

CONFERENCE CLUSTER  
SOLVATION  
CRYSTALLIZATION  
SMART MATERIALS  
2018

# КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018



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



X Международная  
научная конференция  
«Кинетика и механизм  
кристаллизации.  
Кристаллизация и материалы  
нового поколения»



Международный симпозиум  
«Умные материалы»

Летняя школа-конференция  
молодых ученых  
«Моделирование умных материалов»

## ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

1-6 июля 2018 г.  
Суздаль, Россия

**Федеральное агентство научных организаций  
Российский фонд фундаментальных исследований  
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН  
Российская академия наук  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
Ивановский государственный химико-технологический университет**

## **КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018:**

**XIII Международная научная конференция  
«Проблемы сольватации и комплексообразования в  
растворах»**

**X Международная научная конференция  
«Кинетика и механизм кристаллизации.  
Кристаллизация и материалы нового поколения»**

**Международный симпозиум «Умные материалы»**

**1 – 6 июля 2018 г.**

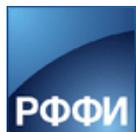
**г. Суздаль, Россия**

**Кластер конференций 2018 и Летняя школа-конференция молодых ученых «Моделирование умных материалов» проводятся при участии и поддержке:**



ФАНО России  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО  
НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

**Федеральное агентство научных организаций**



**Российский фонд фундаментальных исследований**

*Кластер конференций 2018 и Летняя школа-конференция молодых ученых «Моделирование умных материалов» проводятся при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований  
Проекты: № 18-03-20035,  
№ 18-33-10017 мол\_г*



**ИХР**

**Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН**



**Российская академия наук**



**Московский государственный университет  
им. М.В. Ломоносова**



**Ивановский государственный химико-  
технологический университет**



**ЗАО «ШАГ»**



**Компания Техноинфо Лтд.**



**ООО "СокТрейд Ко"**



**ООО "Фотокор"**



**ОАО «ИВХИМПРОМ»**

**INTERTECH Corporation**

**INTERTECH Corporation**

**Информационная поддержка**

Научно-практический журнал «Жидкие кристаллы и их практическое использование»  
Журнал «Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология»

## **КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018**

### **Организационный комитет**

**Председатель:** акад. РАН Лунин В.В. (МГУ, Москва)

**Сопредседатели:** д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бутман М.Ф. (ИГХТУ, Иваново)

**Ученые секретари:** к.х.н. Алексеева О.В., ИХР РАН, Иваново  
к.х.н. Волкова Т.В., ИХР РАН, Иваново

проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Антипа Е.В. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Антипин И.С. (ИОФХ РАН, Казань)  
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)  
проф. Бештер-Рогач М. (Университет Любляны, Словения)  
к.х.н. Будков Ю.А. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)  
акад. РАН Бузник В.М. (ВИАМ, Москва)  
проф. Бухнер Р. (Университет Регенсбурга, Германия)  
проф. Вацадзе С.З. (МГУ, Москва)  
проф. Викторов А.И. (СПбГУ, С.-Петербург)  
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)  
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)  
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С.-Петербург)  
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)  
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)  
проф. Идрисси А. (Университет Лилля, Франция)  
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Атлантики, Франция)  
проф. Каманина Н.В. (ГОИ им.С.И.Вавилова, С.-Петербург)  
проф. Козик В.В. (ТГУ, Томск)  
чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Корнышев А. (Имперский колледж, Великобритания)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Лу Т. (Тяньцзиньский Технологический Университет, Китай)  
проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Мартянов О.Н. (ИК СО РАН, Новосибирск)  
чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)  
проф. Носков С. (Университет Калгари, Канада)  
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Родникова М.Н. (ИОНХ РАН, Москва)  
д.х.н. Румянцев Е.В. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Сафонова Л.П., (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Смирнова Н.А. (СПбГУ, С.-Петербург)  
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)  
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)  
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)  
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)  
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Щерблыкин И. (Университет г. Лунд, Швеция)

**ХIII Международная научная конференция  
«Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах»**

**Программный комитет**

**Председатель:** д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)  
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)  
проф. Дуров В.А. (МГУ, Москва)  
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Сафонова Л.П. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)  
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)  
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

**Х Международная научная конференция  
«Кинетика и механизм кристаллизации.  
Кристаллизация и материалы нового поколения»**

**Программный комитет**

**Председатель:** чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)  
проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С-Петербург)  
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)  
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)  
проф. Мурашкевич А.Н. (БГТУ, Минск)  
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Усольцева Н. В. (ИвГУ, Иваново)  
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)  
проф. Шилова О.А. (ИХС РАН, С.-Петербург)

**Международный симпозиум «Умные материалы»**

**Программный комитет**

**Председатель:** проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Антина Е.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)  
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)  
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Антлантики, Франция)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)  
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)

**ЛОКАЛЬНЫЙ ОРГКОМИТЕТ**

Голубев В.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Дмитриева О.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)  
Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Каликин Н.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
Кручинин С.Е. (ИХР РАН, Иваново)  
Куликова Л.Б. (ИХР РАН, Иваново)  
Куликова О.М. (ИХР РАН, Иваново)

Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Носков А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Потемкина О.И. (ИХР РАН, Иваново)  
Пуховский Ю.П. (ИХР РАН, Иваново)  
Родионова А.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
Трусова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Юров М.Ю. (ИХР РАН, Иваново)

неводных растворителях. Вместе с тем знание надмолекулярной структуры необходимо для интерпретации и построения моделей расчета и прогнозирования различных термодинамических свойств растворов. В частности растворимости, данные по которой необходимы при проектировании процессов разделения и экстракции.

