

Государственный университет «Дубна»

Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского  
Российской академии наук

Объединенный институт ядерных исследований

Институт экспериментальной минералогии Российской академии наук

Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии  
Российской академии наук

Институт общей и неорганической химии  
им. Н.С. Курнакова Российской академии наук

Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет  
им. Н.И. Лобачевского

Институт водных проблем Российской академии наук

**Физическая и аналитическая химия природных и техногенных систем, новые технологии и материалы – Ходаковские чтения**

Всероссийская конференция с международным участием

(Дубна, 18–19 апреля 2019 г.)

Сборник трудов

Под общей редакцией

профессора, доктора химических наук П. П. Гладышева,

профессора, доктора технических наук Б. К. Зуева



Дубна  
2019

УДК 54  
ББК 24я431  
Ф 50-3

Ф 50-3            **Физическая и аналитическая химия природных и техногенных систем, новые технологии и материалы – Ходаковские чтения : сборник трудов Всероссийской конференции с международным участием (Дубна, 18–19 апреля 2019) / под общ. ред. П. П. Гладышева. — Дубна : Гос. ун-т «Дубна», 2019. — 192 с.**

ISBN 978-5-89847-582-6

Материалы научного семинара представляют собой сборник статей сотрудников кафедры химии, новых технологий и материалов университета «Дубна», Института геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, других научных учреждений и вузов, с которыми была непосредственно связана научная и педагогическая деятельности профессора, доктора химических наук И.Л. Ходаковского в области термодинамики, термохимии, космохимии, геохимии и геоэкологии. Эти направления были рассмотрены на секциях семинара «Современные проблемы космохимии, геохимии и геоэкологии», «Термические методы анализа» и «Термодинамика: эксперимент и расчет». Ряд работ посвящен научному наследию И.Л. Ходаковского, методам обработки и хранения термодинамических данных.

Представленные на секции «Современные технологии и материалы» материалы отражают результаты исследований кафедры химии, новых технологий и материалов по новым научным направлениям, связанным с развитием высоких технологий в наукограде Дубна.

Сборник статей дает представление о современном состоянии космохимии и термодинамических методах исследования геологических и космических объектов, а также физикохимии наносистем и создании на их основе новых методов анализа и новой аналитической техники.

Сборник статей предназначен для специалистов в области физической химии, нанотехнологий, геохимии, космохимии и термодинамики природных объектов, а также студентов и аспирантов химических и геологических специальностей университетов и других вузов.

УДК 54  
ББК 24я431

**Редакционная коллегия:**

Гладышев Павел Павлович – доктор химических наук, профессор;  
Зуев Борис Константинович – доктор технических наук, профессор;  
Полотнянко Наталья Александровна – кандидат химических наук, доцент.

---

*Научное издание*

Технический редактор Ю.С. Цепилова  
Компьютерная верстка Ю.С. Цепилова  
Корректор Ю.С. Цепилова

Подписано в печать . Формат 60×90/8. Усл. печ. л. 24.  
Тираж экз. Заказ № 30.

ГБОУ ВО МО «Университет «Дубна»  
141980, г. Дубна Московской обл., ул. Университетская, 19

ISBN 978-5-89847-582-6

© Государственный университет «Дубна», 2019

7. Infante Ferreira C.A. Latent heat storage for solar heating and cooling systems // *Advances in Solar Heating and Cooling*. 2016. P. 429–465.
8. Fopah-Lelea A., Tambab J.G. A review on the use of  $\text{SrBr}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  as a potential material for low temperature energy storage systems and building applications // *Solar Energy Materials & Solar Cells*. 2017. V. 164. P. 175–187.
9. Дребущак Т.Н. Введение в хемометрику: учеб. пособие. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2013. – 88 с.
10. Барковский С.С., Захаров В.М., Лукашов А.М., Нурутдинова А.Р., Шалагин С.В. Многомерный анализ данных методами прикладной статистики: учебное пособие. Казань: Изд. КГТУ, 2010. 126 с.

