


Структура научного профиля (портфолио) потенциальных научных руководителей участников Международной олимпиады Ассоциации «Глобальные университеты» по треку аспирантуры в 2021-2022 гг.

Университет	Самарский университет
Уровень владения английским языком	Свободный
Направление подготовки, на которое будет приниматься аспирант	Неорганическая химия
Код направления подготовки, на которое будет приниматься аспирант	1.4.1
Перечень исследовательских проектов потенциального научного руководителя (участие/руководство)	Соисполнитель проекта РФФИ 19-03-00048 на 2019–2021 гг. "Координационные полиэдры $AХ_n$ (А - лантанид или актинид, Х - сера, селен или теллур) в структурах кристаллов"
Перечень возможных тем для исследования	<ul style="list-style-type: none"> ● Синтез, изучение строения и свойств новых координационных соединений. ● Анализ координационных особенностей различных лигандов. ● Применение полиэдров Вороного–Дирихле для исследования строения кристаллов. ● Поиск взаимосвязей между составом, строением и свойствами в рамках стереоатомной модели строения кристаллических веществ.
 <p>Научный руководитель: Пушкин Денис Валериевич, доктор химических наук</p>	Исследование взаимосвязи между составом, строением и свойствами веществ
	<p>Научные интересы: Синтез и исследование строения и свойств новых координационных соединений. Изучение взаимосвязей между составом/структурой/свойствами твердых веществ. Использование и развитие стереоатомной модели строения кристаллических веществ и полиэдров Вороного–Дирихле для анализа строения кристаллов. Изучение невалентных взаимодействий, явления полиморфизма, актинидного сжатия, электронодонорной способности лигандов, стереоэффекта неподеленной электронной пары и др. Исследование фундаментальных принципов формирования твердых тел и универсальных подходов к описанию химических связей, определению степеней окисления элементов, координационных чисел атомов, геометрических характеристик молекул и др.</p>
	<p>Research highlights:</p> <ul style="list-style-type: none"> ● Профессиональный, отзывчивый и сплоченный научный коллектив. ● Используется уникальное передовое программное обеспечение для анализа кристаллических веществ, аналогов которого в мире не существует. ● Научный коллектив постоянно участвует в выполнении работ по грантам, получающим финансовую поддержку.

	<ul style="list-style-type: none"> ● Осуществляется взаимодействие с ведущими российскими и иностранными учеными, работающими в области интересов научной группы. ● Экспериментальная работа проводится на высокотехнологичном оборудовании из центров коллективного пользования. ● Результаты научной работы постоянно публикуются в высокоцитируемых научных журналах и докладываются на ведущих профильных международных конференциях.
	<p>Особые требования: Нет</p>
	<p>Основные публикации руководителя: 20 публикаций в журналах, индексируемых Web of Science или Scopus за последние 5 лет</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Uhanov A.S., Sokolova M.N., Fedoseev A.M., Bessonov A.A., Nechaeva O.N., Savchenkov A.V., Pushkin D.V. New Complexes of Actinides with Monobromoacetate Ions: Synthesis and Structures. (2021) ACS Omega, 6, pp. 21485–21490. DOI: 10.1021/acsomega.1c02296 2. Uhanov A. S., Klepov V.V., Vologzhanina A. V., Zubavichus Y.V., Savchenkov A.V., Pushkin D.V., Serezhkina L.B., Serezhkin V.N. New itaconate-containing uranyl complex unit and coordination modes of itaconate ions. (2020) Comptes Rendus Chimie, 23, pp. 117–126. DOI: 10.5802/crchim.8 3. Serezhkin, V.N., Rogaleva, E.F., Savchenkov, A.V., Pushkin, D.V., Serezhkina, L.B. Aspects of the topology of actinide atom substructures in crystal structures and the concept of antiliquid. (2019) Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances, 75, pp. 370-378. DOI: 10.1107/S2053273318018326 4. Savchenkov, A.V., Vologzhanina, A.V., Pushkin, D.V., Serezhkina, L.B. Unusual heteronuclear uranyl clusters with aliphatic monocarboxylate ligands and coordination modes of crotonate, butyrate, and valerate ions. (2018) European Journal of Inorganic Chemistry, 2018 (18), pp. 1869-1876. DOI: 10.1002/ejic.201701318 5. Savchenkov, A.V., Vologzhanina, A.V., Dmitrienko, A.O., Zubavichus, Y.V., Pushkin, D.V., Serezhkina, L.B., Serezhkin, V.N. Crystal structures of uranyl complexes with isobutyrate and isovalerate anions. (2018) Dalton Transactions, 47 (6), pp. 1849-1856. DOI: 10.1039/c7dt04042c
	<p>Results of intellectual activity Впервые получено более пятидесяти новых карбоксилатов уранила, определена структура их кристаллов и доказано, что более двадцати из них обладают нелинейными оптическими свойствами. Использование полиэдров Вороного-Дирихле впервые позволило объяснить некоторые особенности термического полиморфизма актинидов, а также обосновать кристаллохимические критерии наличия 5f-связывающих взаимодействий между атомами актинидов.</p>

Выявлено наличие количественной взаимосвязи между нелинейно-оптической активностью трискарбоксилатов U(VI) и величиной вектора, характеризующего смещение ядра атома урана из центра тяжести его полиэдра Вороного-Дирихле в катионной подрешетке из атомов урана и внешнесферных одно- или двухзарядных катионов. Проведена проверка принципа максимального заполнения пространства в подрешетках, содержащих атомы актинида (от тория до эйнштейния), в структурах всех изученных к настоящему времени кристаллических веществ. Обнаружено, что в U-подрешетках веществ, имеющих в элементарной ячейке 20 и более кристаллографически неэквивалентных атомов U, ближний (или кристаллохимический) порядок в их взаимном размещении отсутствует и сохраняется только дальний порядок (трансляционная симметрия). Проведен анализ координационных полиэдров MS_n (M - s-металл, В или Al) в структуре элементоорганических соединений. Установлено, что объем полиэдров Вороного-Дирихле атомов M практически не зависит от их координационного числа.

Патент на изобретение № 2570236.

Опубликовано 10.12.2015. Бюл. № 34.

Способ получения градуировочных смесей фотохимической реакцией карбоксилатоуранилатов калия и устройство для его осуществления.

Савченков А.В., Пушкин Д.В., Сержкина Л.Б., Арутюнов Ю.И., Сержкин В.Н.