



**ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ
И «УМНЫЕ» НАНОМАТЕРИАЛЫ
(XI Чистяковские чтения)**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**

20–21 мая 2025 г.

Иваново, Россия

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный университет»
НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ
Межвузовский научно-образовательный консорциум «Иваново»
Межвузовский научно-образовательный консорциум «Жидкие кристаллы»
Научно-исследовательский институт наноматериалов ИвГУ

**ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ
И «УМНЫЕ» НАНОМАТЕРИАЛЫ
(XI Чистяковские чтения)**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**

Россия, Иваново, 20–21 мая 2025 г.

Иваново
Издательство «Ивановский государственный университет»
2025

УДК 532.783
ББК 22.371.23.5
Ж69

Жидкие кристаллы и «умные» наноматериалы (XI Чистяковские чтения) : сборник тезисов докладов Всероссийской научной конференции с международным участием. Россия, Иваново, 20–21 мая 2025. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2025. – 74 с.
ISBN 978-5-7807-1492-7

В сборник включены тезисы докладов участников Всероссийской научной конференции с международным участием «Жидкие кристаллы и “умные” наноматериалы» (XI Чистяковские чтения), проводившейся в Ивановском государственном университете в г. Иваново 20–21 мая 2025 года. Материалы конференции посвящены работам в области получения, исследования и практического использования жидких кристаллов и наноматериалов.

Издание адресовано студентам, аспирантам, исследователям, работающим в этих областях, а также преподавателям соответствующих разделов физики и химии.

Ответственные за выпуск:

д-р хим. наук, проф. **Н.В. Усольцева**
канд. физ.-мат. наук **А.И. Смирнова**
мл. науч. сотр. **К.С. Никитин**

ISBN 978-5-7807-1492-7

© ФГБОУ ВО «Ивановский
государственный университет», 2025

ПРЕДИСЛОВИЕ

20–21 мая 2025 г. в Ивановском государственном университете состоялась Всероссийская научная конференция «Жидкие кристаллы и «умные» наноматериалы (XI Чистяковские чтения), организованная по инициативе НИИ наноматериалов совместно с участниками НОК «Жидкие кристаллы».

Уже в одиннадцатый раз, начиная с 1989 года, когда отмечалось 60-летие со дня рождения профессора, доктора физико-математических наук Игоря Григорьевича Чистякова, ученые, преподаватели, аспиранты и студенты собрались, чтобы поделиться успехами в синтезе, изучении структуры, свойств и в практическом применении жидких кристаллов и наноматериалов. Это знак глубокого уважения памяти И.Г. Чистякова как ученого, который своими исследованиями дал импульс для возрождения изучения жидких кристаллов в СССР в период после Великой Отечественной Войны. Его фундаментальные исследования структуры и свойств жидких кристаллов не потеряли своего значения до наших дней и признаны во всем мире. Наряду с исследовательской работой, проф. И.Г. Чистяков вел большую научно-организационную работу: в 1964 году создал в Ивановском государственном педагогическом институте первую в СССР Лабораторию жидких кристаллов и высокомолекулярных соединений, а в 1970 году, по приглашению директора Института Кристаллографии АН СССР акад. А.В. Шубникова, создал в этом институте Лабораторию жидких кристаллов. Проф. И.Г. Чистяков был организатором четырех проведенных в Иванове Всесоюзных конференций по жидким кристаллам, создал научную школу, издал первую в СССР монографию «Жидкие кристаллы» (1966 г.), которая стала настольной книгой всех ученых и инженеров, интересующихся этой областью знаний.

Очередные XI Чистяковские чтения открыла приветственным словом проректор по исследовательской и проектной работе ИвГУ И.Н. Смирнова. Она отметила вклад ученых Иванова, в частности ИвГУ, в развитие научного направления «Жидкие кристаллы и «умные» наноматериалы», их значительную научно-организационную работу, связанную с проведением V-ой Всесоюзной конференции по жидким кристаллам, семи Всероссийских конференций с международным участием по лиотропным жидким кристаллам, одиннадцати Всероссийских Чистяковских чтений и Первой (и пока единственной) Всероссийской конференции по жидким кристаллам (2012 г.). Настоящей платформой для развития жидкокристаллической науки и практики стал издаваемый в ИвГУ журнал «Жидкие кристаллы и их практическое использование». Инна Николаевна обратила внимание на широкую географию участников и авторов докладов проходящей Конференции: от Калининграда до Хабаровска.

Подводя итог Конференции, следует отметить, что было представлено 15 пленарных, 23 секционных устных и 14 стендовых докладов учеными ведущих научных центров России (Москвы, С-Петербурга, Калининграда, Казани, Саратова (в соавторстве с учеными из Ирака), Черноголовки, Перми, Новосибирска, Хабаровска, Йошкар-Олы) и Беларуси (Минск).

Лучшие секционные и стендовые доклады были отмечены Оргкомитетом дипломами. Впервые в истории Чистяковских чтений были введены особые номинации: дипломом в номинации «Первые шаги в науку» была отмечена школьница МБОУ СШ № 4 Манукян А.С. (научный руководитель доц. Кустова Т.В., ИГХТУ), дипломом в номинации «За практическое применение научной разработки», были отмечены Сорокина А.С., Бумагина Н.А. и Антипа Е.В. (ИвГУ, ИХР РАН). Эту номинацию предложил ввести проф. Б.М. Болотин, директор по науке и развитию Фирмы «ОЛБО».

Все заседания Конференции шли без параллельных секций и сопровождалось вопросами и дискуссиями. Очень отрадно, что к работе Конференции дистанционно подключились 19 слушателей.

Председатель Оргкомитета конференции, д-р хим. наук, проф. Н.В. Усольцева

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

ИННОВАЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ЛЮМИНОФОРОВ: СОВРЕМЕННЫЕ СТРАТЕГИИ ПОЛУЧЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ

Термин «люминесценция» описывает все явления нетеплового излучения частицами вещества в УФ, видимой и ИК-областях спектра, возникающее при переходе их из возбужденного состояния в основное. Основное внимание в докладе будет уделено «фотolumинесценции», включающей явления флуоресценции и фосфоресценции, которая возникает при воздействии света на люминофор, а также достижениям в области флуоресцентных спектроскопии и конфокальной микроскопии.

В повседневной жизни фотolumинесценция окружает нас повсюду, как в живой природе, так и в современных технологиях, хотя мы зачастую не замечаем ее проявления. Например, в зеленых листьях растений содержится хлорофилл, который флуоресцирует красным светом. Многие живые организмы морей и океанов наделены способностью к биolumинесценции за счет флуоресцирующих белков (красные водоросли и бактерии). Исследуя явление биolumинесценции у живых организмов, ученые научились использовать природные и создавать синтетические люминофоры для применения в быту, во многих отраслях техники и электроники и, что особенно важно, в биомедицине.

В докладе будет представлен обзор современных исследований, направленных на дизайн органических люминофоров и материалов на их основе с фотофизическими характеристиками, улучшенными под различные практические задачи в области оптоэлектроники (перестраиваемые лазеры, органические светодиоды и другие устройства обработки и отображения информации, солнечные ячейки) и биомедицины (диагностика и терапия различных заболеваний, в том числе фотодинамическая терапия), а также криминалистики, сенсорики и т.д.

К настоящему времени разработана фундаментальная база в области направленного синтеза люминофоров различной природы, исследования их фотофизических и фотохимических характеристик, оценен потенциал их практического применения. Однако, при попытке переноса практически привлекательных свойств полученных органических люминофоров на практику, ученые сталкиваются с рядом глобальных проблем, вызванных гидрофобностью большинства люминесцентных красителей, склонностью их молекул к агрегации, а также с явлениями перепоглощения света в концентрированных средах и твердом состоянии. В связи с этим, в настоящее время усилия ученых направлены на разработку материалов/композитов на основе люминофоров и носителей различной природы: природных и синтетических полимеров, в том числе металлоорганических координационных полимеров, амфифильных блок-сополимеров, наночастиц металлов и углерода, мицелл различных поверхностно-активных веществ, в составе которых люминофоры сохраняют свои практически значимые характеристики. Несомненный интерес представляют многокомпонентные мультифункциональные композиты, включающие несколько типов лекарственных и люминесцентных активных соединений. Комплекс уникальных свойств таких люминесцентных материалов открывает новые возможности для создания более эффективных технологий, незаменимых в современных реалиях.

В.С. БЕЗБОРОДОВ¹, С.Г. МИХАЛЁНОК¹, Н.М. КУЗЬМЕНОК¹, В.И. ЛАПАНИК²¹Белорусский государственный технологический университет, Минск, Беларусь²НИИ прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко, Минск, Беларусь

ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ И АНИЗОТРОПНЫЕ МАТЕРИАЛЫ. ПОДХОДЫ РАЗВИТИЯ И РАЗНООБРАЗИЕ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Развитие многих областей современной науки и техники связано с все более широким внедрением разнообразных функциональных материалов, склонных к самоорганизации и упорядочению. Учитывая, что фундаментальный фактор анизотропии сыграл ключевую и определяющую роль в возникновении жизни на Земле, мы предлагаем при разработке новых материалов одновременно с условиями их получения учитывать специфику строения органических молекул, обуславливающую упорядоченность реакционной среды, региоселективность протекания реакций и образования комплементарных структур (супрамолекулярная химия). Несомненно, управление процессами самоорганизации является важнейшей задачей на пути к созданию новых функциональных материалов с заданными физико-химическими свойствами и разработке разнообразных устройств на их основе.

Одним из перспективных вариантов формирования и варьирования самоорганизующихся систем, по нашему мнению, является сочетание разнообразных органических, неорганических веществ, включая коллоидные и наноразмерные, с термотропными или лиотропными жидкими кристаллами (ЖК), анизотропными соединениями, которые будут определять и влиять на процессы самоорганизации и упорядоченности сред и систем. При этом, несмотря на обилие публикаций и рост активности исследований, связанных с жидкими кристаллами и разработкой новых поколений функциональных материалов [1], по-прежнему актуальной является разработка методов синтеза анизотропных (жидкокристаллических) соединений, модификация которых позволит целенаправленно получать соответствующие продукты с желаемой комбинацией алкильных, циклических, мостиковых фрагментов, функциональных, полярных групп в центральной и терминальных частях молекул.

Имея более чем 50 летний опыт исследований различных типов жидкокристаллических материалов, мы разработали оригинальную методологию создания не только ЖК материалов для всех типов электрооптических устройств отображения информации, но новых анизотропных материалов и устройств с более широким спектром практического использования. Оригинальный подход основан на использовании полифункциональных анизотропных соединений, таких как 3,6-дизамещенные циклогекс-2-еноны, 3,5-дизамещенные 2-изоксазолины, 5-замещенные циклогексан-1,3-дионы, 1,2-дизамещенные циклопропанолы и непредельные эпоксикетоны [2]. Очевидно, что модификация этих и подобных им интермедиатов открывает совершенно новые междисциплинарные направления разработки и создания уникальных материалов, которые тесно связаны с другими областями исследований, такими как фундаментальная физика, топология, оптика и фотоника, нанотехнологии, биомедицинские приложения, включая не только биосенсорику, тканевую инженерию, но и, конечно, доставку лекарств.

Предлагаемая методология имеет ряд достоинств и с успехом может быть использована для создания новых поколений материалов, не уступающих по свойствам природным.

[1] J. Uchida, B. Soberats, M. Gupta, T. Kato. Advanced Functional Liquid Crystals. *Adv. Mater.*, 2022, **34**(23), 2109063. DOI:10.1002/adma.202109063

[2] В.С. Безбородов, С.Г. Михалёнок, Н.М. Кузьменок, В.И. Лапаник Г.М. Сосновский. *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2014, **14**(4), 59–73.

ОБ ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ЖИДКИМ КРИСТАЛЛАМ НА МЕЖДУНАРОДНОЙ КОСМИЧЕСКОЙ СТАНЦИИ (МКС)

В докладе будет идти речь об экспериментах по жидким кристаллам на Международной космической станции (МКС) – Observation and Analysis of Smectic Islands in Space, OASIS (Наблюдение и анализ смектических островов в космосе). Эксперименты были инициированы учёными из University of Colorado Boulder (США) и одобрены НАСА. На различных стадиях в работе принимали участие также учёные из Германии (Университет Отто фон Герике, Магдебург) и России (ИФТТ РАН, Черноголовка). Установка для проведения экспериментов на МКС была изготовлена американской группой, доставлена на МКС и располагалась в американском секторе МКС. Техническое сопровождение экспериментов проводилось американскими астронавтами и российскими космонавтами. Экспериментальные данные с МКС в реальном времени транслировались в Университет Колорадо, в Университет Отто фон Герике и в ИФТТ РАН. Российская группа была приглашена, поскольку она имела опыт исследований и публикации по полярным и неполярным смектическим наноплёнкам, самоорганизации в жидких кристаллах и другим направлениям предполагаемых исследований на МКС. Американские и немецкие учёные проводили предварительные эксперименты в земных условиях, в том числе при кратковременной невесомости, создаваемой при параболических полётах на самолёте Airbus A300 Zero G, при полётах суборбитальных ракет TEXUS, анализировали полученные на МКС результаты. Вклад российских учёных состоял в проведении наземных экспериментов, анализе получаемых на МКС результатов.

Насколько нам известно, это первые эксперименты на жидких кристаллах в условиях микрогравитации на МКС. Проведённые исследования охватывали широкий круг вопросов, существенно более широкий, чем об этом можно было бы судить по названию проекта. Использовались вещества со SmA, SmC, SmC* фазами. Приготавливались наноплёнки толщиной от нескольких до сотен молекулярных слоёв, в том числе плёнки с различными включениями (острова, дырки, капли изотропной жидкости). Изучалась структура и динамика отдельных включений и упорядоченных структур, образующихся в наноплёнках, Оствальдовская перекомденсация, термокапиллярные явления, самоорганизация, коалесценция, динамика огрубления островов и дырок.

Результаты, связанные с экспериментами на МКС, частично опубликованы и докладывались на международных конференциях и собрании Американского Физического Общества.

The OASIS experiment at the ISS was performed by the initiative of the group of University of Colorado Boulder and supported by NASA Grant NNX-13AQ81G. Российские участники выражают благодарность ЦНИИМаши за поддержку, их работа проводилась также в рамках Государственного задания ИФТТ РАН.

[1] P.V. Dolganov, N.S. Shuravin, V.K. Dolganov, E.I. Kats, R. Stannarius, K. Harth, T. Trittel, C. S. Park, J. E. MacLennan, *Scientific Reports*, 2021, **11**, 19144. DOI: 10.1038/s41598-021-98166-7

[2] P. Dolganov, N. Shuravin, V. Dolganov, C. Park, E. Minor, J. MacLennan, M. Glaser, N. Clark, C. Klopp, T. Trittel, R. Stannarius, *American Physical Society March Meeting* 2018; March 5–9, 2018; Los Angeles, California. Abstract: Y53.0000

[3] P.V. Dolganov, N.S. Shuravin, V.K. Dolganov, C.S. Park, J.E. MacLennan, M.A. Glaser, and N.A. Clark, *27th International Liquid Crystal Conference (ILCC2018)*, Kyoto, Japan, 22-27.07.2018.

[4] П.В. Долганов, Третья международная конференция, посвященная 25-летию Международной космической станции «Наука на МКС», Москва, 20–23 ноября 2023 г. *Сборник тезисов*, с. 93–96.

УДК 544

Е.И. КАЦ

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия

ЭФФЕКТЫ НЕ-НЬЮТОНОВСКОЙ РЕОЛОГИИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

В 1-й части доклада будет приведено описание возможных типов не-Ньютоновского течения вязкоупругих материалов. Большинство систем, изучаемых физикой мягкой материи (в частности, жидкие кристаллы), в определенных условиях демонстрируют не-Ньютоновское поведение. В качестве иллюстрации, во 2-й части доклада будет изучено сдвиговое течение так называемых twist-bend нематических жидких кристаллов.

Н.Ж. МАМАРДАШВИЛИ

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

**РАЗРАБОТКА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ
МАТЕРИАЛОВ ПУТЕМ НАПРАВЛЕННОГО ДИЗАЙНА
ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

Наноструктурированные фоточувствительные материалы на основе тетрапиррольных макрогетероциклических соединений представляют собой высокоорганизованные системы, состоящие из органических лигандов и металлических центров, действующих как строительные блоки или тектоны. Упорядочение компонентов в трех измерениях, возможность использования тектонов различной природы и размера, а также динамические свойства супрамолекулярных ансамблей придают им уникальные люминесцентные, нелинейно-оптические, окислительно-восстановительные, магнитные, сорбционные, каталитические, ионообменные, сенсорные и др. свойства. Благодаря своей структуре и уникальным физико-химическим и фотофизическим характеристикам, в частности их фотоактивности, оптоэлектронным и электрохимическим свойствам, молекулы тетрапиррольных соединений являются чрезвычайно перспективными объектами для создания гибридных наноматериалов широкого спектра действия. Известно, что металлокомплексы указанных соединений способны к селективному обратимому связыванию молекул субстрата и, таким образом, могут быть использованы для построения простых и сложных супрамолекулярных систем различных размеров и архитектуры.