В настоящей работе проведено исследование влияния структуры молекулы растворенного вещества (метилксантинов) на его молекулярную ассоциацию в неводных смесях инертный компонент (тетрахлорметан) – активный компонент (метанол) методами  $^1\text{H}$  ЯМР и ЯМР с импульсным градиентом магнитного поля. Данные смеси характеризуются большими отклонениями от идеальности, определяемыми высокой степенью самоассоциации одного из компонентов раствора – метанола [2]. Химические сдвиги и коэффициенты самодиффузии в данной работе были получены на спектрометре ЯМР Bruker Avance III 500 при использовании импульсной программы *dsteqr3s*. Измерения были выполнены во всем концентрационном интервале бинарного растворителя метанол-d4 – тетрагидрофуран при температурах 298, 303 и 313 К. Согласно полученным данным концентрационная зависимость коэффициентов самодиффузии метилксантинов имеет минимум в области 0.2 мольной доли метанола. Величина коэффициентов самодиффузии для теofilлина и теобромона одинаковая и меньше соответствующей величины для кофеина. Рассчитанный по уравнению Стокса-Эйнштейна эффективный гидродинамический радиус теofilлина и теобромона больше эффективного гидродинамического радиуса кофеина, несмотря на противоположную зависимость массы и характеристических размеров. В тоже время данные по химическим сдвигам указывают на изменение степени молекулярной ассоциации метилксантинов при увеличении концентрации метанола. Согласно полученным результатам, степень молекулярной ассоциации теofilлина и теобромона больше по сравнению с кофеином.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-03-00255-А

1. L. Tavagnacco, U. Schnupf, P.E. Mason, et al. *J. Phys. Chem. B*, 2011, **115**, 10957-10966.
2. V.A. Golubev, R.S. Kumeev, D.L. Gurina, et al. *J. Mol. Liq.*, 2017, **241**, 922-925.

### СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АНТИОКСИДАНТНОГО ОКРУЖЕНИЯ SN-ПОРФИРИНА НА ЕГО ФЛЮОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

Лазовский Д.А.<sup>1</sup>, Мальцева О.В.<sup>2</sup>, Ходов И.А.<sup>2,3</sup>, Мамардашвили Г.М.<sup>2</sup>

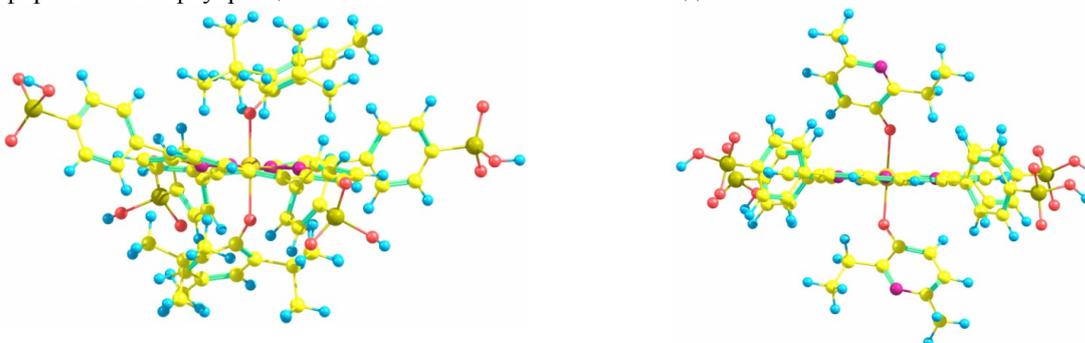
<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное учреждение Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

<sup>3</sup>ФГАОУ ВПО Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия  
gmt@isc-ras.ru

Сегодня ФДТ – это широко используемый метод в лечении злокачественных опухолей различной локализации. Достоинством метода является возможность сочетания в одной процедуре лечения и флюоресцентной диагностики (ФД) при использовании ряда фотосенсибилизаторов, способных флюоресцировать.

Целью настоящей работы было получение диаксиальных комплексов Sn(IV)-тетра(4-сульфофенил)порфирина с антиоксидантами и исследование влияния антиоксидантного окружения Sn-порфирина на его флюоресцентные свойства и квантовый выход.