УДК 548.32

## СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ СЕРЕБРА, МЕДИ И ИНДИЯ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ПОГЛОЩЕНИЯ

***Н.Д. Трофимов<sup>1</sup>, О.Н. Филимонова<sup>1</sup>, М.С. Никольский<sup>1</sup>, В.Д. Абрамова<sup>1</sup>,  
П.В. Евстигнеева<sup>1</sup>, Б.Р. Тагиров<sup>1</sup>, К.О. Квашнина<sup>2</sup>, А.Л. Тригуб<sup>3</sup>, Д.А. Чареев<sup>4</sup>***

<sup>1</sup>Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН (ИГЕМ РАН), РФ,  
г. Москва, Старомонетный пер., 35/1, *trofim-kol@mail.ru*

<sup>2</sup>Европейский центр синхротронного излучения, ESRF, Франция, Гренобль

<sup>3</sup>НИЦ «Курчатовский институт», РФ, 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, 1

<sup>4</sup>Институт экспериментальной минералогии РАН, РФ, Московская область, г. Черноголовка,  
ул. Академика Осипьяна, 4

*Метод рентгеновской спектроскопии поглощения использован для определения зарядового состояния атомов, параметров локального атомного окружения и схемы изоморфного замещения в сфалерите, где примесь In присутствует совместно с примесями металлов 11-й группы периодической таблицы Менделеева. Все примеси (Ag, Cu, In) гомогенно распределены в матрице сфалерита. Во всех исследованных образцах  $\text{In}^{3+}$  замещает  $\text{Zn}^{2+}$  в структуре сфалерита. Межатомные расстояния In-S возрастают по отношению к расстояниям в чистом сфалерите на 0.17 Å и 0.1 Å для первой и второй координационных сфер соответственно. Расстояние In-S в третьей координационной сфере близко к расстоянию Zn-S в чистом сфалерите. Согласно полученным данным, как Ag, так и Cu в присутствии In входят в структуру сфалерита в форме твёрдого раствора, где они замещают Zn. Наши результаты показывают, что элементы 11-й группы (Cu, Ag, Au) могут входить в сфалерит изоморфно по схеме с компенсацией зарядов:  $2\text{Zn}^{2+} \leftrightarrow \text{Me}^+ + \text{Me}^{3+}$ .*

*Ключевые слова: сфалерит, медь, индий, серебро, рентгеновская спектроскопия поглощения*

### Об авторах

**Трофимов Николай Дмитриевич** – старший лаборант, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Филимонова Ольга Никитовна** – младший научный сотрудник, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Никольский Максимилиан Сергеевич** – кандидат геолого-минералогических наук, научный сотрудник, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Абрамова Вера Дмитриевна** – научный сотрудник, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Евстигнеева Полина Владимировна** – младший научный сотрудник, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Тагиров Борис Робертович** – кандидат геолого-минералогических наук, ведущий научный сотрудник, Институт геологии рудных месторождений, петрографии, минералогии и геохимии РАН.

**Квашнина Кристина Олеговна** – Dr. habil., Европейский центр синхротронного излучения, ESRF.

**Тригуб Александр Леонидович** – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, НИЦ «Курчатовский институт».

**Чареев Дмитрий Александрович** – доктор химических наук, доцент, ведущий научный сотрудник, Институт экспериментальной минералогии РАН.