В докладе будут рассмотрены основные принципы создания гибридных наноструктурированных фоточувствительных материалов за счет процессов хелатообразования центров связывания диаксиальных комплексов порфиринов с катионами металлов различной природы. Аксиальные комплексы порфиринов будут использоваться как тектоны, координирующиеся через катионы металлов. Важное внимание в докладе будет уделено вопросам иммобилизации макроцикла в мицеллы ионных ПАВ и возможности использования мицеллообразования в качестве эффективного средства целенаправленного изменения их спектрально-люминесцентных свойств, рецепторной способности и фотосенсибилизационной активности. Особое внимание будет уделено получению композитных пленок, содержащих комплексы порфиринов и неполярных полимеров (полиэтилен, полипропилен и др.), выяснению влияния природы полимера и способа получения пленок на свойства создаваемых функциональных материалов. Будет рассмотрено влияние уровня термодинамического сродства и предельной растворимости макроцикла в полимере на межмолекулярные взаимодействия полимер - макроцикл. Будут показаны зависимости влияния структуры матрицы и порфирин-содержащих систем на характер сенсорного отклика материала. Полученные результаты будут востребованы при создании материалов с эффективными характеристиками трансформации фотовозбуждения для последующего их тестирования в оптоэлектронике и биомедицинских экспериментах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Института химии растворов им. Г.А. Крестова РАН (№ 122040500043-7) с использованием оборудования центра коллективного пользования «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований».

К.С. НИКИТИН^{1,2}, О.В. МАЛЬЦЕВА¹, Н.Ж. МАМАРДАШВИЛИ¹, А.И. СМИРНОВА²,
Н.В. УСОЛЬЦЕВА²

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ ПЛАВАЮЩИХ СЛОЕВ ПОРФИРИНОВ И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ИХ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-ШЕФФЕРА

История изучения надмолекулярной самоорганизации на поверхности раздела воздух/вода амфифильных соединений уходит корнями в начало XX века, когда были подробно исследованы классические амфифилы, включая жирные спирты, кислоты, а также различные белки и другие [1]. Однако стремительное развитие микро- и наноэлектроники, а также сенсорных технологий в последние десятилетия создало потребность в новых тонкопленочных материалах, основанных на неклассических амфифилах – порфиринах, фталоцианинах, субфталоцианинах и других макрогетероциклических соединениях.

Данное исследование было направлено на определение взаимосвязи между химическим строением различных порфиринов и их способностью к самоорганизации на границе раздела воздух/вода, а также на изучение их сенсорных свойств в пленках Ленгмюра-Шеффера (ЛШ-пленка). В работе исследовались четыре порфирина: 5,10,15,20-тетрафенилпорфирин (порфирин **I**), 2-аза-21-карба-5,10,15,20-тетрафенилпорфирин (порфирин **II**), 5,15-дифенилпорфирин (порфирин **III**) и 5,15-ди(2,6-ди(додецилокси)фенил)порфирин (порфирин **IV**).

Формирование плавающих слоев и ЛШ-пленок исследуемых порфиринов было проведено по методике, описанной в [2]. Сенсорные свойства полученных ЛШ-пленок изучались при воздействии различных аналитов как в газовой фазе (CF₃COOH, HCl, HBr), так и в жидкой среде (соли третбутиламмония и додецилсульфат натрия) с использованием спектрофотометра Cary-300.

В ходе исследования было установлено, что все изученные порфирины проявляют склонность к агрегации еще до начала процесса сжатия их плавающих слоев. При переносе слоев на твердые подложки наблюдалось формирование ЛШ-пленок содержащих как агрегаты, так и крупные трехмерные кристаллические структуры с четко выраженными гранями.

Особый интерес представляют результаты исследования сенсорных свойств тонкопленочных материалов. При взаимодействии с парами кислот ЛШ-пленки порфиринов **I-IV** демонстрировали характерные спектральные изменения, проявляющиеся в индивидуальном положении полосы Core. Однако только порфирин **IV** показал селективность при одновременном присутствии нескольких аналитов, в то время как остальные соединения такой избирательностью не обладали. При изучении сенсорных свойств в жидкой среде дипротонированные формы порфиринов **I** и **II** продемонстрировали отклик на все исследованные галогенид-ионы, тогда как порфирины **III** и **IV** – только на присутствие хлорид-ионов.

Полученные данные существенно расширяют понимание взаимосвязи между молекулярной структурой порфиринов и их функциональными свойствами в тонкопленочных образцах, что имеет важное значение для создания новых материалов для сенсорных устройств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственных заданий ИХР РАН (№ 122040500043-7) и НИИ наноматериалов ИвГУ (№ FZZM-2023-0009) с привлечением оборудования Верхневолжского регионального центра физико-химических исследований.

[1] Т.Т. Ву, Ч.Д. Льюнг, Д.К. Нгуен, В.-Т. Ле, Т.Т.Т. Буй, Д.Д. Чан, Т.Х. Хоанг, З.М. Ву, Д.Б. Березин, *Изв. вузов. Химия и хим. Технология*, 2025, **68** (2), 6–45. DOI: 10.6060/ivkkt.20256802.7002

[2] O.V. Maltceva, K.S. Nikitin, A.V. Kazak, N.Zh. Mamardashvili, N.V. Usol'tseva, *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2023, **23** (2), 29–37. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.2.29

С.П. ПАЛТО, А.Р. ГЕЙВАНДОВ, И.В. КАСЬЯНОВА, Д.О. РЫБАКОВ, И.В. СИМДЯНКИН,
Б.А. УМАНСКИЙ, Н.М. ШТЫКОВ

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ Курчатовский институт

ЭЛЕКТРО-ИНДУЦИРОВАННЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ФОТОННЫЕ СТРУКТУРЫ

Обсуждаются структуры с индуцированной электрическим полем пространственной модуляцией показателя преломления в плоскости слоя жидкого кристалла (ЖК) [1]. В таких структурах для света, распространяющегося в плоскости слоя в волноводном режиме, в оптическом спектре возникают характерные для фотонных кристаллов стоп-зоны. Рассматриваются индуцированные структуры двух типов.

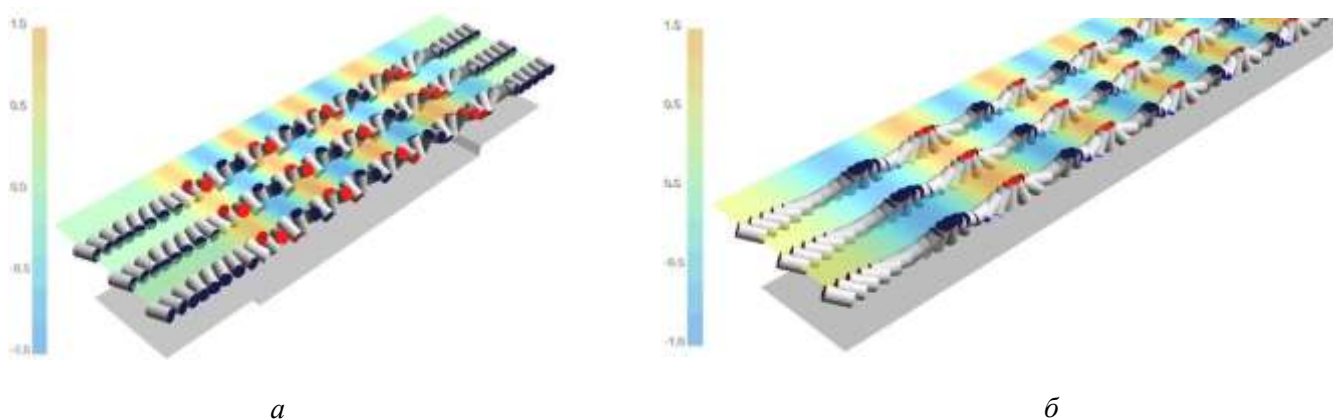


Рисунок 1 – (а) Ориентационный переход в состояние с «лежачей» спиралью в системе с планарными электродами; (б) пространственно-модулированная флексоэлектрическая ЖК-структура

Первый тип возникает в холестерических жидких кристаллах (ХЖК). Хорошо известно, что при планарных граничных условиях в слоях ХЖК возникает спиральное распределение директора с осью вдоль нормали к слою. Такие структуры однородны в плоскости слоя. Однако, как показано в наших работах, при определенных условиях в электрическом поле возникает ориентационный переход в состояние с лежачей спиралью – с осью в плоскости слоя, рис. 1, *а*. Именно структуры с лежачей спиралью представляют интерес для многих фотонных приложений, включая лазерную генерацию.

Второй тип структур характерен для слоев нехиральных нематических ЖК с малой величиной диэлектрической анизотропии, где модуляция показателя преломления в плоскости слоя возникает благодаря взаимодействию электрического поля с флексоэлектрической поляризацией, рис. 1, *б*.

В обоих случаях для возникновения электро-индуцированных переходов и наличия особых фотонных свойств принципиально важными являются периодические граничные условия для ориентации ЖК и распределение электрического поля. В докладе обсуждаются как методы формирования граничных условий, так и фотонные свойства получаемых структур. Исследования выполнены с использованием численного моделирования и экспериментальных методов. Рассматриваются особенности в оптических спектрах пропускания и эффект лазерной генерации.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатовский институт”.

[1] S.P. Palto, A.R. Geivandov, I.V. Kasyanova, D.O. Rybakov, I.V. Simdyankin, B.A. Umanskii, N.M. Shtykov. *Crystallography Reports*. 2024, **69**(2), 139–150. DOI: 10.1134/S1063774524600157.

С.В. САВИЛОВ^{1,2}, С.В. ЯКОВЛЕВ², Е.В. СУСЛОВА¹¹Химический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия

ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ КОММЕРЦИАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Развитие современного общества невозможно без научно-технического прогресса, т.е. без непрерывного совершенствования образцов техники и технологий, а также научных основ их создания. Все это должно сопровождаться их внедрением в производство и различные сферы жизни населения, что должно приводить к повышению качества жизни. В современное время мы наблюдаем это воочию: развитие портативных устройств, сочетающих в себе телефон, музыкальный плеер, фото-и видеокамеру, запоминающее устройство, появление полимерных композиционных материалов, во многих отраслях, вытесняющих металлические конструкции, новые системы хранения и преобразования энергии, обработки и хранения данных. Это, во многих случаях, позволяет экономить ресурсы, выпускать принципиально новые виды продукции, повышать производительность труда рабочих, снижать стоимость товаров и услуг. Научно-технический прогресс требует постоянного совершенствования орудий труда, машин и механизмов, технологических процессов, что, в свою очередь, не может не оказать влияния на систему организации производства и управления и появление новых рынков сбыта. В основе всего этого – результат интеллектуальной деятельности, получаемый в ходе фундаментальных научных и прикладных исследований и последующей инновационной работы. Термин «инновация» введен Й. Шумпетером в первой половине 20 века. Сейчас он понимается как превращение научно-технического потенциала в реальные новые продукты и технологии.

В основе успеха этого процесса – наличие спроса, прежде всего, внутреннего. К сожалению, деструктивные процессы 90-х годов прошлого века привели к полной децентрализации и разрушению промышленности нашей страны. Ввиду этого, вновь актуальными стали слова Д.И. Менделеева почти полуторавековой давности: «Миллиарды рублей, шедшие за иностранные товары... кормили не свой народ, а чужие... Наука должна нацеливать на развитие производства, а не на спекуляцию...».

Предлагаемый доклад последовательно рассматривает процессы внедрения результатов научно – исследовательской деятельности вузов и научных организаций, передачи прав на них и связанных с ними материальных носителей коммерческим организациям для производства на их основе продукции, выполнения работ и оказания услуг с целью удовлетворения спроса на рынке и извлечения прибыли. Модели коммерциализации могут быть централизованными, децентрализованными или смешанными в зависимости от позиции руководства и ресурсного обеспечения. На различных примерах, прежде всего, выпуска композитов на основе углеродных наноструктур и полимерных материалов, в докладе рассматриваются уровни готовности технологий и методы их оценки, пути организации взаимодействия с коммерческими организациями, возможные меры государственной поддержки.

М.А. ШИЛОВ¹, Н.В. УСОЛЫЦЕВА²

¹Ивановский государственный энергетический университет, Иваново, Россия

²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

НАНОУГЛЕРОДНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ РЕОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК СМАЗОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Нанокуглеродные модификаторы представляют собой добавки на основе углеродных наноструктур – графена (2D), углеродных нанотрубок (1D) фуллеренов (0D) и других. В настоящее время они широко используются для улучшения реологических характеристик смазочных материалов, влияя на их вязкость, стабильность дисперсии и теплоотвод. Нанокуглеродные структуры, диспергированные в базовом смазочном материале, существенно влияют на ее микроструктуру. Благодаря их малым размерам (не более 100 нм) и высокой активной поверхности обеспечивается эффект «суперскольжения», который позволяет снизить коэффициент трения; устанавливается сильное межслоевое взаимодействие, улучшается теплоотвод посредством создания сетчатой структуры, которая способствует распределению тепла.

В работе представлены данные реологических характеристик дисперсий на масляной (ПСМ I-III) и водной основах (ПАВ1-ПАВ4) с углеродными наномодификаторами (0D-3D) структурами в диапазоне концентраций 0,1 – 1,5 мас. %. Диспергацию и гомогенизацию проводили с применением прибора УЗДН-2Т при частоте 44 кГц в течение 5 минут. Реологические испытания проводили разрушающим и неразрушающим методами на реометрах Reologica и Anton Paar Physica MCR 302 по схеме «плоскость-плоскость».

Доказано, что ключевую роль в реологических свойствах смазочных материалов, наряду с характеристиками загустителя, играют тип, ориентация и концентрация присадок углеродных наноструктур с высокой насыпной плотностью. Их применение позволило создать стабильные (с точки зрения тиксотропии) реологические жидкости при концентрации нанокуглеродной присадки 0,5 мас. %. Смазочные материалы обладают равновесным седиментационным отношением 98 %, а также расширенными рабочими диапазонами температур и скоростей сдвига при сохранении реологических характеристик.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2023-0009 для Ивановского государственного университета)

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

МИКРОФЛЮИДНЫЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И УГЛЕРОДНЫХ НАНОТОЧЕК: ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ КАНАЛА И ДИНАМИКИ СРЕДЫ

Жидкие кристаллы (ЖК) и их композиты с люминесцентными наночастицами представляют собой «умные» материалы, селективно реагирующие на комплекс физико-химических факторов. Микрофлюидные устройства открывают новые возможности регулирования свойств данных материалов за счет пристеночных и динамических эффектов в микроканалах различной геометрии [1, 2].

В данной работе изучены ориентационное поведение и оптические свойства композита лиотропного жидкого кристалла (ЛЖК) на основе додецилового эфира тетраэтиленгликоля и углеродных наноточек в микрофлюидных каналах шириной 100-200 мкм прямого и змеевидного профилей в диапазоне скоростей среды до 5 мм/с и температурах 25-60°C. Проведен сравнительный анализ ориентационного поведения и оптических свойств композита в микроканалах и «макроскопических» условиях. Ориентационное поведение ЛЖК изучено в сравнении с микрофлюидными средами на основе модельного термотропного нематического жидкого кристалла МББА (Рис. 1).

