
TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY



ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ

МАТЕРИАЛЫ

XXIII Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

ТОМ 1

ХХТ-2022

16 – 19 мая 2022 года, г. Томск

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА ПРИРОДНЫХ РЕСУРСОВ
ИНЖЕНЕРНАЯ ШКОЛА НОВЫХ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ШКОЛА ХИМИЧЕСКИХ И БИМЕДИЦИНСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ

Том 1

Материалы
XXIII Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых
имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера

16–19 мая 2022 г.

Томск 2022

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0
Х46

Химия и химическая технология в XXI веке : материалы
Х46 XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера. В 2 томах. Том 1 (г. Томск, 16–19 мая 2022 г.). / Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2022. – 472 с.

ISBN 978-5-4387-1071-4 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1070-7

В сборнике представлены материалы XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке» имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера. В материалах сборника обсуждаются вопросы исследования современных материалов, синтеза органических и неорганических соединений широкого круга применения и воздействия химической промышленности на окружающую среду. Большое внимание уделено исследованию свойств специальных материалов и покрытий. Рассмотрены современные подходы к моделированию каталитических процессов получения топлив на основе биоразлагаемого сырья. Многие работы, посвященные синтезу химико-технологических систем и исследованию свойств молекул, выполнены с использованием моделирующих программ. Среди материалов конференции представлены научные работы школьников Российской Федерации, а также работы, докладываемые на английском языке.

УДК 54+66(063)
ББК 24+35л0

Оргкомитет
конференции:

634050, Томск, пр. Ленина, 43а, ТПУ, ауд. 136,
ОХИ ИШПР ТПУ
Тел. +7-913-809-91-17
e-mail: orgcomННТ@tpu.ru
hht.tpu.ru

ISBN 978-5-4387-1071-4 (т. 1)
ISBN 978-5-4387-1070-7

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2022

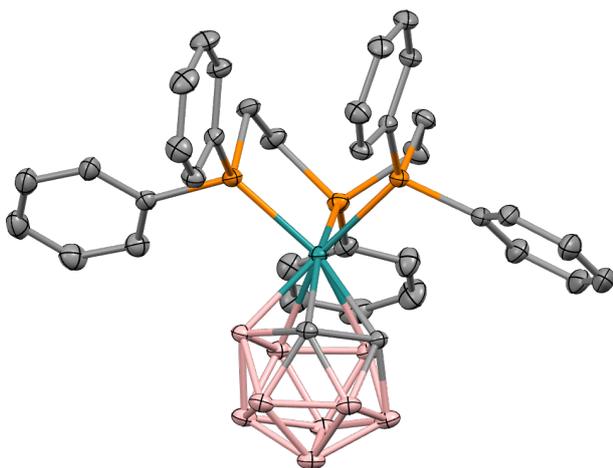


Рис. 2. Структура комплекса **3** (клозо-)

Известно, что среневзвешенное борное число для ^{11}B ЯМР спектроскопии однозначно характеризует конфигурацию карборановых комплексов. Анализ полученных образцов этим методом подтверждает выводы, полученные при проведении квантово-химических расчетов.

Пример клозо- и псевдоклозо- структур для комплексов **3** и **8**, полученных в результате ис-

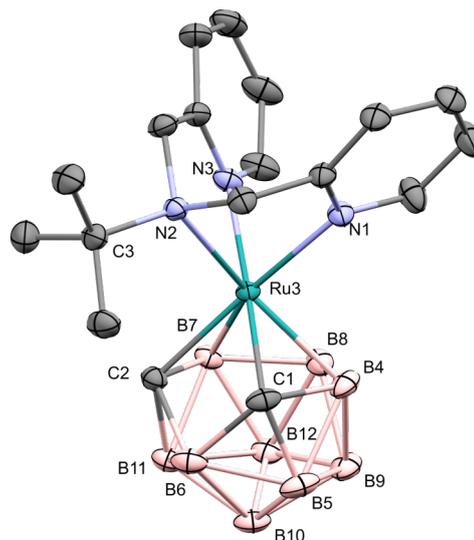


Рис. 3. Структура комплекса **8** (псевдоклозо-)

следования образцов методом PCA приведены на рис. 2 и 3.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента Российской Федерации (проект МД-1474.2022.1.3).

Список литературы

1. Kaltenberg A. A. // *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2021. – V. 2021. – № 46. – P. 4868 – 4874.

КОМПЛЕКСЫ МЕТАЛЛОВ ПЛАТИНОВОЙ ГРУППЫ С АЦИКЛИЧЕСКИМИ ДИАМИНОКАРБЕНОВЫМИ ЛИГАНДАМИ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ

М. А. Кинжалов

Санкт-Петербургский государственный университет
Санкт-Петербург, Россия, Университетский пр. 26, m.kinzhalov@spbu.ru

Соединения металлов платиновой группы с органическими лигандами проявляют эффективную флуоресценцию, фосфоресценцию, а также термически активированную замедленную флуоресценцию в широком спектральном диапазоне. Наличие данных свойств делает их привлекательными объектами для применения в создании OLED, а также в области люминесцентных хемосенсоров, фотокатализа и биомиджинга. Сильное спин-орбитальное взаимодействие в комплексах переходных металлов допускает переход из синглетного возбужденного состояния в триплетное с последующей фос-

форесценцией. Среди соединений переходных металлов комплексы иридия (III) и платины (II) являются наиболее эффективными фосфоресцирующими излучателями благодаря высокой заселенности триплетных возбужденных состояний из которых происходят процессы радиационного распада.