Сфалерит ((Zn,Fe)S) – основной минерал сульфидных руд, содержащий широкий диапазон элементов-примесей, включая Ag и In [1; 2]. Индий и серебро широко используются в современной высокотехнологической промышленности. Основным источником In являются руды колчеданных месторождений, где он присутствует в качестве примеси в сфалерите. Ag-содержащий сфалерит – распространённый минерал многих низкотемпературных руд. Максимальные концентрации Ag в сфалерите наблюдаются для руд, содержащих In[3]. Во многих образцах природных сфалеритов концентрации In растут при увеличении содержания Cu, что указывает на возможность образования твёрдого раствора по механизму:  $2Zn^{2+} \leftrightarrow Cu^+ + In^{3+}$ [2]. Основываясь на близких химических свойствах элементов подгруппы меди, можно предположить, что подобная схема реализуется и для серебра:  $2Zn^{2+} \leftrightarrow Ag^+ + In^{3+}$ . Тем не менее, эти схемы могут быть подтверждены только с использованием спектроскопических методов. Задача настоящей работы – синтезировать кристаллы сфалерита, содержащие примесь In, Cu и Ag, определить зарядовое состояние примесей и охарактеризовать их локальное атомное окружение (тип соседних атомов, их количество и межатомные расстояния) методом рентгеновской спектроскопии поглощения.

### Методы синтеза

Эксперименты по синтезу были выполнены с использованием метода газового транспорта, метода синтеза в эвтектическом расплаве хлоридов [4,5] и методом сухого синтеза [6]. Выбор метода синтеза определялся исходя из [7].

В случае метода газового транспорта в качестве транспортного реагента использовались  $I_2$  и  $NH_4Cl$ . Исходные фазы (примерно 0 г. ZnS – сфалерита) и несколько миллиграмм  $Ag_2S$ ,  $Cu_2S$  и  $In_2S_3$  были совместно перетёрты и загружены в ампулы из кварцевого стекла (8 мм – внутренний диаметр, 11 мм – внешний диаметр, 110 мм – длина).  $I_2$  был использован в качестве транспортного реагента при синтезе образцов 4152 (ZnS + 1 мол.%  $Ag_2S$ ) и 4169 (ZnS + 0.125 мол.%  $Ag_2S$  + 0.125 мол.%  $In_2S_3$ ). Образец 3757 (ZnS + 0.01 мол.%  $In_2S_3$ ) был синтезирован с использованием  $NH_4Cl$  в качестве транспортного реагента. Ампулы, заполненные начальными реагентами, были запаяны под вакуумом в пламени газовой горелки и помещены в горизонтальную печь с постоянным температурным градиентом. Печь нагревалась до температуры синтеза в течение 2–3 часов, после чего ампулы выдерживались при этой температуре в течение 20 дней. Температурный градиент в печи составлял 50–100 °С, температура на горячем конце ампулы составляла 850 °С. В конце эксперимента ампулы были закалены в холодной воде. Образец 4197 (ZnS + 6 мол.%  $Cu_2S$  + 8 мол.%  $In_2S_3$ ) был синтезирован с помощью метода сухого синтеза в ампуле из кварцевого стекла, заполненной порошкообразными сульфидами. Синтез проводился при 550 °С в течение 28 дней. После двух недель ампула была закалена и порошок перетёрт для обеспечения гомогенности, потом снова загружен в ампулу и выдержан при температуре синтеза ещё две недели. Стандарты были подготовлены тем же методом. Образцы 4065 (ZnS + 0.6 мол.%  $Cu_2S$ ), 4086 (ZnS + 0.02 мол.%  $Cu_2S$  + 0.6 мол.% FeS), 4108 (ZnS + 0.08 мол.%  $Cu_2S$  + 0.04 мол.%  $In_2S_3$ ) и 4186 (ZnS + 0.05 мол.%  $Cu_2S$  + 0.05 мол.%  $In_2S_3$ ) были получены методом синтеза в эвтектической смеси хлоридов щелочных металлов (NaCl/KCl) при постоянном температурном градиенте. Ампулы были подготовлены как описано выше. Температура составляла 790 и 734 °С на горячем и холодном концах соответственно.