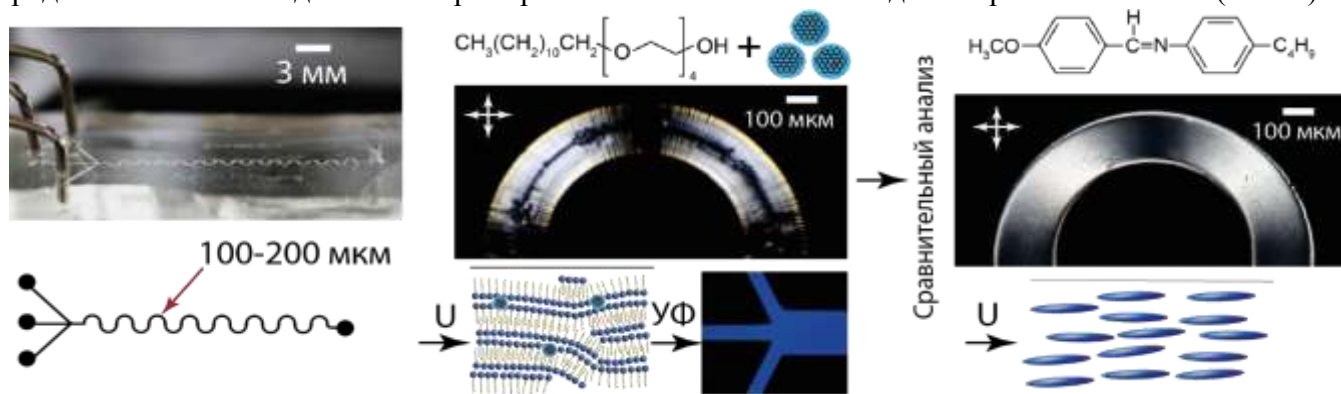


Рисунок 1 – Оптические свойства и ориентационное поведение микрофлюидных ЖК-систем

Выявлен дополнительный уровень организации молекул ЛЖК в микроканале с сохранением ламеллярной структуры: преимущественно гомеотропная и планарная ориентация в статических и динамических образцах, соответственно. Установлена аналогия между ориентационным поведением изученного ЛЖК и модельного нематического ЖК МББА в микроканалах. Смоделирована и экспериментально подтверждена возможность использования змеевидных каналов для определения ориентации молекул ЖК, направления и скорости потока мезофазы. Показано, что введение углеродных наноточек сопровождается сохранением текстуры ЛЖК-мезофазы в микроканале. Интенсивная люминесценция композита наблюдалась во всем изученном диапазоне скоростей потока.

Установленные эффекты ориентационного поведения ЛЖК-сред недоступны вне микрофлюидных каналов и открывают возможности создания multifunctional устройств типа «лаборатория-на-чипе» для управления надмолекулярной организацией ЛЖК с интегрированным нанотруктурными компонентами и решения задач молекулярной диагностики и биомедицины.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда № 25-23-00354.

[1] V. Ulaganathan, A. Sengupta, *J. Coll. Int. Sci.* 2023, **649**, 302-312. DOI: 10.1016/j.jcis.2023.06.010

[2] A.I. Galeeva, A.S. Krupin, A.N. Bezrukov, Y.G. Galyametdinov, *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2024, **24**(2), 32-42. DOI: 10.18083/LCAppl.2024.2.32

В.В. БУШКЕВИЧ, А.Ф. ЮСУБОВА, С.С. ХАРЛАМОВ, С.В. ПАСЕЧНИК, А.В. ДУБЦОВ
МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

ДИНАМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА НЕМАТИЧЕСКИЙ ЖИДКИЙ КРИСТАЛЛ – ВОДНЫЙ РАСТВОР ПОЛИМЕРА С АЗОБЕНЗОЛСОДЕРЖАЩИМ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫМ ВЕЩЕСТВОМ

В работе исследованы быстрые и медленные динамические процессы изменения ориентационной структуры нематических жидких кристаллов (НЖК) на границе раздела с водным раствором полимера, функционализированного азобензолсодержащим амфифильным веществом.

Экспериментальные образцы представляли собой плоские слои НЖК 5СВ, ограниченные ячейками сетки для просвечивающей электронной микроскопии (ТЕМ), размещенной на стеклянной подложке, предварительно покрытой полиимидом для получения гомеотропной поверхностной ориентации. На стеклянную подложку вокруг 5СВ-ТЕМ сетки крепился полый цилиндр из поливинилхлорида, позволяющий получить «колодец», на дне которого располагался образец исследования. «Колодец» с 5СВ-ТЕМ заполнялся водным раствором полиметакриловой кислоты (РМАО), функционализированной катионным сурфактантом (AzoC_6) на основе азобензола.

Наблюдение изменений ориентационной структуры нематика проводилось с помощью поляризационного микроскопа ВХ53 (Olympus), оборудованного видеокамерой DP28 (Olympus). Образец нематика, контактирующий с водным раствором AzoC_6 -РМАО подвергался облучению лазерным УФ/видимым излучением с длиной волны 405 нм/450 нм, вызывающем транс-цис/цис-транс изомеризацию AzoC_6 .

Заполнение «колодца» водным раствором AzoC_6 -РМАО приводило к мгновенному формированию темной оптической текстуры при скрещенных поляризаторах, которая сохранялась в условиях вращения столика микроскопа с экспериментальным образцом. Темная оптическая текстура свидетельствовала о формировании гомеотропной ориентации 5СВ на обеих границах раздела нематик–водный раствор и нематик–стекло, что обеспечивало однородное распределение директора нематика в слое ЖК за исключением областей, граничащих со стенками ТЕМ сетки.

В ходе микроскопического наблюдения за образцом было обнаружено быстрое кратковременное спонтанное просветление оптической текстуры длительностью до нескольких секунд, повторяющееся с течением времени в разных ячейках. Просветление имело пространственно-неоднородный характер и появлялось в области контакта ЖК и металлической ТЕМ сетки с последующим частичным охватом ячейки с ЖК, за которым следовал обратный процесс затемнения. Количество событий просветления уменьшалось с уменьшением концентрации AzoC_6 -РМАО в водном растворе.

УФ облучение 5СВ, контактирующего с водным раствором AzoC_6 -РМАО, приводило к медленной трансформации темной текстуры к светлой, что указывало на ориентационный переход от гомеотропной ориентации директора НЖК к планарной за счет транс-цис изомеризации AzoC_6 . При этом, УФ облучение подавляло быстрые кратковременные изменения поверхностной ориентации 5СВ на границе раздела нематик – водный раствор AzoC_6 -РМАО.

По результатам эксперимента выдвинуто предположение, что быстрые кратковременные процессы вызваны столкновением супрамолекулярных сборок AzoC_6 (везикул) с медной ТЕМ сеткой, контактирующей со слоем НЖК, при котором последующий распад везикул индуцирует поток Марангони, вовлекающий переориентацию нематика.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Грант № FSFZ-2023-0004).

М.С. ГРУЗДЕВ, У.В. ЧЕРВОНОВА, Н.Г. БИЧАН, А.А. КСЕНОФОНТОВ
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ГЕТЕРОЛЕПТИЧЕСКИЕ β -ДИКЕТОНАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ Eu (III), Ga (III), Fe (III)

Предложены и оптимизированы методики синтеза полифункциональных 1,3-дикетонов, представляющих собой системы с двумя центрами, определяющими перспективные свойства [1]. С одной стороны – хромофорный элемент (производные карбазола), с другой – мезогенный фрагмент (производные додецилоксибензойной кислоты), индуцирующий появление жидкокристаллического (ЖК) упорядочения (Рис. 1).



Рисунок 1 – Схематическое изображение и микрофотографии фазовых переходов β -дикетона

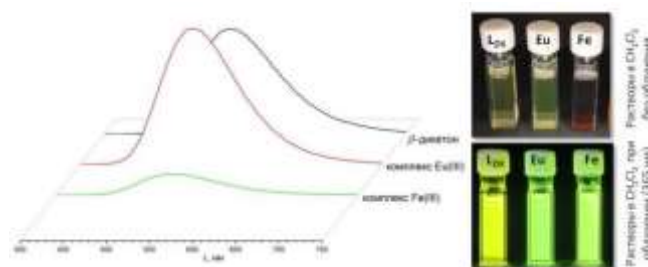


Рисунок 2 – Спектры флуоресценции β -дикетона и комплексов на его основе в растворе ДХМ; фото растворов при облучении ($\lambda = 365$ нм) и без него

Для получения комплексов на основе β -дикетонов в качестве солей металлов использовались хлориды Eu(III), Fe(III) и Ga(III). 2,2'-Бипиридин выступает солигандом, дополняющим координационную сферу. Азотсодержащие гетероциклы такого типа являются сильными бидентатными лигандами, у которых атомы N легко координируются с металлическим центром, образуя устойчивые комплексы.

Оптические свойства соединений изучены как для разбавленных растворов (рисунок 2), так и в твердом состоянии. В электронных спектрах поглощения растворов комплексов наблюдается две полосы, обусловленные электронными переходами π - π^* -типа хелатирующих β -дикетонатных и 2,2'-бипиридиновых лигандов. При длине волны возбуждения (λ_{exc}) 390 нм соединения обладают желто-зеленой флуоресценцией. Значения абсолютного квантового выхода достигают 60 % для β -дикетона и комплекса Eu на его основе. При этом обнаружено, что введение в систему ионов Fe^{3+} приводит к значительному тушению флуоресценции.

Введение иона металла оказывает существенное влияние и на фазовое поведение образцов. По данным поляризационной оптической микроскопии (ПОМ) для β -дикетона – 1-[4-(3,6-ди-*трет*-бутил-9Н-карбазол-9-ил)-фенил]-3-{[4-(4-додецилокси)бензоилокси]-фенил}-пропан-1,3-диона – при нагревании происходит плавление образца около 160 °С. Результаты наблюдения подтверждаются и данными ДСК. Сферолиты нематической фазы появляются при медленном охлаждении и стеклуются, оставаясь в таком состоянии даже при $T_{\text{комн}}$. Повторный нагрев приводит к ЖК упорядочению при 80-85 °С с последующей кристаллизацией (101 °С) и переходом в изотроп (167 °С). Для комплексов не обнаружено ЖК переходов ни в цикле нагрева, ни при охлаждении. При этом для комплекса Eu установлено высокотемпературное плавление ($T_{\text{пл}} = 249$ °С) в цикле нагрева и стеклование при охлаждении без кристаллизации. Отличительной особенностью комплекса с ионом Fe^{3+} является отсутствие фазовых переходов в температурном интервале 25-300 °С. Вещество полностью находится в аморфном состоянии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект №23-13-00015.

[1] U.V. Chervonova, N.G. Bichan, A.A. Ksenofontov, M.S. Gruzdev, *J. Mol. Liq.*, 2025, **417**, 126572. DOI: 10.1016/j.molliq.2024.126572

С.А. ДОГАДАЕВА, Л.А. АНТИНА, М.Б. БЕРЕЗИН, Е.В. АНТИНА
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ МЕТОДИКИ ПОЛУЧЕНИЯ BODIPY@ZIF-8 КОМПОЗИТОВ НА ИХ ТЕКСТУРНЫЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Цеолитоподобный имидазолятный каркас ZIF-8, построенный из тетраэдрически координированных кластеров Zn^{2+} и 2-метилимидазолатных линкеров обладает низкой цитотоксичностью, характеризуется высокими значениями удельной поверхности (900-1800 м²/г по БЭТ), большим объемом пор 0,6-0,8 см³/г и гибким диаметром микропор 11-12,6 Å, а также высокой стабильностью в нейтральной и щелочной средах и достаточно быстрым разрушением в кислой среде, что обуславливает его перспективность для разработки систем доставки лекарственных соединений и фотосенсибилизаторов (ФС). ZIF-8 достаточно просто получить в лабораторных условиях растворным или механохимическим способами при комнатной температуре и атмосферном давлении. Варьирование методики синтеза и природы растворителя оказывают значительное влияние на морфологию и размеры образующихся кристаллов ZIF-8, удельную поверхность и, в целом, на химические и физические свойства функциональных материалов, формируемых на их основе.

В связи с этим, цель исследования заключалась в сравнительном анализе влияния способа получения систем доставки гидрофобных бром-замещенных BODIPY фотосенсибилизаторов на основе ZIF-8 на структурные и физико-химические свойства BODIPY@ZIF-8 композитов. Исследуемые BODIPY ФС характеризуются интенсивными показателями поглощения света, флуоресценции и генерации синглетного кислорода, что позволяет рекомендовать их в качестве потенциальных агентов фотодинамической терапии или антимикробной фотодинамической терапии. Создание систем доставки на их основе необходимо для решения проблем, вызванных гидрофобностью BODIPY ФС. Загрузка люминофоров в носитель осуществлялась путем нековалентной функционализации ZIF-8 типа «хозяин-гость» за счет инкапсулирования ФС в поры/полости каркаса двумя способами: 1 – *in-situ* - непосредственно во время синтеза носителя в растворах органических растворителей (спирт, ТГФ, ДМФА и их смесей с водой), либо механохимически без участия растворителя; 2 – *ex-situ* - путем сорбции из концентрированного раствора красителя. Варьирование условий синтеза оказало заметное влияние на выход продукта, эффективность и механизм загрузки красителей (преимущественное встраивание в поры/полости каркаса, либо адсорбция на его поверхности), кристалличность и размер частиц, объем пор и удельную поверхность материалов, а также флуоресцентные характеристики и эффективность высвобождения красителя из BODIPY@ZIF-8 композитов в суспензиях фосфатного буфера (PBS) при различных значениях pH. Стоит отметить, что наибольшая эффективность загрузки (свыше 50%) BODIPY ФС в носитель достигалась при их введении *in-situ* в спиртовой среде, при этом BODIPY не только встраивался в поры ZIF-8, но и адсорбировался на его поверхности. Использование ТГФ, наоборот давало невысокую загрузку красителя (3%), но при этом полученные образцы отличались интенсивной флуоресценцией в твердом состоянии. Скорость и эффективность высвобождения ФС из BODIPY@ZIF-8 зависела от методики синтеза композитов и pH среды. Высвобождение ФС в 1-октанол (как модель липидных слоев мембран) наблюдалось при диспергировании BODIPY@ZIF-8 как в нейтральной среде в течение 1-2 дней (за счет десорбции красителя, адсорбированного на поверхности носителя), так и в более кислой (pH от 5.0 до 6.0) в течение 10 часов за счет разрушения каркаса.

Результаты исследования позволяют подобрать оптимальную методику получения нанокомпозитов BODIPY@ZIF-8, пригодных не только для биомедицины, но и в качестве люминесцентных компонентов различных устройств оптики и электроники.

ОБРАЗОВАНИЕ И АННИГИЛЯЦИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ НА ГРАНИЦЕ ИЗОТРОПНАЯ ЖИДКОСТЬ – НЕМАТИК, ИНДУЦИРОВАННОЕ ИЗМЕНЕНИЕМ ТОПОЛОГИИ КАПЕЛЬ

С использованием поляризованной оптической микроскопии нами изучено поведение изотропных капель в окружении нематического жидкого кристалла при изменении температуры и связанные с каплями топологические дефекты поля нематического директора. Капли получены в двухфазной области нематик – изотропная жидкость. В экспериментах использован жидкий кристалл E7 в плоских ячейках с гомеотропными граничными условиями на поверхности ячеек. На границе нематик – изотропная жидкость реализуются наклонные (конические) граничные условия для нематического директора. Гибридные граничные условия приводят к образованию топологических дефектов на поверхности капель. В соответствии с теоремой Пуанкаре-Хопфа суммарный топологический заряд дефектов ориентационного поля на поверхности должен быть равен ее Эйлеровой характеристике χ .

Нами прослежена трансформация топологических дефектов при изменении геометрических характеристик капель. У капель на поверхности ячейки наблюдается топологический дефект с топологическим зарядом $+1$. Когда размер капель становится больше толщины ячейки, топологический дефект исчезает. При охлаждении и уменьшении размера капель происходит обратный переход с образованием топологического дефекта. При большой скорости охлаждения наблюдался топологический переход с образованием тороидальной капли. Поскольку Эйлерова характеристика тороида $\chi = 0$, тороид может образовываться без топологических дефектов. Нами наблюдалось образование топологических дефектов при слиянии капель. Полученные результаты демонстрируют возможность контролируемым образом изменять топологию сложных жидкокристаллических систем с образованием и аннигиляцией топологических дефектов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-12-00200).

