Conference Cluster

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

20-24 сентября 2021 г.
Иваново, Россия

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021

XIV МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ СОЛЬВАТАЦИИ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ»

XI МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ. КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И МАТЕРИАЛЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ»

VI МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

XIII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ» (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

СОДЕРЖАНИЕ

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021:

XIV Международная научная конференция «Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах»

XI Международная научная конференция "Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения"

VI Международная научная конференция по химии и химической технологии

XIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем» (Крестовские чтения)

(Тезисы докладов)

Тезисы докладов опубликованы в авторской редакции

ISBN 978-5-904580-87-2

Подписано в печать 19.07.2021 г. Формат 60x84 1/8
Печать плоская. Печ. л. 52,0. Усл. печ. л. 48,4.
Заказ № 21301. Тираж 50 экз

Изд. Лиц. ЛР № 049975 от 29.06.1999

Отпечатано в АО «Ивановский издательский дом»
153000, г. Иваново, ул. Степанова, 5. Тел./факс: (4932) 30-32-37, 30-14-11
E-mail: 301411@rambler.ru

КООРДИНАЦИОННЫЕ И КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ОКСАЗАМЕЩЁННЫХ ПОРФИРИНОИДОВ

Плотникова А.О. [1], Киселёв А.Н.[1], Шелехова Д.А [1], Пуховская С. Г.[1], Иванова Ю.Б.[2], Сырбу С.А.[2]
[1]*Ивановский Государственный химико-технологический университет*
Россия ,153000 г. Иваново, пр. Шереметевский, 7
e-mail:svetlana.puhovskaya@mail.ru
[2]*Федеральное бюджетное учреждение науки Институт химии растворов им. Г. А. Крестова РАН, 153045, Иваново, ул. Академическая, 1*

Важной задачей современной химии является поиск путей создания новых материалов для высокочувствительных оптических сенсоров. Использование макрогетероциклов – уникальных соединений, имеющих протяженные контуры π-электронного сопряжения, функциональные гетероатомы и группы, позволяет создавать материалы, обладающие необходимыми для практики набором спектральных и фотофизических характеристик. С этой целью синтезированы моно- и ди-оксазамещённые производные порфиринов (порфириноиды), содержащие в реакционном центре донорные атомы кислорода. Такие замещения оказывают большое влияние на электронную структуру макроцикла и приводят к соединениям с новыми функциональными свойствами, которые существенно отличаются от свойств классических порфиринов. Синтезированные соединения идентифицированы методами электронной абсорбционной, ЯМР ^{1}H спектроскопии и масс-спектрометрии.
Для полученных соединений - 5,10,15,20-тетрафенил-21-оксапорфирина и 5,10,15,20-тетрафенил-21,23-диоксапорфирина методом спектрофотометрического титрования изучены кислотно-основные свойства, определены параметры электронных спектров поглощения ионизированных и молекулярных форм, определены концентрационные интервалы их существования. Исследована кинетика реакций образования медных комплексов окса-замещённых производных 5,10,15,20-тетрафенилпорфина при 288 - 308K в растворителях различной природы. Проведен сравнительный анализ полученных кинетических параметров реакции комплексообразования в сравнении со структурным аналогом – тетрафенилпорфином. В докладе обсуждаются возможности гетерозамещённых порфиринов качестве активных компонентов для создания катион- селективных материалов.
Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-03-00214

PARTITIONING OF AMPHIPHILIC COMPOUND IN AQUEOUS MICELLAR SYSTEMS CONTAINING NONIONIC ETHOXYLATED SURFACTANT AND SURFACE ACTIVE ALKYLIMIDAZOLIUM IONIC LIQUID: EXPERIMENT AND MODELING

Iakovleva E.A., Safonova E.A., Victorov A.I.
Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, Russia
st050655@student.spbu.ru

Surfactants are amphiphilic compounds that self-aggregate in solutions at concentrations higher than their critical micelle concentration (cmc). These aggregates – micelles – contain a hydrophobic core and hydrophilic “corona” where strong interactions between water molecules and surfactant’s polar heads take place. The microheterogeneity of micellar aggregates makes it possible to solubilize various compounds whose localization in the micelle strongly depends on their polarity. For instance, amphiphilic compounds like long-chain alcohols usually extend between the core and “corona” parts of the micelle, affecting surfactant’s aggregation behavior as cosurfactants. One of the key parameters quantifying the solubilization process is the micelle-water partition coefficient K^{MW}, that is the ratio of a solute concentration in micelles to that in bulk water.
Solubilization phenomenon gave rise to application of such systems in many technological and biotechnological processes, during the formulation of products containing water-insoluble ingredients, micellar catalysis, oil recovery, drug delivery, water and soil purification and remediation etc. However, presence of multiple components, particularly cosurfactants, may sufficiently improve solubilization capacity of micellar solutions. For this reason, the effect of additives is of key importance.
In the present work, aggregation characteristics of the aqueous micellar systems of nonionic surfactant (Triton X-114) with ionic liquid (1-methyl-3-octylimidazolium chloride) as surface-active additive were studied both experimentally and with the aid of a molecular-thermodynamic model. n-Octanol was considered as a model solute while Triton X-114 was chosen due to its biocompatibility and environmental safety. Molecular-thermodynamic modeling was performed using a modification of the classical Nagarajan-Ruckenstein micellization model [1] that takes into account the structure of micellar “corona” of poly(oxyethylene) nonionic surfactant with hydration water