### Аналитические методы

Синтезированные кристаллы были изучены методами рентгеновской дифракции на приборе Rigaku D/Max 2200 X-ray diffractometer (CuK $\alpha$ , 40 kV, 20 mA, шаг 0.02°). Морфология кристаллов была изучена методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ/ЭРС) на микроскопе JSM-5610LV, оснащённом энергодисперсионным спектрометром INCA-450. Химический состав образцов был определён методами рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) и масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой и лазерной абляцией (ЛА-ИСП-МС). РСМА анализы проводились на электронном зонде JEOL JXA-8200 WD/ED, оснащённом пятью волновыми спектрометрами. При анализе методом ЛА-ИСП-МС использовался Thermo X Series 2 квадрупольный масс-спектрометр, соединённый с системой лазерной абляции NewWave 213. Регистрация рентгеновских спектров поглощения проводилась на линии Rossendorf BM20 Европейского источника синхротронного излучения – ESRF (Гренобль, Франция). Для обработки полученных данных был использован пакет программ IFEFFIT.

## Результаты

Данные рентгеновской дифракции подтвердили фазовый состав образцов, отвечающий сфалериту. Результаты методов РСМА и ЛА-ИСП-МС показали, что химический состав полученных кристаллов соответствует составу стартовой смеси. Изображения, СЭМ не выявили включений металлического Ag, Cu или их сульфидов в синтезированных образцах. Методом ЛА-ИСП-МС показана однородность распределения  $^{113}\text{In}$ ,  $^{63}\text{Cu}$  и  $^{107}\text{Ag}$ .

*XANES спектроскопия.* На рис. 1 показаны XANES-спектры для K-края поглощения In, Ag и Cu в сфалеритах и стандартных образцах.

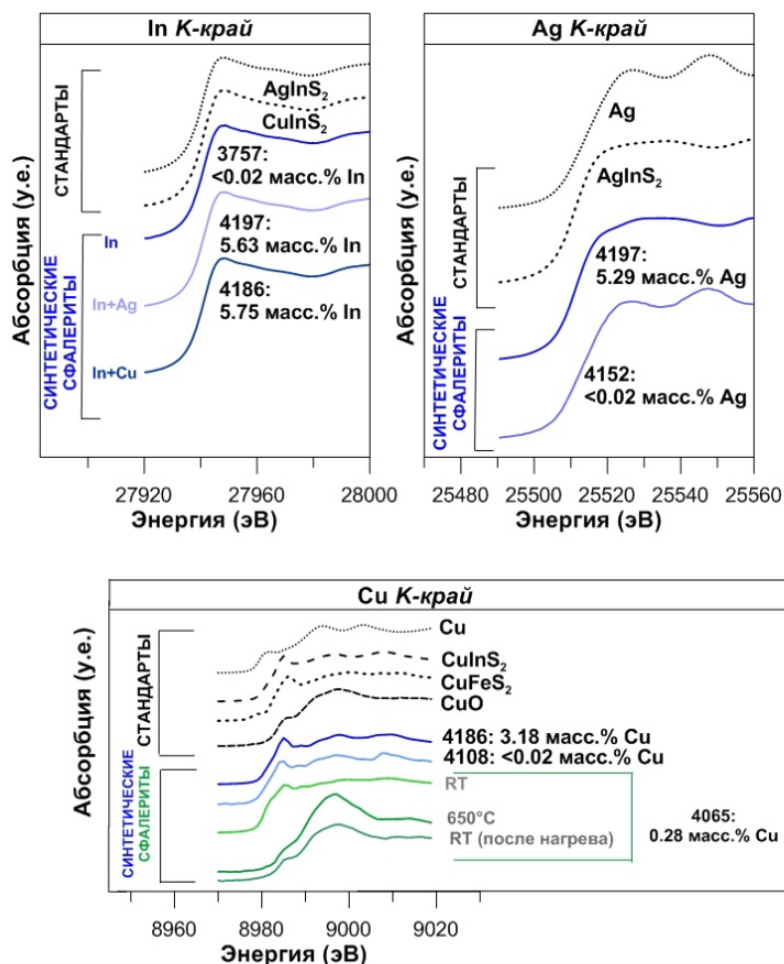


Рис. 1. Околокраевая структура спектров поглощения InK-края, AgK-края и CuK-края в сфалеритах и стандартах ( $\text{AgInS}_2$ , Ag, Cu,  $\text{CuInS}_2$ ,  $\text{CuFeS}_2$ , CuO)