- [1] P.V. Dolganov, N.A. Spiridenko, A.S. Zverev, *Phys. Rev. E*, 2024, **109**(1), 014702. DOI: 10.1103/PhysRevE.109.014702
- [2] P.V. Dolganov, N.A. Spiridenko, V.K. Dolganov, *Phys. Rev. E*, 2024, **110**(2), 024703. DOI: 10.1103/PhysRevE.110.024703
- [3] P.V. Dolganov, N.A. Spiridenko, *Liq. Cryst.*, 2022, **49**(14), 1933-1941. DOI: 10.1080/02678292.2022.2076947
- [4] P.V. Dolganov, N.A. Spiridenko, V.K. Dolganov, *Eur. Phys. J. E*, 2023, **46**(12), 121–128. DOI: 10.1140/epje/s10189-023-00387-3

Ю.В. ЕРЕМЕЕВА, Г.Б. ГУСЕВА, Е.В. АНТИНА
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЕ BODIPY ЛЮМИНОФОРЫ И ИХ КОНЬЮГАТЫ С МОНОТЕРПЕНОИДАМИ КАК ТЕРАНОСТИЧЕСКИЕ АГЕНТЫ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Глобальный рост антибиотикорезистентности является одной из серьезных проблем здравоохранения во всем мире. Сложность полимикробных сообществ создает научную проблему для поиска эффективной стратегии лечения. Поэтому разработка новых тераностических агентов для антимикробной фотодинамической терапии является актуальной и востребованной задачей для специалистов химии и медицины. На сегодняшний день активно развивается метод фотодинамической инактивации, основанный на использовании фотосенсибилизаторов. Одними из перспективных кандидатов в качестве потенциальных тераностических агентов являются галогензамещенные борфторидные комплексы дипиррометенов (BODIPY). Данный класс соединений зарекомендовали себя как перспективные люминофоры медицинского назначения благодаря возможности целенаправленной настройки практически значимых свойств, в том числе сочетания эффективных показателей: 1) генерации синглетного кислорода; 2) широкого спектра антимикробного действия; 3) высокой стабильности к УФ воздействию и агрессивным средам; 4) сродства к биоструктурам. Широкие возможности дизайна молекулярной структуры BODIPY люминофоров позволяют получить соединения с характерной для тераностиков функциональностью, требуемой для их применения в фотодинамической и антибактериальной терапии (ФДТ и АФДТ).

Цель работы заключается в получении новых биосовместимых фотосенсибилизаторов на платформе *мезо*-замещенных галоген-BODIPY и их конъюгатов с биологически-активными монотерпеноидами (Рис. 1).

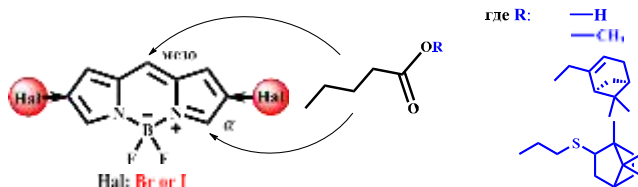


Рисунок 1 – Общая структура BODIPY

Структурная модификация путем конъюгирования двух различных классов соединений позволяет придать люминофорам набор тераностических функций, обеспечивающих флуоресцентную диагностику, способность эффективно и селективно связываться с мембранами микробных клеток и инактивировать патогены без риска возникновения резистентности.

В докладе будут представлены результаты исследований по изучению влияния особенностей молекулярной структуры на фотофизические свойства, фото- и pH-стабильность и сродство к биоструктурам галоген-BODIPY люминофоров и их конъюгатов с мембранотропными монотерпеноидами, содержащих в *мезо*-позиции дипиррометенового остова остатки карбоновых кислот и их сложных эфиров. Будет проведен сравнительный анализ эффективности транспорта и особенности локализации, аккумуляции фотосенсибилизаторов в клетках бактерий и микроскопических грибов, а также проведен анализ биологической активности полученных тераностиков в отношении патогенных микроорганизмов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00084, <https://rscf.ru/project/25-23-00084>.

РАЗРАБОТКА ПРИНЦИПОВ ФОРМИРОВАНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СМЕСЕЙ ДЛЯ ПАНОРАМНОЙ ДИАГНОСТИКИ ТЕМПЕРАТУР НА ПОВЕРХНОСТИ ИССЛЕДУЕМЫХ ОБЪЕКТОВ

Оптические свойства холестерических жидких кристаллов (ХЖК) применяются в самых различных областях: экспериментальная аэродинамика; диагностика ультразвуковых и акустических полей; дефектоскопия; медицина [1]. ХЖК, нанесенные тонким слоем на исследуемый объект, своим цветом отображают процессы, происходящие на его поверхности. Длина волны отраженного от поверхности ХЖК света зависит от нескольких факторов: шага спирали (температуры, механического сдвига), коэффициента рефракции, углов освещения и наблюдения и т.д. Широкий спектр областей использования определяет выбор конкретных ХЖК на требуемые температуры с учетом условий и режимов их применения. Практически невозможно найти индивидуальное ХЖК соединение, которое бы удовлетворяло всем требованиям. Поскольку термочувствительные ЖК, как правило, представляют собой смеси разных веществ, представляется необходимой разработка принципов формирования составов с требуемыми температурными характеристиками. В ИТПМ накоплено большое количество экспериментальных данных о цвето - температурных характеристиках бинарных смесей эфиров холестерина и ряда жирных кислот с длиной боковой цепи от C2 до C16. Цель работы – с помощью статистического анализа этих данных получить концентрационные зависимости температур начала (T_{red}) и ширины (ΔT) области селективного отражения в видимой области оптического спектра. А также протестировать практический способ получения дополнительных синтетических данных для применения алгоритмов машинного обучения с помощью аппроксимации многофакторных концентрационных зависимостей [2].

Обработка, анализ и получение аппроксимирующих зависимостей осуществлялись с помощью пакетов EXCEL и STATISTICA 10.

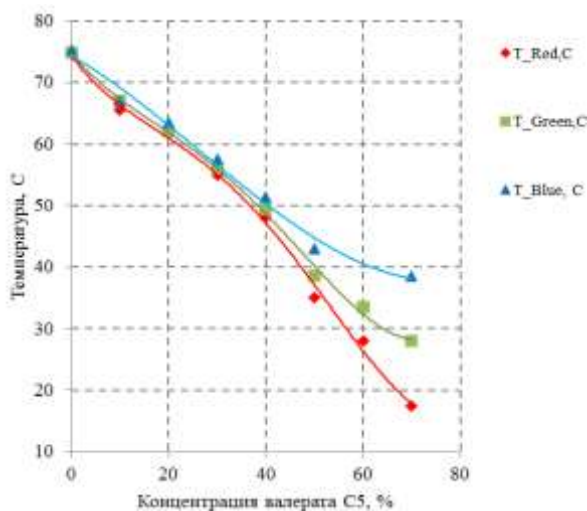


Рисунок 1 – зависимости температур отражения трех длин волн смесей эфиров холестерина (нонаната – C9 и валерата – C5) от концентрации валерата

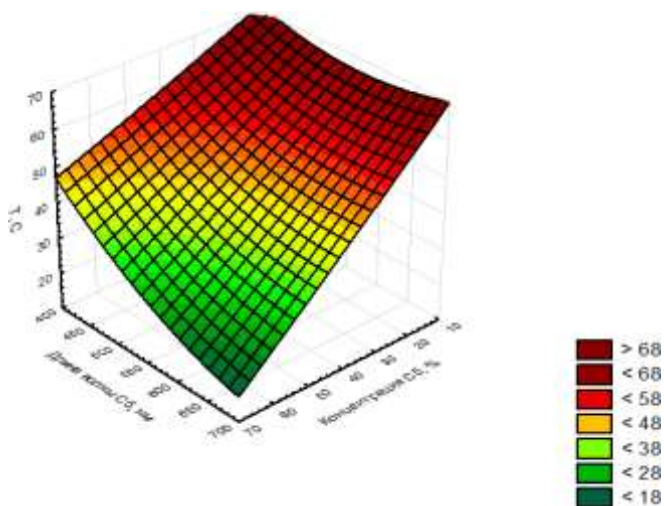


Рисунок 2 – зависимость температуры отражения от концентрации валерата (C5) и длины волны, полученная по аппроксимации экспериментальных данных

[1] Г.М. Жаркова, А.С. Сонин. Жидкокристаллические композиты. Новосибирск: Наука.1994. 213 с.

[2] В.Н. Коврижина, А.П. Петров, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25**(1), 5–21

DOI:10.18083/LCAppl.2025.1.5

А.Э. ЗАВОРОТЬКО¹, К.В. АРМЕНКОВ¹, А.С. КРУПИН¹, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ^{1,2}¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия²Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, КазНЦ РАН, Казань, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННОГО ТУШЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК

В настоящее время синтез и исследование свойств углеродных точек (С-точек) является важным и актуальным направлением науки в области люминесцентных материалов. Благодаря простоте синтеза и дешевизне сырья, а также низкой токсичности и биосовместимости, углеродные точки находят свое применение в производстве светотрансформирующих материалов, в защите и маркировке информации, а также в биомедицине, тераностике и аналитических применениях [1].

Однако на данный момент недостаточно внимания уделяется исследованию концентрационных зависимостей люминесценции в растворах углеродных точек. В связи с этим, целью данной работы было установление оптимального содержания С-точек в водных средах.

Углеродные точки, исследуемые в работе, были получены в ходе гидротермального синтеза в течение 9 часов с последующей очисткой диализом. При этом цвет излучения напрямую зависит от используемых прекурсоров. Так, из фенилендиаминов и прекурсоров были синтезированы точки с излучением в синей, желтой и зеленой областях видимого спектра (Рис. 1, а). Для всех частиц были получены спектры люминесценции водных растворов с различным содержанием (Рис. 1, б).

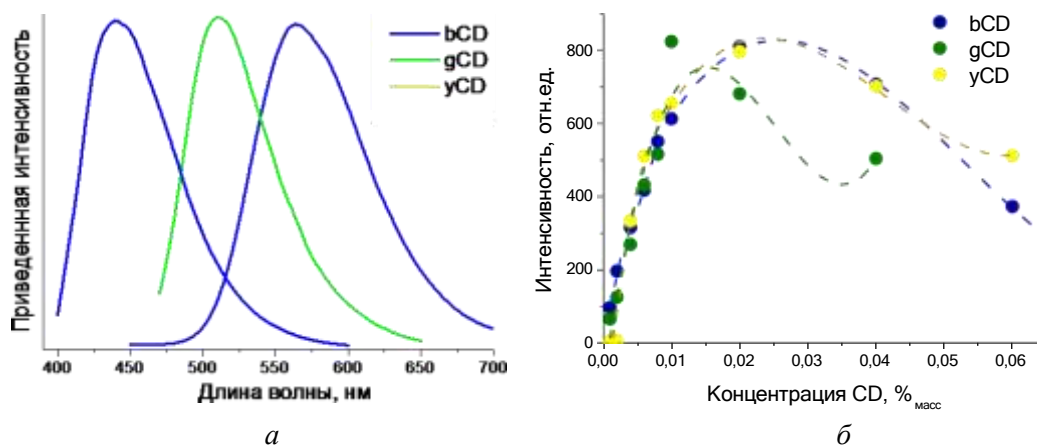


Рисунок 1 – Приведенные спектры излучения синтезированных углеродных точек (а), концентрационные зависимости для их водных растворов (б)

Установлено, что для желтых и синих углеродных точек, полученных из изомеров фенилендиаминов, максимальная интенсивность люминесценции достигается при 0,02% масс., для зеленых – при 0,01 %масс.

Таким образом, в работе были получены углеродные точки, обладающие синим, желтым и зеленым цветами излучения, исследованы их люминесцентные свойства и определены концентрационные зависимости. Полученные частицы имеют перспективу применения в производстве оптических и аналитических устройств, а также в биомедицине и тераностике.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект №20-73-10091).

[1] А.Э. Заворотько, И.Д. Максимова, А.С. Крупин, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник технологического университета*, 2024, 27(12), 18-22. DOI: 10.55421/1998-7072_2024_27_12_18

И.В. КАСЬЯНОВА, А.Р. ГЕЙВАНДОВ

Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

ОРИЕНТАЦИЯ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА ПОВЕРХНОСТЬЮ ОТСЛОЕННОЙ АНИЗОТРОПНОЙ ПЛЕНКИ ИЗ ПОЛИМЕРИЗУЕМОГО ЖК

Для ориентации жидких кристаллов (ЖК) применяют специальные ориентирующие слои или используют поверхность предыдущего слоя при послойном нанесении полимеризуемого ЖК. Нам удалось отделить от подложки пленку из полимеризуемого ЖК RM 257 (2-метил-1,4-фенилен бис(4-(3-(акрилоилокси)пропокси)бензоат), CAS # 174063-87-7), ориентированную на поверхности азокрасителя, и использовать ее обратную сторону для ориентации следующего слоя ЖК.

Ориентирующий слой формировали на стеклянной подложке с помощью азокрасителя «бриллиантовый желтый», облученного линейно-поляризованным светом, затем покрывали его слоем RM 257. После полимеризации на этот слой наносили каплю УФ-полимеризуемого клея и присоединяли вторую подложку. После отверждения клея подложки механически разделяли. В результате азокраситель оставался на исходной подложке, а на вторую переносилась полимеризованная пленка ориентированного RM 257.

Мы подтвердили качество ориентации обратной стороны ЖК пленки для двух случаев, имеющих большое практическое значение – для однородной планарной ориентации и для ориентации с пространственно-периодическим распределением директора ЖК, характерным для дифракционных оптических элементов. Качество ориентации подтверждается наблюдением текстуры ориентированного слоя ЖК с помощью поляризационной микроскопии (Рис. 1), а также сохранением величины двулучепреломления в дополнительно нанесенном слое и эффективности дифракции в случае поляризационно-селективной линзы. Наш метод исключает потери пропускания, вызванные поглощением азокрасителя, улучшает адгезию пленки и позволяет переносить ориентированные слои на различные подложки, в том числе гибкие.

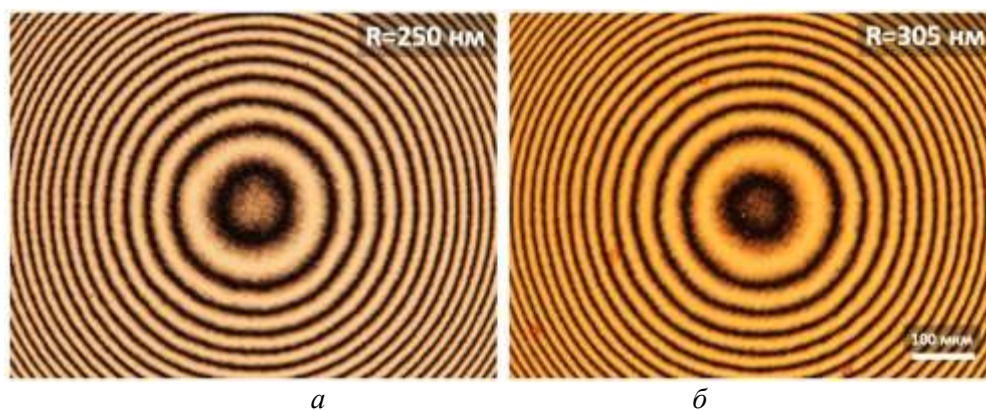


Рисунок 1 – Центр поляризационно-селективной дифракционной линзы в скрещенных поляризаторах: до (а) и после (б) перенесения на новую подложку и нанесения дополнительного слоя RM 257 на обратную сторону, R – фазовая задержка, на длине волны 546 nm

Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

М.А. КЛИМОВИЧ¹, М.А. КОЛЫВАНОВА^{1,2}, В.Н. МОРОЗОВ¹¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия²Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия

ОБ ОПТИЧЕСКОМ ПОЛИМОРФИЗМЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИСПЕРСИЙ ДНК

Жидкокристаллические системы на основе нуклеиновых кислот уже многие годы привлекают внимание в качестве модельных систем для биологических исследований, а также в качестве чувствительных элементов для сенсорных приложений. Одними из них являются жидкокристаллические дисперсии (ЖКД) ДНК. Формирование частиц в таких дисперсиях происходит в результате фазового исключения молекул нуклеиновой кислоты с предварительно экранированными зарядами на фосфатных группах при добавлении ряда химически нейтральных по отношению к ним осмолитов (главным образом для этого используется полиэтиленгликоль (ПЭГ)). Согласно существующим представлениям, их внутренняя структура определяется среди прочего осмотическим давлением раствора (то есть может регулироваться при варьировании концентрации полимера). В определенных условиях (при содержании ПЭГ в системе от ≈ 12 до ≈ 24 мас. %) у ЖКД ДНК может наблюдаться выдающаяся оптическая активность, выражающаяся в том числе в возникновении на спектре кругового дихроизма (КД) характерных «аномалий»: хвоста вне области поглощения ДНК и многократно усиленной отрицательной полосы в области поглощения азотистых оснований, которая, в свою очередь, проистекает из структурной организации частиц (молекул нуклеиновой кислоты в этом случае располагаются в повернутых друг относительно друга слоях, образующих спиральную, иными словами, холестерическую закрутку).

