



300
ЛЕТ СПбГУ



XX CrystChemXRD & Spectroscopy
VI OrganicMineralogy

XX Международное совещание по кристаллохимии, рентгенографии и спектроскопии минералов

VI Международное совещание по органической минералогии

Санкт-Петербург, 17-21 июня 2024

100 лет кафедре кристаллографии СПбГУ

Организаторы совещания

Санкт-Петербургский Государственный Университет (СПбГУ)
Российское Минералогическое общество (РМО)
*Комиссия РМО по кристаллохимии,
рентгенографии и спектроскопии минералов*
Комиссия РМО по органической минералогии и биоминералогии

Генеральный спонсор совещания

АДВИН
Передовые Инновации

Спонсоры

 **МЕЛИТЭК**
Материалография Аналитика Испытания

ЛАБТЕСТ

LABTEST

Председатель программного комитета:

Академик РАН, д.г.-м.н. Сергей Владимирович Кривовичев
(Санкт-Петербург, Апатиты, Россия)

Со-председатели программного комитета:

Член-корреспондент РАН, д.б.н. Андрей Олегович Алексеев (Пушино, Россия)
Академик РАН, д.г.-м.н. Сергей Леонидович Вотяков (Екатеринбург, Россия)
Член-корреспондент РАН, д.х.н. Николай Николаевич Еремин (Москва, Россия)

Заместители Председателя:

д.г.-м.н. Владислав Владимирович Гуржий (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Андрей Анатольевич Золотарев (Санкт-Петербург, Россия)

Члены программного комитета:

Член-корреспондент РАН, д.х.н. Евгений Викторович Антипов (Москва, Россия)
Академик РАН, д.г.-м.н. Асхаб Магомедович Асхабов (Сыктывкар, Россия)
д.г.-м.н. Татьяна Константиновна Баженова (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Алексей Ильич Брусницын (Санкт-Петербург, Россия)
д.х.н. Римма Сергеевна Бубнова (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Анатолий Николаевич Зайцев (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Владимир Викторович Ковалевский (Петрозаводск, Россия)
д.г.-м.н. Елена Николаевна Котельникова (Санкт-Петербург, Россия)
Член-корреспондент РАН, д.г.-м.н. Юрий Борисович Марин (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Владимир Петрович Морозов (Казань, Россия)
Член-корреспондент РАН, д.г.-м.н. Юрий Николаевич Пальянов (Новосибирск, Россия)
Член-корреспондент РАН, д.г.-м.н. Игорь Викторович Пеков (Москва, Россия)
Академик РАН, д.г.-м.н. Дмитрий Юрьевич Пушаровский (Москва, Россия)
д.г.-м.н. Станислав Константинович Филатов (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Ольга Викторовна Франк-Каменецкая (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Марина Валентиновна Чарыкова (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Антон Фарисович Шацкий (Москва, Россия)
Prof. Dr. Matteo Leoni (Дахран, Саудовская Аравия)
Prof. Dr. Anhuai Lu (Пекин, Китай)
Dr. Jakub Plášil (Прага, Чехия)
Prof. Dr. Frank Hawthorne (Виннипег, Манитоба, Канада)
Prof. Dr. Elena Sokolova (Виннипег, Манитоба, Канада)

Члены организационного комитета:

к.г.-м.н. Маргарита Сергеевна Авдонцева (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Сергей Николаевич Бритвин (Санкт-Петербург, Россия)
к.г.-м.н. Олег Сергеевич Грунский (Санкт-Петербург, Россия)
к.г.-м.н. Анатолий Александрович Золотарев (Санкт-Петербург, Россия)
к.г.-м.н. Илья Викторович Корняков (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Евгений Васильевич Назарчук (Санкт-Петербург, Россия)
д.г.-м.н. Олег Иоханнесович Сийдра (Санкт-Петербург, Россия)

Ученые секретари:

к.г.-м.н. Алина Ростамовна Изатулина (Санкт-Петербург, Россия)
к.г.-м.н. Мария Георгиевна Кржижановская (Санкт-Петербург, Россия)

Рисунок. Структура $[\text{Dy}_2(\text{Gly})_6 \cdot 7\text{H}_2\text{O}](\text{ClO}_4)_6$ (цис) и $[\text{Eu}_2(\text{Gly})_6 \cdot 9\text{H}_2\text{O}](\text{ClO}_4)_6$ (транс)

(i) - двойной бидентатный мостик, $(\mu_2\text{-}\eta^1\eta^1)_2$,

(ii) - четырехкратный хелатный мостик $(\mu_2\text{-}\eta^2\eta^1)_1 + (\mu_2\text{-}\eta^1\eta^1)_3$

Figure. Structure of $[\text{Dy}_2(\text{Gly})_6 \cdot 7\text{H}_2\text{O}](\text{ClO}_4)_6$ (cis) и $[\text{Eu}_2(\text{Gly})_6 \cdot 9\text{H}_2\text{O}](\text{ClO}_4)_6$ (trans)

(i) - double bidentate bridge, $(\mu_2\text{-}\eta^1\eta^1)_2$,

(ii) - quadruple chelate bridge $(\mu_2\text{-}\eta^2\eta^1)_1 + (\mu_2\text{-}\eta^1\eta^1)_3$

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (базовая часть государственного задания, проект № FSWR-2023-0025).