*In K-край поглощения.* Положение края поглощения (к.п.) и первого интенсивного пика (белой линии, БЛ) во всех образцах сфалерита отличаются от соответствующих параметров у стандартов  $\text{In}_2\text{S}_3$  и  $\text{In}_2\text{O}_3$ . Таким образом, состояние In в сфалерите отличается от оксида и сульфида. Положение края поглощения и форма спектров In-содержащих сфалеритов близки к стандартным образцам –  $\text{CuInS}_2$  (в случае In-Cu сфалеритов: образцы 3757, 4108, 4186) и  $\text{AgInS}_2$  (в случае In-Ag сфалеритов: образцы 4169 и 4197). Это указывает на то, что In в сфалерите имеет «формальную» степень окисления 3+. Кроме того, можно предположить, что геометрия локального атомного окружения In в образцах сфалерита унаследована от структур рокезита  $\text{CuInS}_2$  и лафоретита  $\text{AgInS}_2$ .

*Ag K-край поглощения.* Формы XANES-спектров Ag K-края и результаты линейной комбинации спектров показывают, что Ag в образце 4152 находится в форме металла  $\text{Ag}^0$  (80%) и в виде  $\text{Ag}^+$  (20%). В образце 4169 Ag также находится в форме металла  $\text{Ag}^0$  (64%) и  $\text{Ag}^+$  (36%). В образце 4197  $\text{Ag}^+$  преобладает, и форма спектра отличается от  $\text{AgInS}_2$  и  $\text{Ag}_2\text{S}$ . Это означает, что Ag находится

в сфалерите в форме твёрдого раствора. В этой серии образцов наблюдается закономерное смещение первого интенсивного пика  $БЛ_{AgInS_2} < БЛ_{4197} < БЛ_{4169} < БЛ_{4152} < БЛ_{Ag}$ . Эта зависимость связана с увеличением доли металлического  $Ag^0$  в этом ряду.

*Си К-край поглощения.* Спектры XANES всех медьсодержащих образцов значительно отличаются от стандарта  $Cu^0$ . Спектры образцов 4186, 4108 и 4086 близки к стандарту  $CuInS_2$ . Следственно Си имеет формальную степень окисления 1+. Отсутствие характерного пре-пика в спектре  $CuInS_2$  и Си-In-содержащем сфалерите подтверждает степень окисления 1+ для меди, которая согласуется со степенью окисления 3+ для In. Спектр образца 4065, записанный при комнатной температуре, отличается от  $CuInS_2$ , но похож на спектры сульфидов одновалентной меди. Его спектр, записанный *in situ* при 650 °С, и спектр после нагрева соответствуют стандарту  $CuO$ , что, вероятно, связано с окислением образца.

*EXAFS спектроскопия.* На рис 2. показаны Фурье трансформанты EXAFS-спектров In, Ag и Си К-края поглощения для образцов сфалерита.

*In К-край поглощения.* Лучший результат при обработке спектров Ag-In и Си-In сфалеритов достигается при изоморфном замещении  $In \leftrightarrow Zn$  в структуре сфалерита. Анализ экспериментальных спектров показал, что локальное атомное окружение In не зависит от химического состава образцов сфалерита. В образцах 4169 и 4197 локальное окружение In схоже и не зависит от концентрации Ag (для первой координационной сферы  $N_S \sim 4$ ,  $R_{In-S} \sim 2.48 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ). Межатомное расстояние In-S возрастает по сравнению с чистым сфалеритом (2.31 Å). В образце 4197 вторая координационная сфера состоит из 12 атомов Zn ( $R_{In-Zn} \sim 3.93 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ), а третья координационная сфера – из 12 атомов S ( $R_{In-S} \sim 4.48 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ). В образце 3757, который не содержит Ag и Си, In имеет тетраэдрическую координацию из атомов S в первой координационной сфере ( $R_{In-S} \sim 2.45 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ), 12 атомов Zn во второй сфере ( $R_{In-S} \sim 3.91 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ) и 12 атомов S в третьей координационной сфере ( $R_{In-S} \sim 4.48 \text{ \AA} \pm 0.02 \text{ \AA}$ ). Все межатомные расстояния завышены относительно чистого сфалерита. Во второй координационной сфере не было обнаружено присутствия In. Это указывает на образование In-содержащего твёрдого раствора в сфалерите без образования In-In кластеров.