Одним из актуальных вопросов, на который довольно долгое время не было однозначного ответа, являлся вопрос о существовании оптически активных дисперсных систем при высоких концентрациях ПЭГ (свыше ≈ 24 мас. %). В нашей недавней работе было продемонстрировано, что такая возможность принципиально существует (см. [1]). Причем, что весьма интересно, возможна как право-, так и лево-ориентированная внутренняя организация формирующих частицы слов из молекул ДНК. Ключевым фактором в этом случае является содержание ПЭГ в исходном (стоковом) растворе, используемом для приготовления дисперсий. В соответствии с отмеченным в работе [2] знакопеременной хиральности, мы предполагаем, что такое поведение обусловлено изменением формы молекул ДНК, а именно их переходом из правозакрученной В-формы в левозакрученную Z-форму. Проведенные с данной системой эксперименты и аргументы в пользу данной гипотезы будут подробно обсуждены в докладе.

[1] V.N. Morozov, M.A. Klimovich, A.V. Shibaeva, O.N. Klimovich, E.D. Koshevaya, M.A. Kolyvanova, V.A. Kuzmin, *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, **24**(14), 11365. DOI: 10.3390/ijms241411365

[2] V.A. Tverdislov, E.V. Malyshko, *Phys. Usp.*, 2019, **62**, 354–363. DOI: 10.3367/ufne.2018.08.038401

И.В. КОБЛОВ¹, И.Е. КРАВЧЕНКО¹, Т.Е. ЗОРИНА¹, Я.Ю. КАСЬЯНЕНКО^{1,2}, В.М. ЗОРКАЛЬЦЕВ¹, В.П. ЗОРИН^{1,2}

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

²Международный государственный экологический институт им. А.Д. Сахарова БГУ, Минск, Беларусь

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА КОЭФФИЦИЕНТА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ В СИСТЕМЕ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ СОПОЛИМЕР/ВОДА ДЛЯ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРА ТЕМОПОРФИН МЕТОДОМ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Термочувствительные полимеры, характеризующиеся наличием фазового перехода в области физиологических температур, считаются перспективными носителями для доставки лекарственных соединений, в том числе и фотосенсибилизаторов (ФС), применяющихся в методе фотодинамической терапии. Особенность поведения данного класса соединений при изменении температуры среды может быть использована для контролируемой адсорбции/десорбции молекул ФС. Наиболее известным представителем термочувствительных полимеров считается поли(N-изопропилакриламид). Ранее нами было показано, что звездообразный сополимер на основе декстрана и поли-N-изопропилакриламида (Д-П) способен эффективно инкапсулировать и высвобождать мезо-тетра(гидроксифенил)порфин (Темопорфин).

Целью данной работы является оценка устойчивости комплексов сополимер Д-П с Темопорфином в водной среде. В работе использовали сополимер Д-П (любезно предоставлен Н.В. Куцевол, Киевский национальный университет), Темопорфин (Biolitec, Германия), триметил-β-циклодекстрин (тм-β-ЦД) (AraChem, Нидерланды). Для определения кажущегося коэффициента распределения Темопорфина между сополимером и водной средой была использована схема, представленная на рис. 1. Долю молекул ФС, находящихся в составе комплексов с тм-β-ЦД и Д-П, определяли с использованием спектрального метода, основанного на вариабельности полосы Соре Темопорфина при связывании с нанонструкциями [1]. Спектры возбуждения и флуоресценции исследовались на спектрофлуориметре Solar CM-2203 (Беларусь).

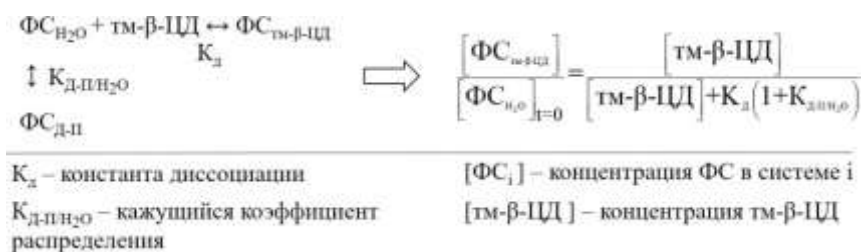


Рисунок 1 – Схема определения кажущегося коэффициента распределения ФС в системе сополимер-вода

В ходе работы были получены значения кажущегося коэффициента распределения Темопорфина в системе сополимер-вода при 37 °С. Для растворов сополимера ($6,66 \cdot 10^{-7}$ моль/л) в состоянии равновесия концентрации ФС в полимерной фазе и воде различаются более чем на порядок. Показано, что при разбавлении комплексов Темопорфина с Д-П в 50 раз практически все молекулы ФС остаются в составе полимерной глобулы на протяжении длительного времени. Предполагается, что такая устойчивость комплексов обусловлена не высоким значением коэффициента распределения ФС в системе сополимер-вода, а длительностью реорганизации полимерных цепей: в составе плотно сжатой глобулы сополимера молекулы Темопорфина находятся в кинетической ловушке.

Работа выполнена при поддержке БРФФИ (грант № M24МП-024).

[1] I.V. Koblov, I.E. Kravchenko, T.E. Zorina, V. Kaskeh, V.P. Zorin. *J. Appl. Spectr.*, 2025, **92**(1), 8-15. DOI: 10.1007/s10812-025-01871-8

Е.А. КОПЫТОВА, Д.А. ПЕТРОВ

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

О ПРЕДСТАВЛЕНИИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУСПЕНЗИЙ В ФОРМЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ЛАНДАУ – ДЕ ЖЕНА

Впервые ферронематики – разбавленные суспензии коллоидных ферро- или ферромагнитных частиц в нематическом жидком кристалле (ЖК) были предсказаны Ф. Брошар и П.Ж. де Женом в 1970 году [1]. В этой работе предполагалось, что благодаря анизотропии формы сильно вытянутые игольчатые частицы могут сохранять ферромагнитный порядок, находясь в ЖК-матрице даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Долгое время не удавалось получить устойчивые намагниченные ЖК-суспензии, пока не была опубликована работа [2], в которой утверждалось об успешном синтезе суспензии нанопластин гексаферрита бария в нематике 5СВ. Благодаря дискообразной форме частиц такие суспензии обладали спонтанной намагниченностью в отсутствие внешнего магнитного поля. После выхода работы [2] разные научные коллективы начали развивать теоретические подходы, основывающиеся на теории Ландау – де Жена. В рамках такого подхода свободная энергия суспензии записывается в виде ряда по инвариантам параметров порядка (см., например, [3, 4]). Коэффициенты такого разложения подбираются из эксперимента и являются феноменологическими параметрами. Популярность и простота теории Ландау – де Жена связана с алгебраическим видом уравнений ориентационного и магнитного состояния суспензии [3], а сложность – в большом количестве коэффициентов разложения, которые являются свободными параметрами.

В настоящей работе поднимается вопрос о том, как коэффициенты разложения свободной энергии феноменологической теории Ландау-де Жена могут быть связаны с материальными параметрами суспензии. Нами получено основанное на термодинамическом потенциале молекулярно-статистической теории [5, 6] разложение свободной энергии ЖК-суспензии магнитных частиц, допускающей появление спонтанной намагниченности, в форме Ландау. Коэффициенты такого разложения выражены аналитически в виде функций концентрации примесных частиц и параметров модели среднего поля [5]. С помощью полученного разложения свободной энергии найдены уравнения ориентационного и магнитного состояния суспензии. Построены температурные зависимости параметров порядка системы, для которых проведено сравнение с результатами, полученными в рамках молекулярно-статистической теории [5]. Нами показано, что для описания антиферромагнитного и ферромагнитного упорядочения суспензии для примесной подсистемы наряду с полярным параметром порядка нужно также учитывать скалярный (нематический) параметр порядка. Ранее во всех работах, использующих теорию типа Ландау – де Жена, для описания ферромагнитных ЖК-суспензий учитывался лишь только полярный параметр порядка, что, по нашему мнению, является не совсем корректным.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки РФ, проект FSNF-2024-0001.

- [1] F. Brochard, P.G. de Gennes, *J. de Physique* (France), 1970, **31**, 691-708. DOI: 10.1051/jphys:01970003107069100
- [2] A. Mertelj, D. Lisjaka, M. Drofenik, M. Čopič, *Nature*, 2013, **504**, 237-241. DOI: 10.1038/nature12863
- [3] T. Khalilov, D. Makarov, D. Petrov, *Crystals*, 2021, **11**, 639. DOI: 10.3390/cryst11060639
- [4] K. Bisht, Y. Wang, V. Banerjee, A. Majumdar, *Phys. Rev. E*, 2020, **101**, 022706. DOI: 10.1103/PhysRevE.101.022706
- [5] Petrov D. A, *Phys. Rev. E*, 2020, **101**, 030701(R). DOI: 10.1103/PhysRevE.101.030701
- [6] Д.А. Петров, П.К. Скоков, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2020, **20**(4), 63-71. DOI: 10.18083/LCAppl.2020.4.63

ШИРОКОТЕМПЕРАТУРНАЯ ФЕРРИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ФАЗА В БИНАРНОЙ СМЕСИ АХИРАЛЬНОГО СМЕКТИКА С И НЕМЕЗОГЕННОГО ХИРАЛЬНОГО СОЕДИНЕНИЯ

Экспериментально построена фазовая диаграмма смеси ахирального смектического С жидкого кристалла 2-(4'-пентилбифенил-4-ил)-5-гексил-пиримидин (BPP-65) и хирального немезогенного соединения (S,S)бис-(1,1,1-трифторокт-2-ил)-4,4''-терфенилдикарбоксилат (FODTA-6). Фазовая диаграмма, представленная на рисунке 1, отображает температурные и концентрационные области существования различных мезофаз смеси: ферриэлектрической (Ferri), сегнетоэлектрической смектической С* (SmC*), смектической А (SmA), изотропной (Is) и кристаллической (Cr). Показаны также двухфазные области сосуществования изотропной и смектической С* фазы, а также кристаллической и смектической С* фазы.

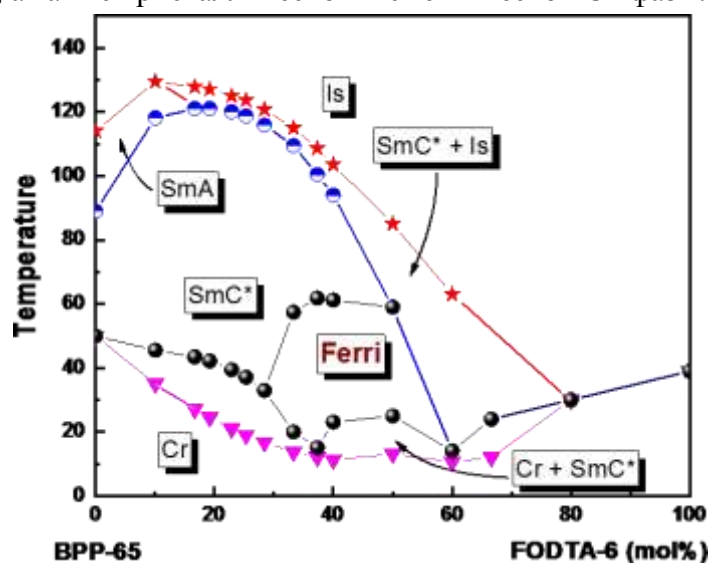


Рисунок 1 – Фазовая диаграмма смеси BPP-65 и FODTA-6

Фазовая диаграмма показывает существование двух эвтектик: при 60 мольных % FODTA-6 и при 37.3 мольных % FODTA-6, причём при указанной эвтектической концентрации при нагревании смеси из предварительно полученного путём охлаждения твёрдого кристалла происходит фазовый переход в ферриэлектрическую фазу, которая в данном случае не является промежуточной между антисегнетоэлектрической и сегнетоэлектрической фазами. Температурный интервал энантиотропной ферриэлектрической фазы в данном случае составляет от 15.1 °С до 61.8 °С.

Доказательством возникновения ферриэлектрической фазы в смеси является наличие двух фазовых переходов в электрическом поле (как в работе [1]) в интервале концентраций FODTA-6 от 33 мольных процентов до 50 мольных процентов, в то время как при концентрации FODTA-6 менее 33 мольных процента наблюдается только один фазовый переход в электрическом поле, что свойственно для сегнетоэлектрической смектической С* фазы. В работе исследованы диэлектрические и электрооптические свойства ферриэлектрической фазы, показаны перспективы её использования в фотонных устройствах для фазовой модуляции излучения.

Благодарность: данное исследование финансировалось Российским научным фондом (РНФ), грант № 24-22-00239.

[1] A.V. Emelyanenko, E.P. Pozhidaev, N.M. Shtykov, V.E. Molkin, *J. of the SID*, 2008, **16**(8), 811–817. DOI: 10.1889/1.2966442

А.А. КУЗЬМИНА, Л.О. МОНАХОВ, И.В. НОВИКОВ, В.В. АЛЕКСАНДРИЙСКИЙ,
В.А. БУРМИСТРОВ

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОПАНТОВ НА ОСОБЕННОСТИ ХИРАЛЬНОЙ ИНДУКЦИИ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Основания Шиффа (азометины) относятся к числу наиболее востребованных и структурно разнообразных классов органических соединений. Особое внимание исследователей привлекают биологически активные азометиновые производные природных терпеноидов, таких как камфора и борнеол, в качестве индукторов спиральных мезофаз. Эти соединения сочетают высокую доступность, энантиомерную чистоту, оптическую активность и низкую токсичность. Камфорные производные оснований Шиффа в составе жидкокристаллических смесей могут найти применение в различных областях: дисплеи, оптоэлектроника, лазерные технологии, фотоника, энергетика, умные материалы, авиация и т.д. Такие системы обладают существенными преимуществами по сравнению с традиционными одноосными нематическими жидкими кристаллами и холестериками.

Методом поляризационной термомикроскопии изучены спиральные мезофазы жидкокристаллических смесей 4-(*n*-алкилокси-4'-цианобифенилов (СВ-2), индуцированные камфоралиден-аминоазобензолом (КЛААБ) и дикамфоралиденазоданилином (ДКЛАДА). Были измерены температуры фазовых переходов и шаг спирали ЖК смесей. Измерены значения шага спирали, рассчитана эффективность хиральной индукции (chemical twisting power (НТР)). При исследовании, методом термомикроскопии наблюдалось образование текстур «отпечатков пальцев» и интерференционных колец Ньютона (Рис. 1).

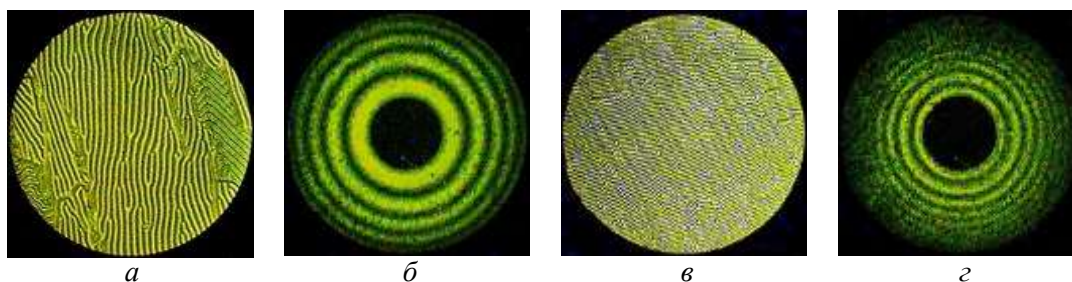


Рисунок 1 – Текстуры «отпечатков пальцев», образующиеся в смесях СВ-2 с КЛААБ 9,70 % при 45 °С (а), система колец Ньютона смеси СВ-2 с КЛААБ 4,93 % при 50 °С (б), текстуры «отпечатков пальцев» смеси СВ-2 с ДКЛАДА 2,72 % при 30 °С (в), система колец Ньютона смеси СВ-2 с ДКЛАДА 4,88 % при 37,5 °С (г)

Проведено сравнение влияния хиральных оптически активных добавок на мезоморфные, оптические и диэлектрические свойства СВ-2. Диэлькометрически получены температурные зависимости компонент диэлектрической проницаемости в хиральной нематической и изотропножидкой фазах. Анализ полученных данных показывает, что введение допантов в нематические ЖК приводит к заметному изменению значений всех компонент диэлектрической проницаемости. При этом абсолютная величина анизотропии диэлектрической проницаемости $\Delta\epsilon$ резко снижается во всех случаях вследствие снижения параметра порядка, а также 3D-компенсации диполей ЖК. Были получены температурные и концентрационные зависимости индексов рефракции и двулучепреломления (Δn) растворов ЖК-допант. Анализ этих данных показал, что увеличение концентрации допанта сопровождается незначительным уменьшением двулучепреломления, что связано в основном с падением параметра ориентационного порядка.