and solubilized amphiphile [2]. The model describes the dependence of the free energy of micellization and the aggregation properties on the composition and thickness of the micellar “corona”.
The results demonstrate that n-octanol exists mostly in Triton X-114 micelles residing at the core – “corona” boundary with one methylene group located in the outer layer of the micelle. Alcohol solubilization in Triton X-114 aggregates leads to a decrease in cmc values and to micellar growth.
This work is financially supported by Russian Science Foundation, project # 20-13-00038.

1. R. Nagarajan, E. Ruckenstein. *Langmuir*, 1991, **7** (12), 2934-2969.
2. A.I. Victorov. *J. Chem. Eng. Data*, 2014, **59** (10), 2995-3002

МОЛЕКУЛЯРНО - ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОУНТ В 2–ПИРРОЛИДОНЕ И N,N–ДИМЕТИЛАЦЕТАМИДЕ

Алешонкова А.А.[1], Кузьмиков М.С.[1,2], Фомина Н.А.[2],
[1]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*
[2]*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*
a-aleshonkova@list.ru

Однослойные углеродные нанотрубки (ОУНТ) склонны образовывать агломераты, что затрудняет проявление их различных уникальных свойств и, как следствие, ограничивает их применение. Следовательно, получение однородных суспензий ОУНТ с высоким содержанием индивидуальных нанотрубок является одной из наиболее актуальных задач в области наноматериалов.
В настоящее время, достаточно стабильные дисперсии ОУНТ получены с использованием амидных растворителей. Наличие пары свободных электронов и высокого сольватохромного параметра полярности, а также π – системы в амидных растворителях, объясняет их способность к диспергированию ОУНТ. Поэтому для проведения расчетов, в нашей работе, в качестве диспергирующих агентов были выбраны 2 - пирролидон и N,N - диметилацетамид.
Цель работы заключалась в оценке эффективности 2 - пирролидона и N,N - диметилацетамида для диспергирования однослойных углеродных нанотрубок методом молекулярно - динамического моделирования.
Моделирование проводилось по общему МД – алгоритму [1] в программном пакете "Gromacs-2020.4". Сначала системы с амидными растворителями переводились в состояние релаксации путем минимизации энергии. Для верификации стабильности системы было проведено моделирование в NVT – ансамбле при температуре 300 K, использовался термостат Nosé–Hoover с константой релаксации 0,1 пс. Полученная на предыдущем этапе конфигурация системы являлась входной для моделирования в NPT – ансамбле. Данный ансамбль рассчитывался при давлении 1 бар, применялся термостат Берендсена с константой релаксации 0,1 пс. Параметры несвязанного взаимодействия для углерода УНТ соответствовали параметрам атомов углерода находящихся в бензольном кольце, взятых из силового поля OPLS – AA. Парциальный заряд был установлен равным нулю. Для оценки степени диспергирования ОУНТ были получены энергии свободного связывания двух растворителей с ОУНТ, путем анализа функций потенциала средней силы. Полученные результаты обсуждаются в докладе.
Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 20-03-00037-а).

1. M.P. Allen and D.J. Tildesley Computer simulation of liquids. Second Ed. Oxford University Press. 2017, 640 p.

СТРУКТУРНЫЕ И ТЕРМОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ ТИОКОНАЗОЛА И КЛОТРИМАЗОЛА С ВИННОЙ КИСЛОТОЙ

Бойцов Д.Е.[1,2], Манин А.Н.[1], Дрозд К.В.
[1]*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*
[2]*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*
debvoycov11@gmail.com

Большое количество лекарственных веществ имеют низкую растворимость в воде, а, следовательно, и биодоступность, поэтому важной задачей является поиск новых форм лекарственных веществ. Одним из подходов изменения растворимости является метод получения многокомпонентных кристаллов лекарственных веществ. Объектами данного исследования стали два противогрибковых соединения: