатуры состава  $Al:Ca = 1:(2,1-2,4)$ . Селекция металлов происходит при сплавлении полученного металлоконцентрата Nb-Ta с натриевыми солями ( $Na_2CO_3$ ,  $Na_2SO_4$ ) для перевода олова в сплав с железом, а редких металлов и кремния – в шлак. В результате дальнейшей обработки вторичного шлака, методами гидрометаллургии получают смесь технических оксидов  $(Ta,Nb)_2O_5$ , пригодную для очистки и разделения металлов – ниобия, тантала и олова традиционными методами. Реализация разработки откроет перспективы развития неразрабатываемых российских месторождений и создания отечественного производства остро дефицитных ниобия и тантала из некондиционного сырья.

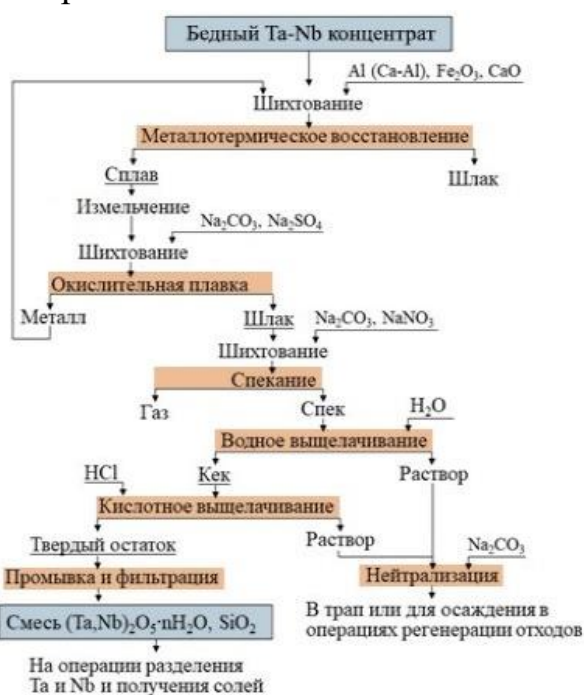


Схема переработки бедных тантал-ниобиевых концентратов.

*Руководители работ – к.т.н. Пикулин К.В. и к.т.н. Тюшняков С.Н. (Институт металлургии УрО РАН)*

### Публикация:

Способ переработки бедных тантал-ниобиевых концентратов. Патент РФ №. 2797102. Гуляева Р.И., Тюшняков С.Н., Пикулин К.В., Удоева Л.Ю., Галкова Л.И., Агафонов С.Н. Опубликовано: 31.05.2023. Бюл. № 16.



## КОНТАКТЫ

сайт: <https://inorgchem.ru>

электронная почта: [inorgchem@igic.ras.ru](mailto:inorgchem@igic.ras.ru)

телефон: +7 (495) 952-02-24

адрес: 119991, Москва, Ленинский проспект, 31



## УКАЗАТЕЛЬ РУКОВОДИТЕЛЕЙ ТЕМАТИК

<i>Фамилия И.О.</i>	<i>стр.</i>	<i>Фамилия И.О.</i>	<i>стр.</i>
Агафонов А.В.	112	Гречников Ф.В.	45
Алдошин С.М.	20, 22, 23, 61	Гудилин Е.А.	47, 48, 67, 68, 104
Альмяшева О.В.	108	Гусаров В.В.	49
Амиров Р.Р.	82	Дедов А.Г.	63, 103
Антипов Е.А.	64, 66	Денисова Т.А.	54
Артемьев А.В.	32, 34	Димиев А.М.	44
Барановская В.Б.	95	Еременко И.Л.	25
Баранчиков А.Е.	28	Жижин К.Ю.	18, 19
Беззубов С.И.	33	Захаров Ю.А.	50
Братская С.Ю.	107	Захарова Г.С.	56
Булавченко А.И.	79	Зубков В.Г.	83
Буслаева Т.М.	51	Иванов В.К.	28, 46
Васильев Р.Б.	52, 55	Истомин П.В.	91
Вашурин А.С.	97	Казин П.Е.	57
Волошин Я.З.	40	Козловский В.И.	98
Гаврищук Е.М.	84	Кондратюк Н.Д.	117
Гельчинский Б.Р.	119	Коренев С.В.	74
Гнеденков С.В.	69, 70, 105, 106	Косова Н.В.	78, 109
Грачева Е.В.	77	Кузнецов Н.Т.	18, 19, 60, 100

<i>Фамилия И.О.</i>	<i>стр.</i>	<i>Фамилия И.О.</i>	<i>стр.</i>
Кузьмин Д.В.	116	Скорб Е.А.	102
Кукушкин В.Ю	26, 27	Скрипкин М.Ю.	59
Кутырева М.П.	89	Солнцев К.А.	27
Латыпов Ш.К.	98	Старикова А.А.	36
Лебедева О.Е.	53	Тананаев И.Г.	71, 72
Липатов Д.С.	115	Таран О.П.	75
Ломова Т.Н.	37	Толочко Б.П.	88
Лукова Г.В.	38	Трахтенберг Л.И.	55
Махонина Е.В.	80	Трубицын М.А.	58
Напольский К.С.	87, 113	Тюшняков С.Н.	120
Наумов Н.Г.	86	Уточникова В.В.	35
Овчаренко В.И.	29	Федин В.П.	94
Опра Д.П.	81	Федин М.В.	73, 76
Палатников М.Н.	110	Федотов П.П.	52
Папынов Е.К	72, 90	Цымбаренко Д.М.	113
Парфенюк Е.В.	92	Шевченко В.Я.	101, 102
Пикулин К.В.	120	Шестопалов М.А.	91
Приходченко П.В.	31	Шляхтина А.В.	55
Романенко Г.В.	29	Штырлин В.Г.	41
Рыльцев Р.Е.	117	Щелкачев Н.М.	117
Сергиенко В.И.	24, 62	Щербаков И.Н.	42
Сидоров Н.В.	110	Яхваров Д.Г.	30
Скабицкий И.В.	39		

**Научный совет РАН  
по неорганической химии**