*Работы проводились в рамках гос. задания Министерства науки и высшего образования
Российская Федерация (№ FZZW-2023-0009.)*

А.Д. КУРИЛОВ, А.А. КЛОЧКОВ, А.В. ГУБАРЕВА, С.А. ЗУБКОВ

Государственный университет просвещения, Москва, Россия

МОДЕЛЬ БОЙЛЯ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРНО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Магнитные жидкости (МЖ) представляют собой уникальные системы, в которых наночастицы способны формировать анизотропные структуры под действием внешнего магнитного поля. Эти структуры, такие как вытянутые цепочки или кластеры, существенно влияют на диэлектрические свойства системы, что открывает возможности для управления их функциональными характеристиками. Однако изучение таких структур затруднено из-за их малых размеров и диффузионной природы структурообразования, что требует разработки новых теоретических подходов для анализа и интерпретации экспериментальных данных.

В настоящей работе предложен подход, основанный на модели Бойля [1], для описания диэлектрических свойств МЖ с учетом формы и ориентации анизотропных агрегатов. Главная идея заключается в представлении агрегатов в виде вытянутых эллипсоидов, что позволяет связать их морфологию с диэлектрическими характеристиками системы. Модель Бойля, дополненная учетом эффектов межфазной поляризации и двойного электрического слоя, была использована для анализа данных диэлектрической спектроскопии, полученных другими научными группами [2, 3].

Проведено моделирование диэлектрических спектров МЖ в широком диапазоне частот (от 1 кГц до 5 ГГц), которое позволило выделить основные механизмы поляризации: низкочастотную релаксацию, связанную с двойным электрическим слоем, и высокочастотную межфазную поляризацию на уровне отдельных частиц. Численно решена обратная задача определения формы, концентрации и материальных параметров агрегатов на основе спектроскопических данных. Установлено, что с увеличением напряженности магнитного поля агрегаты приобретают более вытянутую форму, что приводит к усилению диэлектрической анизотропии.

Представлены смоделированные спектры действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости МЖ при различных ориентациях магнитного поля. Показано, что в параллельной ориентации поля наблюдается более высокая поляризация, что связано с усилением вклада межфазной поляризации в вытянутых агрегатах. Полученные результаты демонстрируют, что модель Бойля позволяет точно описывать диэлектрическую анизотропию и релаксационные процессы в МЖ, что подтверждается сравнением с экспериментальными данными.

Перспективы применения полученных результатов связаны с разработкой новых функциональных материалов на основе МЖ, таких как адаптивные диэлектрики, магнитные сенсоры и системы виброизоляции. Возможность управления диэлектрическими свойствами за счет изменения внешних условий, таких как напряженность и ориентация магнитного поля, открывает новые пути для создания устройств с регулируемыми характеристиками. Кроме того, предложенный подход может быть использован для анализа других дисперсных систем с анизотропной структурой, что расширяет область его применения.

[1] M.H. Boyle. *Colloid and Polymer Science*, 1985, **263**, 51–57. DOI: 10.1007/BF01411248

[2] P.C. Fannin, O.M. Bunoiu, I. Malaescu, C.N. Marin, D. Ursu. *The European Physical Journal E*, 2021, **44**(6), 83. DOI: 10.1140/epje/s10189-021-00087-w

[3] C.N. Marin, P.C. Fannin, I. Malaescu. *Magnetochemistry*, 2024, **10**(11), 88. DOI: 10.3390/magnetochemistry10110088

Р.Н. КУЧЕРОВ^{1,2}, А.Д. КУРИЛОВ^{1,2}, А.И. СМИРНОВА³, Д.Н. СТОЛБОВ⁴, Н.В. УСОЛЬЦЕВА³,
Д.Н. ЧАУСОВ¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия

²Государственный университет просвещения, Москва, Россия

³НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

⁴Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

ВЯЗКОУПРУГИЕ СВОЙСТВА ДИСПЕРСИЙ ТРИДЕЦИЛАТА ХОЛЕСТЕРОЛА С АЗОТ-ДОПИРОВАННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Создание функциональных анизотропных материалов, которые не изменяют свои свойства при изгибе, является одним из важнейших направлений развития современной электроники. Коммерчески доступные холестерические жидкие кристаллы (ХЖК), широко используемые в электрооптике, не обладают необходимыми физическими свойствами для использования в гибких устройствах электроники. Кроме того, ХЖК с необходимыми эксплуатационными параметрами являются слишком дорогими в производстве. Как показали наши предыдущие исследования, одним из путей решения этой проблемы является допирование ХЖК матрицы углеродными наноструктурами (УНС).

В рамках данной работы исследовалось влияние азот-допированных УНС (малослойных графитовых фрагментов, N-МГФ) на реологические параметры ХЖК тридецилата холестерина (Х-20). Замещение азотом части атомов углерода в структуре малослойных графитовых фрагментов (МГФ) приводит к искажению углов и длин связей в ароматических кольцах графитового слоя, но не влияет на общую графитовую структуру и морфологию N-МГФ по сравнению с недопированными МГФ. Атомы азота в структуре N-МГФ приводят к образованию двумерной связи π - π между соседними графитовыми слоями и самими частицами N-МГФ, что уменьшает межслоевые расстояния. Концентрация дефектов в N-МГФ выше по сравнению с МГФ. Удельная плотность поверхности N-МГФ ~ на 30% меньше, чем у МГФ. Модификация структуры МГФ за счет допирования азотом приводит к увеличению ее гидрофильности.

Результаты исследования показывают, что наличие в матрице Х-20 наночастиц N-МГФ в малых концентрациях (0,005 и 0,02 мас. %) приводит к изменению вязкоупругих параметров дисперсии Х-20/N-МГФ: область существования вязкоупругого состояния смещается в сторону высоких частот внешнего воздействия. Это наблюдается как для действительной, так и для мнимой компонент модуля сдвига. В результате, вязкоупругое поведение дисперсий проявляется до частоты 40 рад/с внешнего воздействия, тогда как для чистого Х-20 разрушение холестерической структуры начинается при 10 рад/с. Схожее смещение наблюдалось нами ранее при исследовании дисперсий Х-20 с недопированными МГФ, в которых существование вязкоупругого состояния сдвигалось на порядок по сравнению с Х-20 матрицей.

Вероятнее всего, такая разница в вязкоупругом поведении дисперсий Х-20 с МГФ и N-МГФ обусловлена рядом факторов: большей удельной площадью поверхности МГФ по сравнению с N-МГФ (1500 и 1040 м²/г у МГФ и N-МГФ, соответственно), а также различием в электронной структуре и гидрофильности этих УНС. Вследствие этого, на высоких частотах сдвиговой деформации N-МГФ оказывают меньшее влияние на параметр порядка молекул Х-20, чем МГФ.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2023-0009 для Ивановского государственного университета).

Д.С. ЛЯПИН, Н.С. ФОМИН, Т.В. КУСТОВА

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ХЛОРИНОВЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ И ДИАГНОСТИКИ

Фотодинамическая терапия (ФДТ) и флуоресцентная диагностика (ФД) относятся к высокотехнологичным импортонезависимым методам лечения злокачественных новообразований и выполняются с применением фотоактивного вещества - фотосенсибилизатора (ФС), который активируется в присутствии кислорода воздуха под действием светового излучения.

Полусинтетические анионные хлориновые ФС, получаемые из природного хлорофилла, являются малотоксичными, хорошо генерирующими синглетный кислород, быстро выводимыми из организма, но относительно дорогими препаратами (~30 тыс. руб. за 100 мг). Кроме этого, они имеют ряд недостатков, заключающихся в недостаточной степени чистоты и таргетировании в основном васкулярной системы опухолей.

Введение в 13 положение хлоринового макроцикла более биосовместимой N,N-диметилпиперазинильной группы позволяет получать монокатионный ФС с более высокой растворимостью в воде за счет менее плотной упаковки в твердой фазе. Нами проведена наработка катионных водорастворимых ФС и хроматографическая очистка с использованием отечественных сорбентов на основе мелкодисперсного морского песчаника или силиката кальция, допированного карбонатом кальция. Разработана технология масштабирования ФС с целью одновременного получения 500-1000 мг чистых препаратов. Полученные фотосенсибилизаторы обладают высокой степенью чистоты и действуют при более низких концентрациях, чем другие фотосенсибилизаторы, используемые в клинической практике.

В данной работе представлены результаты исследования спектральных характеристик, синтезированных нами ФС в водных и неводных средах; изучения способности их к генерации синглетного кислорода. Монокатионные ФС продемонстрировали мощную фотодинамическую активность в отношении грамположительных и грамотрицательных бактерий. Такие результаты стали возможны благодаря эффективной генерации фотосенсибилизатором синглетного кислорода и способности препарата проникать внутрь микробной клетки. Было обнаружено, что 65 % молекул вещества, поглотивших квант света и перешедших в возбужденное состояние, взаимодействуют с растворенным в организме молекулярным кислородом и дают высоко реактивный синглетный кислород, приводящий к гибели микроорганизмов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00042, <https://rscf.ru/project/25-23-00042/>.

О.В. МАЛЫЦЕВА¹, К.С. НИКИТИН^{1,2}, О.А. ДМИТРИЕВА¹, Н.Ж. МАМАРДАШВИЛИ¹,
Н.В. УСОЛЬЦЕВА², Н.А. БРАГИНА³

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

³МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

ДИЗАЙН И СЕНСОРНЫЕ СВОЙСТВА ПОРФИРИНОВЫХ ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-ШЕФФЕРА ПО ОТНОШЕНИЮ К СУБСТРАТАМ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ В ВОДНОЙ СРЕДЕ И ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

В данной работе было изучено влияние химической структуры 5,10,15,20-тетракис(4-карбоксидецилоксифенил)порфирина (порфирин I) и 5,10,15,20-тетракис(4-децилоксифенил)порфирина (порфирин II) на формирование их плавающих слоев на границе раздела воздух/вода, оценены сенсорные свойства пленок Ленгмюра-Шеффера (ЛШ-пленки) по отношению к галогенид-ионам и ПАВ в водной среде, а также парам летучих веществ.

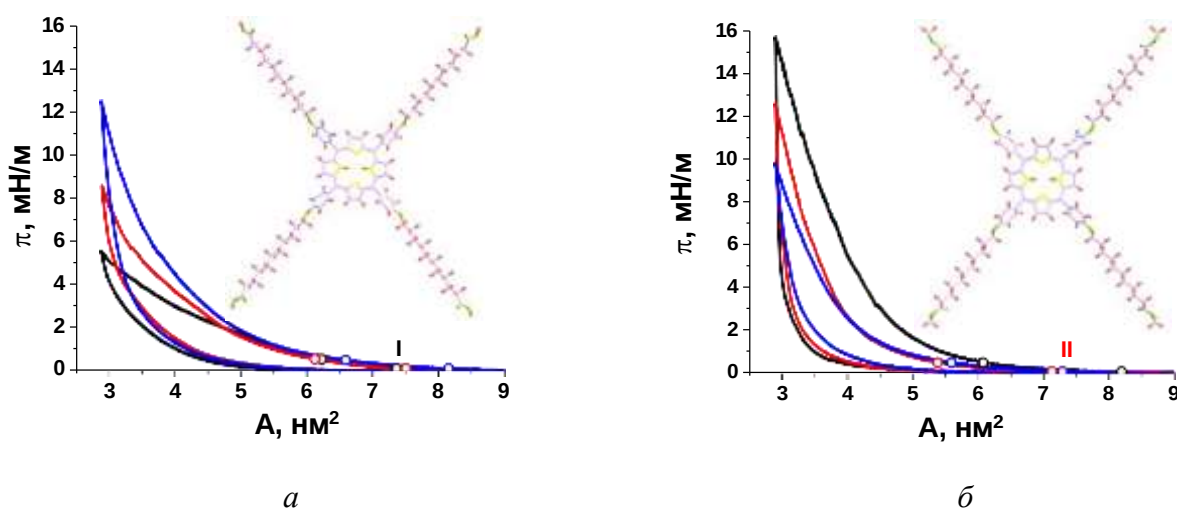


Рисунок 1 – Структурные формулы и три последовательных цикла компрессии-декомпрессии плавающего слоя порфиринов I (а) и II (б). Черная линия – первый цикл, красная – второй, синяя – третий

Структурная организация плавающих слоев порфиринов на границе раздела воздух/вода была изучена с помощью комплексного подхода, включающего МД-моделирование и другие квантово-химические методы. Полученные результаты позволили выявить особенности формирования супрамолекулярных комплексов порфиринов с молекулами ПАВ, обусловленные нековалентными взаимодействиями. Чувствительность ЛШ-пленок макрогетероциклов I и II (сдвиг полос и изменение их интенсивности в видимой области спектров поглощения) охватывает достаточно широкий концентрационный диапазон измеряемых концентраций аналита в воде (до 10^{-3} моль/л). Обнаружено, что тонкие пленки порфиринов позволяют визуально детектировать содержание паров различных летучих веществ в воздухе. Полученные данные открывают путь к созданию эффективного супрамолекулярного детектора на анион-молекулярные субстраты в растворе и в газовой среде.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственных заданий ИХР РАН (№ 122040500043-7) и НИИ наноматериалов ИвГУ (№ FZZM-2023-0009) с привлечением оборудования Верхневолжского регионального центра физико-химических исследований.

А.С. МАНУКЯН¹, Т.В. КУСТОВА²

¹МБОУ СШ № 4, Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

«ГОРЬКОЕ» СОКРОВИЩЕ ПРИРОДЫ: ЛАБОРАТОРНОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОЛАТА ПОЛЫНИ И ЕГО СВОЙСТВА

Один из популярных трендов последнего десятилетия – натуральность, естественность. Гидролаты являются перспективными ингредиентами для «зеленой» косметики, так как они натуральны по своей природе. Гидролаты широко используются в качестве косметических средств, поскольку содержат ряд биологически активных водорастворимых компонентов эфирного масла, но в отличие от последнего имеют более мягкое воздействие на кожу, что позволяет использовать их в чистом виде.

Гидролаты получают путем дистилляции растений на пару при температуре 100 °С, с использованием воды. При этом вода превращается в пар с последующей конденсацией пара в жидкость (дистиллят). Когда пары воды проходят через растительный материал, они насыщаются ценными водорастворимыми компонентами, содержащимися в растениях – эфирными маслами, кислотами, биофлавоноидами, витаминами и другими ценными веществами. Пар извлекает из растения больше ценных веществ, чем вода, поэтому содержание экстрагированных веществ в гидролате значительно больше, чем в обычном отваре.

Целью данной работы было лабораторное получение гидролата для косметических целей, обладающего увлажняющим, тонизирующим и лечебным свойством. После анализа отечественной и зарубежной литературы по лекарственным травам нами в качестве сырья была выбрана "полынь горькая" в силу своих уникальных полезных свойств широкого спектра. Полынь используют в виде порошков, экстракта, настоев и отваров. В косметологии, после использования полыни, кожа становится упругой, подтянутой, улучшается цвет лица, снимается кожный зуд, лечатся гнойнички и другие последствия проблемной кожи.

В результате выполнения работы изучено биологическое действие гидролата полыни в сравнительном аспекте. Проведены исследования его стабильности, антимикробных свойств, уровня кислотности и возможности применения в косметических и лечебных целях. Установлено, что полученный гидролат имеет уровень кислотности приближенный к pH кожи человека, а также обладает выраженными антибактериальными свойствами.

Полученные результаты являются перспективой дальнейших разработок лекарственных и косметических средств на основе гидролата эфиромасличной культуры – полыни горькой.

Исследование выполнено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ и при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, тема № FZZW-2023-0009.

Е.Е. МОЛЧАНОВ¹, Ю.С. МАРФИН²¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия²Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия

СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИПИРРОМЕТЕНАТОВ БОРА (III), СОДЕРЖАЩИХ АЛКИЛЬНЫЕ И АРОМАТИЧЕСКИЕ ЗАМЕСТИТЕЛИ

Дипиррометенаты бора (BODIPY) представляют собой класс соединений, обладающих выдающимися флуоресцентными и физико-химическими свойствами. Их спектральные характеристики поддаются тонкой настройке посредством структурной модификации, что обусловило стремительный рост интереса к ним в различных областях науки и техники, включая флуоресцентную биомаркировку, фотодинамическую терапию, лазерные технологии и оптоэлектронику.