*Ag К-край поглощения.* Лучшее описание экспериментальных спектров в образце 4197 получено при замещении атомами Ag атомов Zn в структуре сфалерита. В этом образце Ag имеет тетраэдрическую координацию из атомов серы на расстоянии  $2.49 \text{ \AA} \pm 0.02 \text{ \AA}$ . Увеличение расстояния Ag-S на 0.18 Å у Ag твёрдом растворе по сравнению с расстоянием Zn-S в чистом сфалерите можно объяснить большой разницей в ионных радиусах у этих металлов (0.6 Å для Zn и 1.0 Å для Ag, [8]). Вторая координационная сфера значительно расширяется ( $N_{Zn} \sim 12$ ,  $R_{Ag-Zn} \sim 3.91 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ , в чистом сфалерите  $R_{Zn-Zn} = 3.83 \text{ \AA}$ ). В свою очередь, межатомные расстояния в третьей сфере ( $N_S \sim 12$ ,  $R_{Ag-S} \sim 4.19 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ ) значительно занижены по сравнению с чистым сфалеритом ( $R_{Zn-S} = 4.49 \text{ \AA}$ ). В образце 4152 большая часть Ag находится в форме  $Ag^0$  ( $N_{Ag} \sim 8.3 \pm 1.5$ ,  $R_{Ag-Ag} = 2.86 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ , параметры локального атомного окружения Ag в форме метала:  $N_{Ag} = 12$ ,  $R_{Ag-Ag} = 2.88 \text{ \AA}$ ). В образце сфалерита 4169 локальное атомное окружение наследуется от металлического  $Ag^0$  и  $Ag^+$  в твёрдом растворе.

*Си К-край поглощения.* EXAFS-спектр Си К-края образца 4186 (Си-In-сфалерит) лучше всего описывается моделью твёрдого раствора с  $N_S \sim 4$ . В этом образце расстояние Си-S в первой координационной сфере составляет  $R_{Cu-S} \sim 2.30 \pm 0.01 \text{ \AA}$  (2.31 Å для чистого сфалерита). Во второй координационной сфере атом Си окружен 12 атомами Zn ( $R_{Cu-Zn} \sim 3.85 \pm 0.04 \text{ \AA}$ ), а в третьей сфере Си координируется 12 атомами S ( $R_{Cu-S} \sim 4.43 \pm 0.04 \text{ \AA}$ ). Локальное атомное окружение Си в сфалерите близко к чистому сфалериту, поскольку Си и Zn имеют одинаковый ионный радиус.

Обработка спектров образцов 4065, 4086 и 4108 ещё не завершена. Тем не менее, мы обнаружили, что координационные числа меди варьируют от  $N_{Cu-S} \sim 2.3$  до  $N_{Cu-S} \sim 3.9$ . Межатомные расстояния равны  $2.26 \text{ \AA} \pm 0.01 \text{ \AA}$ . Мы предполагаем, что сложности в обработке спектров вызваны разупорядоченностью в структуре сфалерита вследствие замещения цинка на медь кластеризацией Си или примесью сульфида Си.