Фотофизические свойства, такие как цвет эмиссии и её эффективность, определяется не только выбором подходящего металлоцентра, но и донорными свойствами органического лиганда. Однако для некоторых типов триплетных люминофоров могут происходить нежелатель-

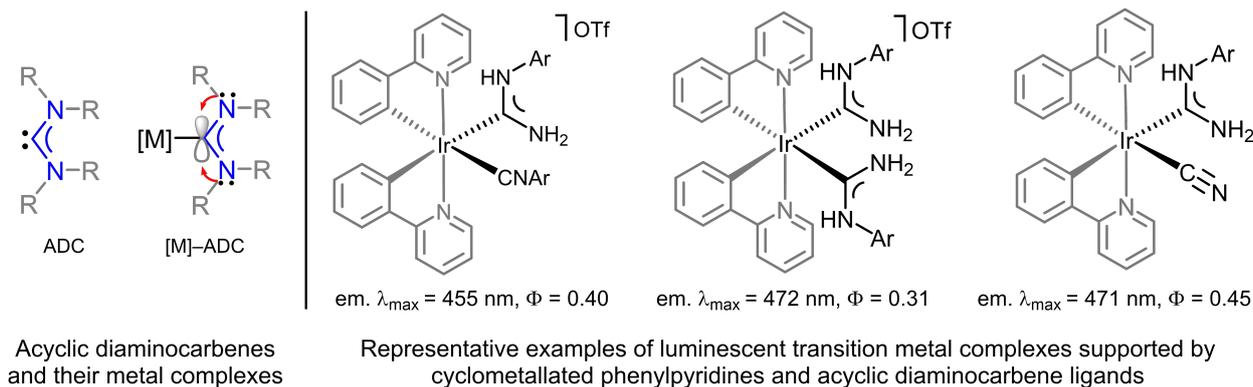


Рис. 1.

ные процессы фоторазложения, протекающие посредством диссоциации лиганда после термического заселения металцентрированных возбужденных состояний, расположенных по энергии выше эмиссионного уровня. Внедрение в молекулу металлолюминофора сильных σ -донорных лигандов, таких как гетероциклические (NHC) и ациклические (ADC) диаминокарбены, приводит к увеличению расщепления полей лигандов d-орбиталей, поэтому позволяет получать фосфоресцирующие с высокими квантовыми выходами соединения.

Главными преимуществами ADC по сравнению с NHC являются их повышенная структурная гибкость (способность принимать различные конформации) и синтетическая доступность [1]. Для синтеза ADC производных разработан ряд экспериментальных методов, среди которых метод, основанный на металлопромотируемом нуклеофильном присоединении к изоцианидам, является наиболее перспективным. Метод позволяет получать широкую гамму соединений с различным набором электронодонорных и стерических параметров подбором подходящей пары изоцианид–нуклеофил. Исследования последнего десятилетия, проведенные в том числе и в нашей научной группе, свидетельствуют о

перспективности такого подхода в создании светоизлучающих материалов [2].

Присоединение аммиака к изоцианидным лигандам в циклометаллированных комплексах иридия (III) использовано для создания нового семейства люминофоров на основе комплексов иридия (III) с ациклическими диаминокарбеновыми лигандами (Рисунок, правая часть) [3]. В растворе при фотовозбуждении УФ-светом все полученные соединения демонстрируют интенсивную фосфоресценцию в сине-зелёном спектральном диапазоне (450–620 нм). Переход от изоцианидных лигандов к карбеновым приводит к батохромному смещению максимума эмиссии на 20 нм. Дальнейшее теоретическое исследование подтвердило, что превращение изоцианидного лиганда в ADC лиганд увеличивает относительный вклад d-орбиталей иридия в ВЗМО, вызывая уменьшение зазора ВЗМО–НСМО и усиление смешивания $^1\text{MLCT}$ и ^3LC состояний [3]. Данные люминесцентные материалы характеризуются высокоэффективной фосфоресценцией и могут использоваться в качестве пигментов органических светоизлучающих диодов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект 21-73-10083) и с использованием оборудования Научного парка СПбГУ.

Список литературы

1. Кинжалов М. А., Лузянин К. В. // *Журн. неорг. химии*, 2022. – Т. 67. – № 1. – С. 54–102.
2. Kinzhalov M. A., Grachova E. V., Luzyanin K. V. // *Inorg. Chem. Front*, 2022. – V. 9. – P. 417–439.
3. Eremina A. A., Kinzhalov M. A. et al. // *Inorg. Chem.*, 2020. – V. 59. – P. 2209–2222.