Особый интерес вызывают полидоменные структуры BODIPY, в которых объединение нескольких дипирриновых фрагментов позволяет реализовать синергетические фотофизические эффекты. Вариации в протяжённости π -систем, введение ароматических заместителей и изменение природы центрального атома открывают возможности для управляемого смещения спектров поглощения и излучения в длинноволновую область, увеличения квантового выхода флуоресценции и чувствительности к окружающей среде.

Целью настоящего исследования явилось получение новых BODIPY-комплексов с различными заместителями и количествами доменов, а также изучение их спектральных и фотофизических свойств. Разработаны эффективные методики синтеза 11 новых соединений, проведено их структурное и спектральное исследование в различных растворителях и концентрационных условиях. Установлено влияние природы заместителей и сольватационного окружения на величину Стоксового сдвига, квантовый выход и время жизни возбуждённого состояния.

Методы квантово-химического моделирования позволили объяснить наблюдаемые спектральные изменения. Отдельное внимание уделено изучению биосовместимости одного из полученных соединений, показавшего отсутствие цитотоксичности *in vitro*, что подтверждает его потенциал в биомедицинской визуализации.

- [1] E. Banakova, A. Bobrov, A. Kazak, Yu. Marfin, D. Merkushev, E. Molchanov, E. Rumyantsev, M. Shipalova, S. Usoltsev, O. Vodyanova, *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, **951**(1), 12017. DOI: 10.1088/1742-6596/951/1/012017
- [2] E. Banakova, Yu. Marfin, E. Molchanov, M. Shipalova, E. Rumyantsev, N. Fomina, *Journal of fluorescence*, 2019, **29**(1), 41–51. DOI: 10.1007/s10895-018-2308-2
- [3] Е.Е. Молчанов, Ю.С. Марфин, Е.В. Румянцев, А.А. Ксенофонтов, *Известия высших учебных заведений, Химия и химическая технология*, 2019, **62**(12), 13–18. DOI: 10.6060/ivkkt.20196212.6017
- [4] A.Y. Shagurin, E.E. Molchanov, D.A. Sbytov, Y.S. Marfin, *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, **1822**(1), 12018. DOI: 10.1088/1742-6596/1822/1/012018
- [5] Е.Л. Алексахина, О.А. Пахрова, И.К. Томилова, Д.А. Меркушев, Е.Е. Молчанов, С.Д. Усольцев, О.С. Водянова, Ю.С. Марфин, *Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология*, 2021, **64**(3), 13–23. DOI: 10.6060/ivkkt.20216403.6355
- [6] Moskaieva O., Lebedev M., Smortsova Ye., Molchanov E., Dubois Ju., Kalugin O., Marfin Yu., Idrissi A., Minnannay F.A., *Journal of Molecular Liquids*, 2023, **382**, 121877. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121877
- [7] Ksenofontova, K. V., Shagurin, A. Y., Molchanov, E. E., *ChemPhotoChem*, 2024, e202400074. DOI: 10.6060/mhc245884a

В.Н. МОРОЗОВ¹, М.А. КЛИМОВИЧ¹, М.А. КОЛЫВАНОВА^{1,2}¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия²Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА, Москва, Россия

ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ДИСПЕРСИИ ДНК И ИОНИЗИРУЮЩЕЕ ИЗЛУЧЕНИЕ: ОТ РАДИАЦИОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ДО РАДИОБИОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Хорошо известно, что в условиях энтропийной или, иначе говоря, *psi*-конденсации (акроним от “*Polymer and Salt Induced*”) [1], инициируемой добавлением к водно-солевому раствору низкомолекулярной ДНК высокой ионной силы некоторой сверхкритической концентрации полиэтиленгликоля (ПЭГ), ее молекулы способны к образованию дисперсной фазы, для которой характерен выдающийся по интенсивности отрицательный сигнал на спектре кругового дихроизма (КД) в области поглощения азотистых оснований. Такой КД-сигнал, также называемый аномальным [2], может в десятки раз превосходить по амплитуде сигнал изотропного раствора ДНК из-за своей «структурной» природы – его возникновение обусловлено внутренней организацией частиц дисперсии: молекулы нуклеиновой кислоты в них располагаются в параллельных слоях, повернутых друг относительно друга на некоторый угол и образующих типичную для холестерических мезофаз спиральную закрутку (собственно, именно из-за этого такие системы и получили свое название – холестерические жидкокристаллические дисперсии (ХЖКД) ДНК) [3].

Одним из направлений, где уникальные оптические свойства ХЖКД ДНК могут оказаться весьма востребованными, является дозиметрия ионизирующего излучения. Недавно нами впервые была продемонстрирована принципиальная способность этих систем регистрировать с довольно высокой точностью радиационные воздействия в весьма широком диапазоне доз – от сотен Гр до сотен кГр (см. [4, 5]) – что, к слову, является актуальным для задач промышленного облучения (к примеру, для проведения процедур радиационной обработки и/или стерилизации). Кроме того, ХЖКД ДНК могут выступать и в качестве удобных модельных систем для решения ряда актуальных задач радиобиологии. Так, например, изучение противолучевых свойств радиозащитных соединений в условиях *in vitro* с их помощью становится возможным проводить широкодоступными методами оптической спектроскопии [6]. Эти, а также ряд других возможностей практического использования ХЖКД ДНК в радиационных технологиях будут подробно рассмотрены в настоящем докладе.

[1] C.F. Jordan, L.S. Lerman, J.H. Venable, *Nat. New Biol.*, 1972, **236**(64), 67–70. DOI: 10.1038/newbio236067a0

[2] D. Keller, C. Bustamante, *J. Chem. Phys.*, 1986, **84**(6), 2972–2980. DOI: 10.1063/1.450278

[3] S.V. Semenov, Y.M. Yevdokimov, *Biophysics*, 2015, **60**(2), 188–196. DOI: 10.1134/s0006350915020177

[4] M.A. Kolyvanova, M.A. Klimovich, A.V. Shibaeva, E.D. Koshevaya, Y.A. Bushmanov, A.V. Belousov, V.A. Kuzmin, V.N. Morozov, *Liq. Cryst.*, 2022, **49**(10), 1359–1366. DOI: 10.1080/02678292.2022.2032854

[5] M.A. Kolyvanova, M.A. Klimovich, A.V. Belousov, V.A. Kuzmin, V.N. Morozov, *Photonics*, 2022, **9**(11), 787. DOI: 10.3390/photonics9110787

[6] M.A. Kolyvanova, N.S. Lifanovsky, E.A. Nikitin, M.A. Klimovich, A.V. Belousov, V.Y. Tyurin, V.A. Kuzmin, V.N. Morozov, *High Energy Chem.*, 2024, **58**(1), 134–142. DOI: 10.1134/s0018143924010107

Т.А. ОВЧИННИКОВ, Д.А. ПЕТРОВ

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

**ПОРОГ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПЕРЕХОДА ФРЕДЕРИКСА
В СУСПЕНЗИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК
НА ОСНОВЕ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА**

В последнее десятилетие набрал популярность физический способ модификации свойств жидких кристаллов (ЖК) путём внедрения в них небольшого количества неорганических наночастиц. Особо место занимают используемые в качестве примеси различные аллотропные модификации углерода, к которым, например, относятся фуллерены, нанопластинки графена и углеродные нанотрубки (УНТ) [1]. Экспериментально установлено, что в суспензиях УНТ на основе нематических ЖК наблюдается существенное снижение порога электрического перехода Фредерикса по сравнению с беспримесным ЖК. Несмотря на большое количество накопленных экспериментальных данных в научной периодике до сих пор отсутствует теоретическое описание электрического перехода Фредерикса в суспензиях УНТ на основе нематических ЖК. Настоящая работа посвящена развитию континуальной модели ЖК-суспензий УНТ, в рамках которой для плоскопараллельной ячейки, заполненной суспензией с планарной текстурой, получено выражение для электрического напряжения перехода Фредерикса:

$$V_c = \pi \sqrt{\frac{K_{11}}{\varepsilon_0 \varepsilon_a (1 + \lambda f \varepsilon_a^{\text{CNT}} / \varepsilon_a)}}. \quad (1)$$

Здесь K_{11} – модуль упругости Франка, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, ε_a и $\varepsilon_a^{\text{CNT}}$ – анизотропия диэлектрической проницаемости ЖК и УНТ соответственно, f – объёмная доля УНТ в суспензии, λ – поправочный коэффициент, который учитывает изменение локального электрического поля, действующего на нанотрубку. Полученное выражение (1) позволило получить оценку анизотропии диэлектрической проницаемости УНТ, которая совпала по величине со значениями, представленными в научной литературе.

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки РФ, проект FSNF-2024-0001.

[1] A. Kumar et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2022, **55**, 083002. DOI: 10.1088/1361-6463/ac2ced

С.В. ПАСЕЧНИК¹, А.А. ВАСИЛЬЕВА¹, А.В. ЗАХАРОВ²

¹Проблемная лаборатория молекулярной акустики, РТУ МИРЭА, Москва, Россия

²Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

КОМБИНИРОВАННОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕГО ПОТОКА ПУАЗЕЙЛЯ И ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГИБРИДНО ОРИЕНТИРОВАННОГО СЛОЯ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований поведения гибридно ориентированного (ГО) слоя жидкого кристалла (ЖК) в условиях комбинированного воздействия электрического поля и низкочастотного градиента давления. В экспериментах использовалась ЖК ячейка, заполненная нематической смесью E7, характеризующаяся положительной анизотропией диэлектрической проницаемости. Методика исследований оптического отклика ЖК ячейки на воздействие осциллирующего потока Пуазейля соответствовала ранее использованной [1] при изучении динамического отклика ориентационной структуры ГО ЖК слоя на воздействие осциллирующего градиента давления. Исследования показали, что приложение к слою ЖК электрического поля может быть использовано для управления чувствительностью ячейки к воздействию градиента давления. Кроме того, наличие выделенного направления на внутренней поверхности одной из подложек ЖК ячейки приводило к снятию характерного для гомеотропного слоя вырождения исходной ориентации ЖК по азимутальному углу и подавлению индуцированных потоком долгоживущих неустойчивостей. Последнее обстоятельство играет существенную роль для создания высокочувствительных электроуправляемых ЖК сенсоров дифференциального давления. Теоретический анализ полученных результатов позволяет оптимизировать технические параметры указанных устройств.

Данная работа была поддержана Министерством образования и науки РФ (грант № FSFZ-2023-0004).

[1] S. Pasechnik, I. Nasibullayev, D. Shmeliova, V. Tsvetkov, L. Zhijian, V. Chigrinov, *Liq. Cryst.*, 2006, **33**(10), 1153-1165. DOI: 10.1080/02678290600965457

РАСТВОРИМОСТЬ ТЕТРА-3-(МЕТОКСИФЕНОКСИ)ФТАЛОЦИАНИНОВ МЕДИ В ХЛОРОФОРМЕ

Данное сообщение посвящено определению растворимости тетра-3-замещенных фталоцианинов меди, содержащих фрагменты 2-, 3- и 4-метоксифенола (Рис. 1), в хлороформе.

Методом изотермического насыщения со спектрофотометрическим контролем концентрации определена растворимость и рассчитаны термодинамические характеристики растворения комплексов в хлороформе в интервале температур 288–308 К. Растворимость синтезированных соединений измерялась на термостатируемой установке для встряхивания ампул.

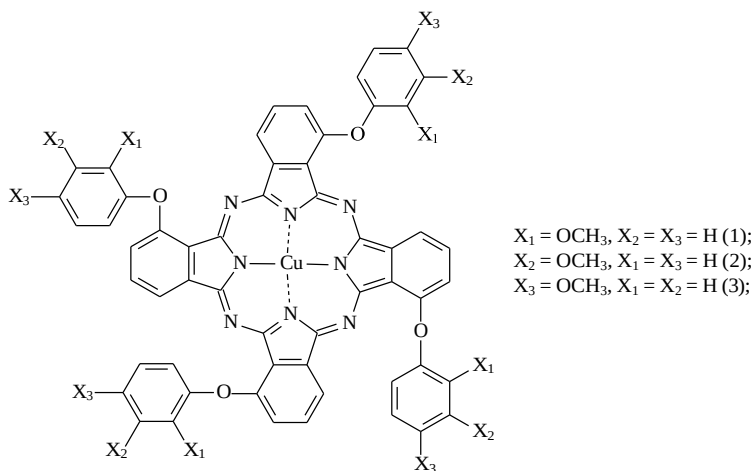


Рисунок 1 – Тетра-3-(метоксифенокси)фталоцианины меди

Растворимость и термодинамические параметры растворения синтезированных соединений в хлороформе ($S \pm 0.03$, ммоль/л)

№	λ , нм (lgε)	S, 298 К, ммоль/л	ΔH^0 , кДж/моль	ΔG^0 , кДж/моль	ΔS^0 , Дж/(моль К)
тетра-3-(2-метоксифенокси)фталоцианин меди (1)	703 (5.04)	1.53	118.8 ± 6	16.1	345
тетра-3-(3-метоксифенокси)фталоцианин меди (2)	702 (5.11)	1.95	100.0 ± 5	15.5	284
тетра-3-(4-метоксифенокси)фталоцианин меди (3)	706 (5.04)	7.89	55.4 ± 1	12.0	146

При рассмотрении характера изменения растворимости синтезированных соединений в хлороформе можно предположить, что, несмотря на имеющиеся центры специфической сольватации, они, по-видимому, стерически экранированы от взаимодействия с молекулой хлороформа. Наибольшей растворимостью в хлороформе обладает тетра-3-(4-метоксифенокси)фталоцианин меди. Процесс растворения соединений эндотермичен, происходит разупорядочивание системы, что сопровождается ростом энтропии растворения от *пара*-к *мета*-и *орто*-положению метоксигруппы в фрагменте фенола.

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ BODIPY С ПРОТЯЖЕННЫМИ АЛИФАТИЧЕСКИМИ ФРАГМЕНТАМИ В МЕЗО-ПОЛОЖЕНИИ ДИПИРРИНОВОГО ОСТОВА

Борфторидные комплексы дипирролилметенов (BODIPY) за счет интенсивных хромофорных и флуоресцентных свойств, хемо- и фотостабильности, а также простоты модификаций структуры обладают высоким практическим потенциалом. Производные BODIPY зарекомендовали себя в качестве высокоточных флуоресцентных сенсоров pH среды, температуры, вязкости и других параметров микроокружения. Исследования микропараметров среды в практических условиях: в условиях ограниченной растворимости и высоких градиентов концентраций аналитов, неизбежно сопровождаются процессами агрегации. Совокупность прикладных характеристик бордипирринов делает их перспективными модельными системами для исследования фундаментальных принципов влияния процессов агрегации на спектральные характеристики флуоресцентных молекулярных сенсоров [1, 2].

В работе представлены результаты синтеза ряда флуорофоров класса BODIPY с одним и двумя протяженными алифатическими фрагментами, с целью получения молекул, предорганизованных к образованию супрамолекулярных систем в растворах и на поверхности раздела фаз. Альдегиды для проведения реакции конденсации соответствующих дипирринов были получены по реакции Вильямсона (Рис. 1).

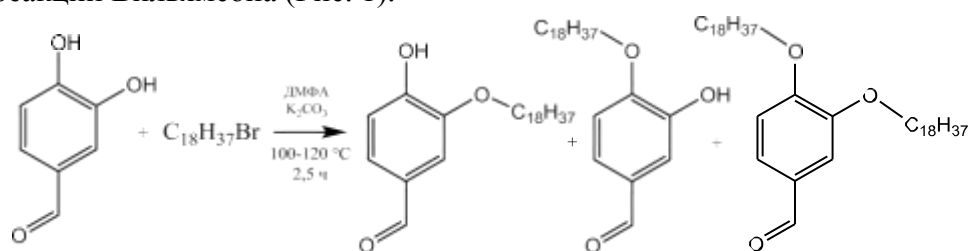


Рисунок 1 – Схема синтеза ароматических альдегидов

Синтез целевых структур BODIPY с протяженными алифатическими фрагментами проводился в три последовательные стадии (Рис. 2).

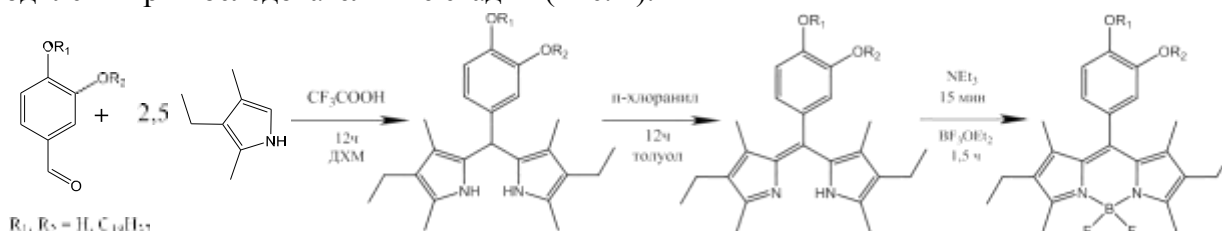


Рисунок 2 – Стадии синтеза производных BODIPY

Соединения были успешно выделены и идентифицированы полным набором физико-химических методов. В работе установлено, что ультразвуковая обработка реакционной смеси на стадии комплексообразования приводит к существенному увеличению выхода целевого продукта реакции.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 22-73-10167).