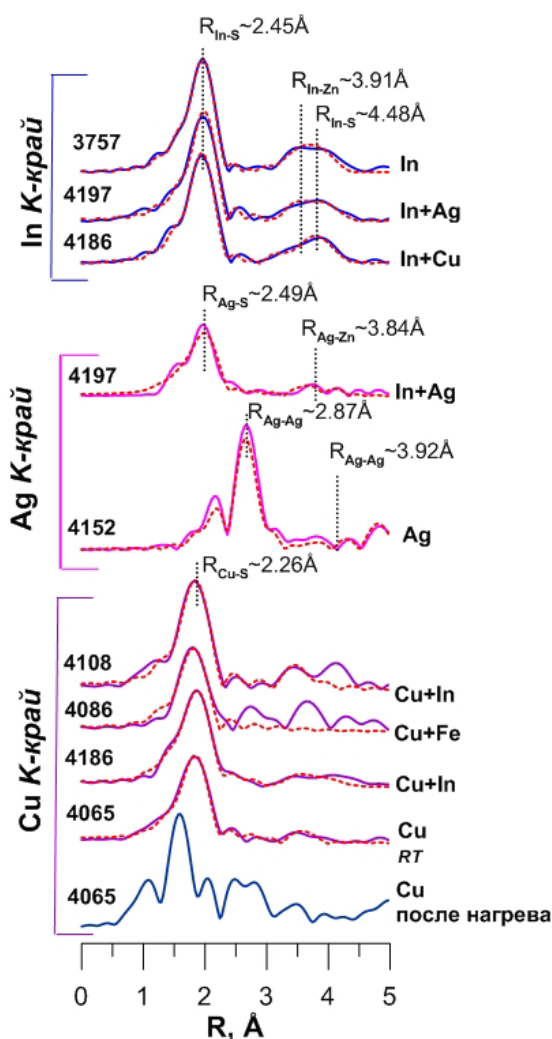


Рис. 2. Фурье трансформанты осциллирующих частей EXAFS-спектров для  $\text{InK}$ -края,  $\text{AgK}$ -края и  $\text{CuK}$ -края поглощения. Сплошные линии – эксперимент, пунктирные – результат подгонки. Состав примесей показан рядом со спектрами

### Выводы

Выполнен синтез кристаллов  $\text{In}$ -,  $\text{Ag}$ - и  $\text{Cu}$ -содержащих сфалеритов с содержанием примесей 0.01–1 мол.%. Результаты РСМА и ЛА-ИСП-МС анализов показали, что элементы-примеси равномерно распределены в сфалеритовой матрице.

Рентгеновская спектроскопия поглощения была использована, чтобы определить локальное атомное окружение и валентное состояние примесей в синтезированных кристаллах. В соответствии с данными XANES-спектроскопии элементы представлены в сфалерите в «формальных» степенях окисления  $3+$  ( $\text{In}$ ),  $1+$  ( $\text{Ag}$ ,  $\text{Cu}$ ) и  $0$  ( $\text{Ag}$ ). Наши данные показывают, что  $\text{In}$ ,  $\text{Cu}$  и  $\text{Ag}$  в сфалерите могут быть представлены в форме твёрдого раствора, который образовался по схеме компенсации заряда  $2\text{Zn}^{2+} \leftrightarrow \text{Me}^+ + \text{Me}^{3+}$ . Образование твёрдых растворов по механизму компенсации заряда металлами 11-й группы периодической системы ( $\text{Cu}$ ,  $\text{Ag}$ ,  $\text{Au}$ ) возможно и с другими трёхвалентными элементами ( $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{As}^{3+}$  и т.д.), но этот вопрос требует дальнейшего экспериментального изучения.

*Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ No. 17-17-01220 (Ag-In сфалериты), гранта РНФ №18-77-00078 (Cu-In сфалериты) и ESRF (эксперимент ES-703).*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Cook N.J., Ciobanu C.L., Pring A., Skinner W., Shimizu M., Danyushevsky L., Saini-Eidukat B., Melcher F. Trace and minor elements in sphalerite: ALA-ICPMS study // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 2009. № 73. P. 4761–4791.