[1] Knyazev A.V., Alahmad A.K., Somov N.V., Knyazeva S.S., Markin A.V. *Journal of Chemical Crystallography*, 2021, 51, 491–496.

[2] Knyazev A.V., Somov N.V., Shipilova A.S., Gusarova E.V., Knyazeva S.S., Stepanova O.V., Chuprunov E.V. *Journal of Molecular Structure*, 2017, 1141, 164-169.

ГИДРОКСИЛАПАТИТЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ИОНАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ: КРИСТАЛЛОХИМИЯ, МАГНИТНЫЕ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА

Корнеев А.В.¹, Франк-Каменецкая О.В.¹, Кузьмина М.А.¹, Сергиенко Е.С.¹, Малышев В.В.², Сидельникова О.П.²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия, a_v_korneev@list.ru

² Военно-медицинская академия им. С. М. Кирова, Санкт-Петербург, Россия

HYDROXYAPATITES MODIFIED WITH IONS OF TRANSITION METALS: CRYSTAL CHEMISTRY, MAGNETIC AND ANTIBACTERIAL PROPERTIES

Korneev A.V.¹, Frank-Kamenetskaya O.V.¹, Kuz'mina M.A.¹, Sergienko E.S.¹, Malyshev V.V.² and Sidel'nikova O.P.²

¹ Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia, a_v_korneev@list.ru

² S.M. Kirov Military Medical Academy, Saint Petersburg, Russia

Гидроксилапатит (ГАп, $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$), основной минеральный компонент костей и зубов человека, активно используется в биомедицине. Двухвалентные переходные металлы ($\text{Me}^{2+} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$) способны замещать кальций в кристаллической структуре ГАп, наделяя его новыми свойствами. Цель нашего исследования – выявить общие закономерности вхождения переходных металлов в ГАп и их влияние на магнитные и антибактериальные свойства ГАп.

Проведены синтезы ГАп из растворов ($T = 90, 150, 200^\circ\text{C}$) при различных концентрациях основных компонентов, примесных металлов и анионов F^- и Cl^- .

Полученные порошки исследованы методами порошковой рентгенографии, колебательной и EDX спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии, магнитометрии. Исследование антибактериальных свойств проведено методом диффузии диска на бактериях *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*.

Вхождение переходных металлов существенно уменьшает ПЭЯ ($c > a$) ГАп. Предельные концентрации Me^{2+} зависят, в основном, от близости $R_{Me^{2+}}$ к $R_{Ca^{2+}}$ и ранжируются следующим образом: $Ni < Zn < Fe < Co < Mn$. По данным уточнения методом Ритвельда, Me^{2+} входят в позицию Ca1. При превышении предельной концентрации происходит аморфизация ГАп (Mn, Co, Fe) либо образование других фосфатов (Ni, Zn). Гидротермальные условия синтеза и добавки фтора и хлора позволяют существенно увеличить ОКР апатита. Mn-, Fe-, Co- и Ni-содержащие ГАп обладают парамагнитными свойствами, в отличие от беспримесного гидроксилapatита. Магнитная восприимчивость ГАп увеличивается прямо пропорционально содержанию примесных катионов в кристаллической решётке. Кобальтсодержащие ГАп проявляют более сильные антибактериальные свойства, чем беспримесный ГАп, образуя зоны подавления роста.

Благодарности

Работа выполнена в РЦ СПбГУ: РДМИ, Геомодель, РЦММ, ДФМ, ИТКН, ОЛМИВ и на кафедре микробиологии ВМА.

УЧЕТ НЕОДНОРОДНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ДИФРАКЦИОННЫХ ДАННЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СФЕРИЧЕСКОГО ОБРАЗЦА

Кудряшов М.В.¹, Сомов Н.В.¹

¹ Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород; e-mail: m.v.kudryashov@phys.unn.ru, somov@phys.unn.ru

INHOMOGENEOUS ABSORPTION CORRECTION IN CRYSTALLINE SPHERICAL SAMPLE X-RAY DIFFRACTION DATA

Kudryashov M. V.¹, Somov N. V.¹

¹ National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod; e-mail: m.v.kudryashov@phys.unn.ru, somov@phys.unn.ru

Используемые в настоящее время методы учета поглощения рентгеновского излучения в рентгеноструктурном анализе, как правило, предполагают, что линейный коэффициент поглощения постоянен во всем объеме исследуемого образца. Однако он может изменяться в различных частях кристалла, например, вследствие дефектов, неоднородного вхождения примесных и допирующих элементов.

В данной работе представлены результаты исследования особенностей поглощения рентгеновского излучения кристаллическим образцом сферической формы в предположении, что коэффициент поглощения описывается некоторой функцией координат. Предложен метод учета неоднородного поглощения для кристаллических