Синтезированы и идентифицированы с помощью  $^1\text{H}$  ЯМР спектроскопии диаксиальные комплексы с метоксидолом и ионолом. О связывании молекул антиоксидантов Sn-порфиринатами свидетельствуют характерные сдвиги протонов порфирината и антиоксиданта в составе комплексов в область сильного поля.

Спектры флуоресценции были получены в среде фосфатного буфера (рН=7,4), был рассчитан квантовый выход по стандарту (стандарт – безметалльный порфириновый лиганд). Для подтверждения флуоресцентных свойств привлечены методы квантово-химического моделирования. Методом DFT/B3LYP оптимизированы структуры полученных комплексов, проведен анализ молекулярных орбиталей оптимизированных структур. На основе данного анализа объяснены различия в квантовом выходе комплексов.

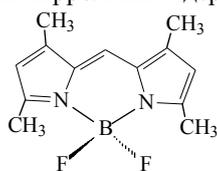
Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 18-03-00048-а с привлечением оборудования центра коллективного пользования "Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований".

## ВЛИЯНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ АЛКИЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ВODIPY-ЛЮМИНОФОРОВ

Калягин А.А., Антига Е.В., Антига Л.А., Березин М.Б.

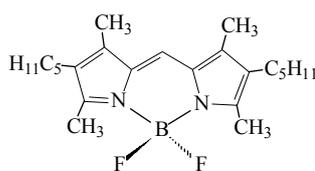
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия  
gasel.93@mail.ru

Среди многочисленных классов органических люминофоров дипирриновые комплексы получили признание как одни из наиболее универсальных красителей и флуорофоров. Дипиррометенаты состава  $[BF_2L]$  и  $[ML_2]$  обладают интенсивным поглощением в видимой области спектра, высокой фото- и термостабильностью, легко регулируемые характеристиками люминесценции. Цель работы заключалась в синтезе и сравнительном анализе спектрально-люминесцентных свойств в растворах органических растворителей новых комплексов бора(III)  $[BF_2L]$  (**1-3**) и комплексов цинка(II)  $[ZnL_2]$  (**4-6**) с различным типом алкильного замещения проксимальных  $\beta$ -позиций пиррольных ядер лигандов.



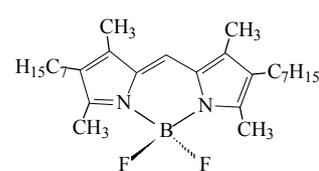
**1**

1,3,5,7-тетраметил-дипиррометен  
дифторборат



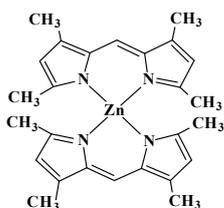
**2**

1,3,5,7-тетраметил-2,6-дипентил  
дипиррин дифторборат



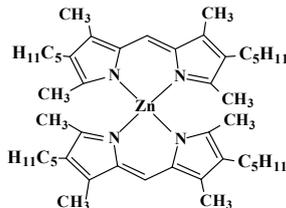
**3**

1,3,5,7-тетраметил-2,6-дипентил-  
дипиррин дифторборат



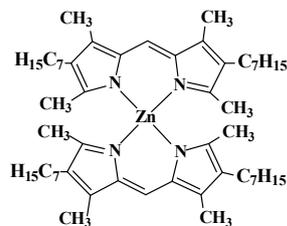
**4**

Zn (3,3',5,5'-тетраметил-2,2'-дипирро-  
лиметен)



**5**

Zn (3,3',5,5'-тетраметил-4,4'-диамил –  
2,2'-дипирролиметен)



**6**

Zn (3,3',5,5'-тетраметил-4,4'-дипентил-  
2,2'-дипирролиметен)

Максимум интенсивной полосы в ЭСП комплексов **1-6** интенсивно ( $\lg \epsilon = 4.78-4.90$ ) в растворах в циклогексане, гептане, толуоле, пропанол-1 и ДМФА располагается в диапазоне 486-537 нм и смещается bathochromно при алкилировании  $\beta$ -позиций. Наиболее интенсивную флуоресценцию с квантовым выходом от 66 до 99% дают  $[BF_2L]$ . Квантовый выход флуоресценции  $[ZnL_2]$  значительно ниже ~ от 0,1 до 14 %, причем,  $\beta$ -алкилирование увеличивает его (в 2 – 7 раз) для комплексов **5, 6** по сравнению с незамещенным аналогом **4**. Показатели флуоресценции VODIPY **1-3**, как и для большинства их аналогов, мало чувствительны как к особенностям алкилирования, так и к свойствам растворителя: в изученных растворителях квантовый выход флуоресценции ( $\phi$ ) изменяется незакономерно и менее, чем в 1.3 раза. При переносе **4-6** из полярных в неполярные среды наблюдается резкое разгорание флуоресценции:  $\phi$  увеличивается в ~50 - 100 раз, что позволяет рекомендовать эти красители к использованию в качестве флуоресцентных сенсоров полярности среды. В докладе обсуждаются результаты сравнительного анализа термостабильности хелатов в окислительной и инертной атмосферах и в полимерных пленках на основе ПММА.