2. Cook N.J., Ciobanu C.L., Brugger J., Etschmann B., Howard D.L., Jonge M.D., Ryan C., Paterson D. Determination of the oxidation state of Cu in substituted Cu-In-Fe-bearing sphalerite via  $\mu$ -XANES spectroscopy // *American Mineralogist*. 2012. № 97. P. 476–479.
3. Murakami H., Ishihara S. Trace elements of Indium-bearing sphalerite from tin-polymetallic deposits in Bolivia, China and Japan: Femto-second LA-ICPMS study // *Ore Geological Review*. 2012. № 53. P. 223–243.
4. Chareev D.A. General principles of the synthesis of chalcogenides and pnictides in salt melts using a steady-state temperature gradient // *Crystallography reports*. 2016. № 61. P. 506–511.
5. Chareev D.A., Volkova O.S., Geringer N.V., Koshelev A.V., Nekrasov A.N., Osadchii V.O., Osadchii E.G., Filimonova O.N. Synthesis of chalcogenide and pnictide crystals in salt melts using a steady-state temperature gradient // *Crystallography reports*. 2016. № 61. P. 682–691.
6. Kullerud G. Experimental techniques in dry sulfide research // *Research Techniques for High Pressure and High Temperature*. 1971. P. 288–315.
7. Chareev D.A., Osadchii V.O., Shiryaev A.A., Nekrasov A.N., Koshelev A.V., Osadchii E.G. Single-crystal Fe-bearing sphalerite: synthesis, lattice parameter, thermal expansion coefficient and microhardness // *Physical Chemistry of Minerals*. 2017. № 44. P. 287–296.
8. Shannon R.D. Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides // *Acta Crystallographica*. 1976. № 32. P. 751–767.

УДК 543.632.9

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ИК-ФУРЬЕ СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ВИТАМИНА Е С ПОВЕРХНОСТИ КОЖИ ВО ВНУТРЕННИЕ СЛОИ

*И.Н. Фадейкина<sup>1</sup>, Е.С. Пеункова<sup>1</sup>, Б.К. Зуев<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup>Государственный университет «Дубна», РФ, 141982, г. Дубна, ул. Университетская, д. 19,  
i.fadeikina@yandex.ru

<sup>2</sup>ГЕОХИ РАН, РФ, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д. 19

*Рассматривается возможность применения ИК-Фурье спектроскопии для оценки изменения содержания альфа-токоферола (витамина Е), нанесенного на поверхность кожи, с течением времени. Предполагается, что данный косметический актив переносится с поверхности кожи во внутренние слои практически полностью, при этом наблюдается уменьшение интенсивности колебательных полос поглощения в ИК-спектре вещества при последовательном отборе проб с поверхности кожи в течении выбранного промежутка времени. Построенные градуировочные зависимости позволяют провести количественную оценку содержания витамина Е на поверхности кожи в каждый момент времени после нанесения.*

*Ключевые слова: ИК-спектроскопия, витамин Е, количественный анализ, трансдермальные свойства кожи, кинетика массопереноса*

### Об авторах

**Фадейкина Ирина Николаевна** – кандидат технических наук, доцент кафедры химии, новых технологий и материалов, государственный университет «Дубна».

**Пеункова Елена Станиславовна** – магистрант кафедры химии, новых технологий и материалов, государственный университет «Дубна».

**Зуев Борис Константинович** – доктор технических наук, профессор кафедры химии, новых технологий и материалов, государственный университет «Дубна», зав. лабораторией сенсоров и определения газообразующих примесей ГЕОХИ РАН.

Трансдермальные свойства кожи – один из главных вопросов в косметологии и дерматологии. Изучение процессов переноса веществ, например косметических активов и вспомогательных веществ, позволит определять нормы ввода компонентов в рецептуру косметического средства, механизмы воздействия и многое другое. Один из подходов, с помощью которого можно ответить на вопрос о переносе активных компонентов, таких как гиалуроновая кислота, пептиды, витамины и т.п., – разработка способов измерения их концентрации в малых количествах для изучения особенностей проникновения данных активов в кожу.

Благодаря высокой информативности спектров и разнообразия возможностей их получения ИК-спектроскопия является одним из важнейших методов анализа органических веществ, поскольку