



XXVII международная научная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых

ЛОМОНОСОВ – 2020

Секция «Химия»

10 – 27 ноября 2020

Материалы конференции

ЭЛЕКТРОННОЕ ИЗДАНИЕ
МОСКВА



УДК 54
ББК 24я43
МЗ4

Отв. ред.: Н.А. Коваленко, А.В. Дзубан

МЗ4 **Материалы XXVII Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2020», секция «Химия».** – М.: Издательство «Перо», 2020. – 116 МБ. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-00171-642-6

ISBN 978-5-00171-642-6

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2020

Программный комитет

Председатель: чл.-корр. РАН, профессор Калмыков Степан Николаевич

Заместитель председателя: д.х.н., доц. Зверева Мария Эмилевна

д.х.н., проф. Авдеев Виктор Васильевич

д.х.н., проф. Белоглазкина Елена Кимовна

д.х.н., проф. Клячко Наталья Львовна

д.х.н., проф. Матвеевко Владимир Николаевич

д.х.н., проф. Цирлина Галина Александров

д.х.н., в.н.с. Курамшина Гульнара Маратовна

к.х.н., доц. Бадун Геннадий Александрович

к.х.н., доц. Богатова Татьяна Витальевна

к.ф.-м.н., доц. Глебов Илья Олегович

к.х.н., доц. Ефимова Анна Александровна

к.х.н., доц. Истомин Сергей Яковлевич

к.х.н., доц. Касьянов Иван Алексеевич

к.х.н., доц. Розова Марина Геннадьевна

к.х.н., доц. Ставрианиди Андрей Николаевич

Организационный комитет

Председатель: чл.-корр. РАН, профессор Калмыков Степан Николаевич

Заместитель председателя: д.х.н., доц. Зверева Мария Эмилевна

Ученый секретариат:

к.х.н., доц. Коваленко Никита Андреевич

к.х.н., с.н.с. Комкова Мария Андреевна

к.х.н., н.с. Дубинина Татьяна Валентиновна

к.х.н., зав. отд. Якубович Екатерина Вячеславовна

к.х.н., с.н.с. Беркович Анна Константиновна

к.х.н. Жуковская Евгения Сергеевна

к.ф.-м.н., доц. Карпушкин Евгений Александрович

к.х.н., ст. преп. Колесникова Инна Николаевна

к.х.н., н.с. Пуголовкин Леонид Витальевич

н.с. Смирнов Сергей Александрович

м.н.с. Дзубан Александр Владимирович

м.н.с. Никифоров Александр Игоревич

Владимирова Надежда Владимировна

Строганова Екатерина Андреевна

Шнитко Алексей Валерьевич



Содержание

Аналитическая химия	1
Высокомолекулярные соединения	165
Дисперсные системы и поверхностные явления	368
История химии	437
Катализ	448
Неорганическая химия I (студенты)	544
Неорганическая химия II (аспиранты и молодые учёные)	630
Органическая химия	677
Радиохимия и радиэкология	984
Физическая химия I: молекулярное моделирование, спектроскопия, лазерная химия	1060
Физическая химия II: химическая термодинамика и химическая кинетика	1152
Физическая химия III: процессы с участием ионов и радикалов в конденсированных средах и на межфазных границах (электрохимия, химия высоких энергий, спиновая химия)	1244
Химическая технология и новые материалы	1298
Химия живых систем, нанобиоматериалы и нанобиотехнологии	1523



НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ II (АСПИРАНТЫ И МОЛОДЫЕ УЧЁНЫЕ)

Жюри:

к.х.н., доц. Истомин Сергей Яковлевич (председатель) асп.

Владиминова Надежда Владимировна (секретарь) д.х.н.,

в.н.с. Кузнецов Алексей Николаевич

к.х.н., в.н.с. Напольский Кирилл Сергеевич

к.х.н., доц. Васильев Роман Борисович

к.х.н., доц. Фёдорова Анна Александровна

к.х.н., доц. Путляев Валерий Иванович

к.х.н., с.н.с. Миронов Андрей Вениаминович

к.х.н., с.н.с. Петухов Дмитрий Игоревич

к.х.н., с.н.с. Цымбаренко Дмитрий Михайлович



Математическое моделирование взаимодействия водорода с многокомпонентными ИМС на основе гексагональных фаз Лавеса

Прохоренков М.А.

Аспирант 1 года обучения

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

химический факультет, Москва, Россия

E-mail: mik11995@yandex.ru

В настоящее время одной из наиболее интересных, развивающихся и перспективных областей химии, является исследование соединений металлов и интерметаллических соединений (ИМС) с водородом - гидридов. Многие интерметаллические соединения способны обратимо сорбировать водород, что представляет огромный практический интерес. Среди разнообразных возможностей применения таких гидридов можно отметить одну из основных - водородный термосорбционный компрессор.

Целью настоящей работы было исследование водородсорбционных свойств многокомпонентного металлического сплава на основе титана и циркония, пригодного для использования в металлгидридном компрессоре водорода.

Использование многокомпонентных композиций позволяет более плавно изменять термодинамические параметры реакций взаимодействия с водородом по сравнению с бинарными и тернарными сплавами. Однако, для цели выбора сплава, предназначенного для работы в термосорбционном компрессоре подбор подходящих многокомпонентных композиций, приводит к значительному увеличению количества экспериментов. В связи с этим в настоящей работе была применена статическая модель прогноза термодинамических параметров реакций взаимодействия водорода со сплавами.

С использованием статистической модели прогноза были рассчитаны водородсорбционные свойства сплава $Ti_{0.28}Zr_{0.05}Cr_{0.07}Mn_{0.42}Ni_{0.07}Cu_{0.01}V_{0.1}$, который затем был синтезирован и охарактеризован методом РФА.

Для сплава были построены изотермы абсорбции и десорбции водорода. Проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных для оценки корректности работы модели прогноза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, MOST (China) и DST (India) в рамках научного проекта № 19-58-80008.