[1] Usoltsev S.D., Raitman O.A., Shokurov A.V., Marfin Y.S., *J. Mol. Liq.*, 2023, **375**, 121380. DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121380

[2] Usoltsev S., Shagurin A., Marfin Y., *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, **23**(18), 10955. DOI: 10.3390/ijms231810955

М.В. ТУРЧЕНКО, Ю.Е. ЛЕБЕДЕВА, А.В. БУТУЗОВ, К.И. СВЕТОГОРОВ, М.Л. ВАГАНОВА,
А.С. ЧАЙНИКОВА
НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, Москва, Россия

ПОЛУЧЕНИЕ ВЫСОКОПЛОТНОЙ АЛЮМООКСИДНОЙ КЕРАМИКИ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ СТЕРЕОЛИТОГРАФИИ

В настоящее время одним из самых перспективных и активно развивающихся направлений современной промышленности для получения керамических изделий сложной формы, являются аддитивные технологии (АТ). Они позволяют частично или полностью исключить механическую обработку из цикла производства, что невозможно при изготовлении керамических изделий традиционными методами [1, 2].

Одним из перспективных методов керамического аддитивного производства (АП) является лазерная стереолитография (SLA), которая представляет собой послойное отверждение керамической пасты под воздействием ультрафиолетового излучения (УФ) по заданной траектории. К достоинствам данного метода относят: высокую точность и свободу печати, снижение трудоемкости процесса до 30%, коэффициент использования материала до 98 % [3].

В данной работе исследование направлено на изучение свойств керамических образцов, полученных методом лазерной стереолитографии из алюмооксидной керамической пасты.

Разработана высоконаполненная алюмооксидная керамическая паста и получена керамика из нее методом лазерной стереолитографии (SLA). Разработанная паста имеет наполнение более 80 мас. %, что позволяет получать методом лазерной стереолитографии высокоплотные сложно-профильные изделия, характеризующиеся свойствами на уровне лучших аналогов конструкционного назначения, получаемых традиционными методами: плотность 3,6–3,9 г/см³, прочность при изгибе ≥ 300 МПа.

В НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ организован участок полного цикла получения керамики методом лазерной стереолитографии. На рисунке 1 приведены примеры изделий, полученных методом лазерной стереолитографии из высокоплотной керамики на основе оксида алюминия.



Рисунок 1 – Примеры изделий из керамики на основе оксида алюминия, полученных методом лазерной стереолитографии из керамической пасты разработки НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ

- [1] Черепанова М. В., Сквородников П. В., Хазеев А. А. *Научный альманах*. 2018, (10-2), 73–76. DOI: 10.17117/na.2018.10.02.073
- [2] Рогова А. Н., Чувикина М.С., Беляков А.В., Вартанян М.А., Адршина Е.А. *Успехи в химии и химической технологии*. 2020, **34**(5 (228)), 83–85.
- [3] Zhang K., Xie C., Wang G., He R., Ding G., Wang M., Dai D., Fang D. *Ceram. Int*. 2019, **45**(1), 203-208. DOI: 10.1016/j.ceramint.2018.09.152.

УПРАВЛЯЕМАЯ ПОТОКОМ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ РЕШЕТКА

В работе предложена жидкокристаллическая (ЖК) поляризационная дифракционная решетка, в которой управление оптическими характеристиками проходящего света происходит за счет подачи на слой ЖК осциллирующего перепада давления, вызывающего сдвиговое течение. Для создания дифракционной картины (Рис. 1, а) и ориентации молекул ЖК на одной из подложек ячейки предложено использование фотопрофилированного полимера PAZO [1, 2].

Представлены и описаны экспериментальная методика и соответствующая экспериментальная установка, основанная на контроле значения перепада давления, а также фиксации изменения интенсивности прошедшего через слой ЖК света в главном и первом максимумах дифракции (Рис. 2, б).

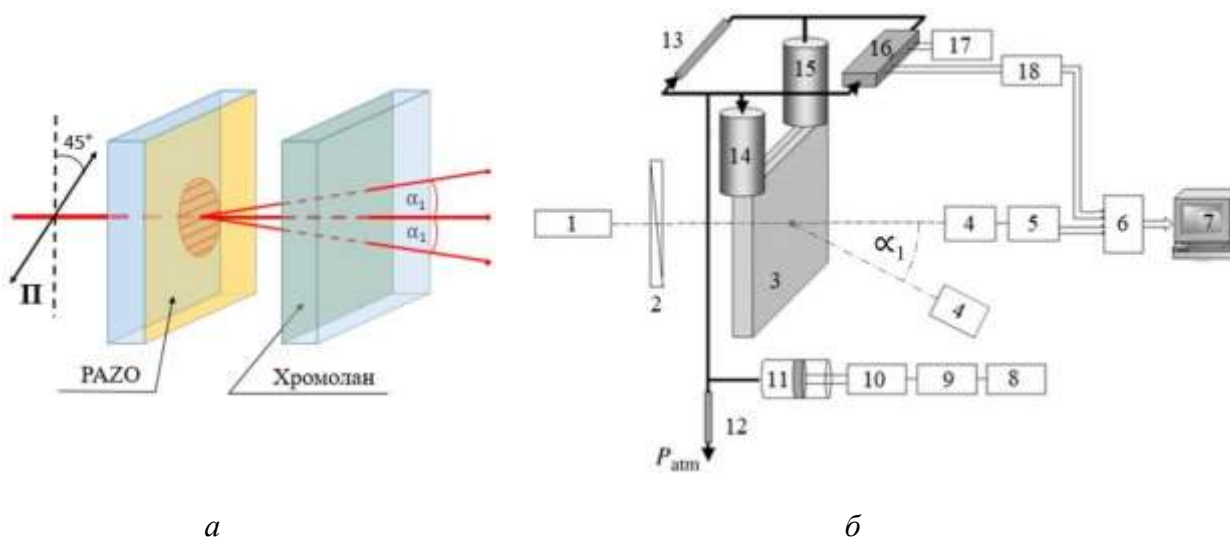


Рисунок 1 – Схематическое изображение наблюдаемой дифракционной картины при прохождении света через фотоиндуцированный рельеф (а). Блок-схема экспериментальной установки (б)

Получены данные о значении изменения интенсивности дифрагированного света от частоты и амплитуды перепада давления, а также от глубины рельефа на ограничивающей подложке.

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (Грант № FSPZ-2023-0004).

[1] D.V. Shmeliova et al, *Symmetry*, 2023, **15**(3), 722 (19 p.). DOI: 10.3390/sym15030722

[2] N.S. Yadavalli et al, *App. Phys. Lett.*, 2014, **105**, 051601-5 DOI: 10.1063/1.4891615

А.Г. ШАТИЛО¹, А.А. НАБАСОВ¹, Н.Е. ГАЛАНИН¹, С.Д. УСОЛЬЦЕВ^{1,2}, Ю.С. МАРФИН^{1,2}¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия²Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОЛИЧЕСТВА И ПРИРОДЫ ГАЛОГЕНОВЫХ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ 3-(ХИНОЛИН-2-ИЛМЕТИЛЕН)ИЗОИНДОЛИН-1-ОНА НА ЕГО СПЕКТРАЛЬНЫЕ И АГРЕГАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Одним из новых перспективных классов высокофлуоресцентных комплексов бора(III) являются борфторидные комплексы 3-(хинолин-2-илметилден) изоиндолин-1-она.

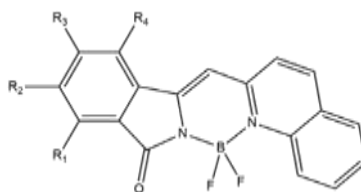


Рисунок 1 – Объекты исследования: Q: $R_1=R_2=R_3=R_4=H$, QF4: $R_1=R_2=R_3=R_4=F$, QCl4: $R_1=R_2=R_3=R_4=Cl$, QBr2: $R_1=R_4=H$, $R_2=R_3=Br$, Qt-Bu: $R_1=R_3=R_4=H$, $R_2=t-Bu$, Q3Cl: $R_1=R_2=R_4=H$, $R_3=Cl$, Q4Cl: $R_1=R_2=R_3=H$, $R_4=Cl$

Соединения данного класса обладают уникальными фотофизическими характеристиками, в частности – высокими квантовыми выходами флуоресценции и коэффициентами молярной экстинкции, а также просты в синтетическом получении [1].

Как для любого малоизученного класса соединений, критическим пунктом исследований является выявление взаимосвязи структура – свойство для установления возможных направлений дериватизации. В работе исследовано влияние галогеновых заместителей (фтор, хлор, бром) на спектральные и агрегационные характеристики соединений. Для 7 производных 3-(хинолин-2-илметилден)изоиндолин-1-она исследован сольватохромный эффект и установлено влияние состава бинарных систем растворителей (ацетонитрил – вода и диметилсульфоксид – вода) на спектральные свойства для определения различий в протекании процесса агрегации. Было выявлено, что в исследованном ряду соединений агрегационные характеристики в значимой степени различаются. Кроме того, на протекание процесса агрегации оказывает влияние и выбор бинарной смеси: в системе ацетонитрил – вода, флуоресценция тушится на протяжении всего процесса, в то время как в системе диметилсульфоксид – вода, увеличение доли воды до начала процесса агрегации вызывает разгорание флуоресценции.

Установлено, что пороговое значение концентрации воды в бинарной системе, провоцирующее агрегационные эффекты, увеличивается в последовательности QCl4 < QBr2 = QF4 < Q = Qt-Bu = Q3Cl = Q4Cl в смеси ацетонитрил – вода и в последовательности QBr2 = QCl4 < QF4 < Qt-Bu = Q3Cl = Q4Cl < Q в смеси диметилсульфоксид – вода. Соединение QCl4 является перспективным сенсором воды в обсужденных органических растворителях. Наибольшей агрегационной устойчивостью, ассоциируемой с применимостью в биовизуализации, обладает соединение без галогеновых заместителей. Кроме того, флуоресценция незамещенного 3-(хинолин-2-илметилден) изоиндолин-1-она также в наименьшей степени тушится при полной агрегации, это говорит о его наибольшем в исследованном ряду соединений потенциале в области материаловедения для фотовольтаики.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 22-73-10167).

[1] А.А. Набасов, А.И. Коптяев, С.Д. Усольцев, Т.А. Румянцева, Н.Е. Галанин, *Макрогетероциклы*, 2022, 15(2), 128–132. DOI:10.6060/mhc224262g

А.С. ШЕРУДИЛЛО, Л.А. АНТИНА, М.Б. БЕРЕЗИН, Е.В. АНТИНА
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ АГРЕГАЦИЯ ДИМЕРНЫХ BODIPY ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ В РАСТВОРАХ И ПЛЕНКАХ ХИТОЗАНА

Общепринятым способом получения фотосенсибилизаторов (ФС) на основе BODIPY люминофоров является введение в их молекулы «тяжелых» атомов, чаще всего галогенов (иод, бром). Действие «тяжелого» атома основано на увеличении эффективности спин-орбитального взаимодействия и интеркомбинационной конверсии в триплетное состояние молекул люминофоров. Но в последние годы все больше возрастает интерес к “heavy-atom-free” BODIPY ФС, менее токсичным и более простым в получении. Это, в первую очередь, соединения, содержащие две дипиррометеновые субъединицы. Некоторые BODIPY димеры, благодаря особенностям молекулярной структуры и процессов в возбужденном состоянии, способны генерировать активные формы кислорода даже в отсутствии «тяжелых» атомов и, кроме того, наделены рядом уникальных свойств, включая экситонные взаимодействия, чувствительность флуоресценции и фотосенсибилизации к природе окружающей среды, что позволяет рекомендовать их в качестве кандидатов как для флуоресцентной диагностики, так и для терапии. Тем не менее, применение BODIPY ФС в биологических системах ограничивается их гидрофобностью и склонностью к формированию агрегатов в водных средах.

В работе изложены результаты изучения спектрально-люминесцентных свойств и молекулярной агрегации димерных BODIPY ФС **1-4** (Рис.1), в молекулах которых хромофорные фрагменты соединены ковалентной связью по различным положениям пирролов. Подобраны условия получения пленок хитозан/BODIPY и проанализировано влияние биополимера на агрегацию красителей в водно-органических смесях и полимерных композитах.

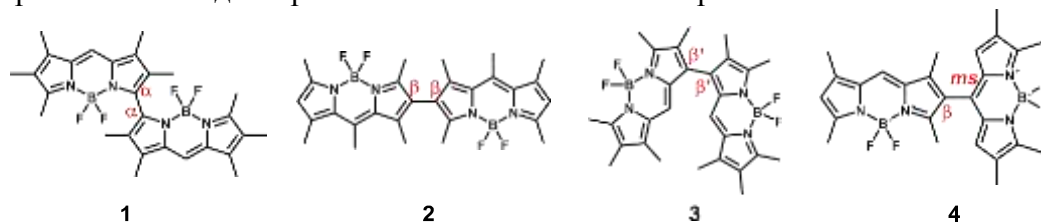


Рисунок 1 – Структурные формулы димерных BODIPY люминофоров

Соединения **1-4** обладают интенсивными хромофорными свойствами, молярные коэффициенты поглощения достигают $229087 \text{ M}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ (для соединения **2** в бензоле), а также высокой чувствительностью флуоресценции к полярности среды (квантовый выход флуоресценции составляет 91 % в неполярных растворителях, таких как циклогексан и бензол, и снижается до 1% в полярных средах, таких как ДМФА и ДМСО). Максимальные значения квантового выхода генерации синглетного кислорода, равные 90 % и 88 %, наблюдаются для соединений **1** и **4** в растворителях средней полярности (например, в ТГФ). Агрегация молекул **1-4** в смеси ТГФ/вода с высоким содержанием воды (95 %) зависит от их структуры: красители **1** и **2** образуют нефлуоресцирующие агрегаты; для **3** и **4** наблюдается появление в спектрах флуоресценции батохромно смещенных полос, что свидетельствует о формировании J-агрегатов. Полимерные пленки хитозан/BODIPY ФС получали из смесей ТГФ/вода и ДМСО/вода с различным содержанием компонентов. Установлено, что добавки полимера способствуют дезагрегации молекул ФС и сохранению их практически значимых характеристик в составе композитов, которые в настоящее время апробируются как агенты антимикробной фотодинамической терапии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-20149, <https://rscf.ru/project/25-23-20149/>

O.A.H. HASOON^{1,2}, O.N. SALMAN³, V.N. MIRONYUK², T.Y. KARATYSHOVA²,
E.G. GLUKHOVSKOY²

¹Ministry of Electricity of Iraq, Baghdad, Iraq

²Saratov State University named after N.G. Chernyshevsky, Saratov, Russia

³Technological University, Baghdad, Iraq

CONDUCTIVITY OF STRUCTURES CONTAINING CdSe LAYERS PRODUCED BY LANGMUIR-BLODGETT METHOD

The promising future of photovoltaics and solar cells based on combinations of inorganic and organic materials have attracted widespread interest due to their high potential for inexpensive production and the simplicity of the technological process. Layering quantum dots (QD) with organic dyes enables the use of flexible substrates in photovoltaic devices, greatly expanding the applications and range of properties of these structures.

In this work, CdSe nanoparticles (NP) were obtained by pulsed laser ablation in liquid method. The Nd:YAG laser was used, emitting pulses of 700 mJ with a wavelength of 1064 nm; the pulse width was 10 ns, the repetition rate of the pulse series was 2 Hz.

The size of the NPs was determined to be $D = 40\text{--}110$ nm using the dynamic light scattering method. Peaks in the luminescence spectra of QDs in solution were detected at 440 and 470 nm. This corresponds to approximate values of the quantum dot diameters equal to $D = 2.6$ and 2.8 nm. The difference in the obtained values may be due to the processes of strong aggregation of nanoparticles, which do not have a stabilizing organic shell.

A suspension of CdSe NP was used to form Langmuir layers on the surface of water. The optimal volume of work solution aliquot for the formation of stable Langmuir layers of CdSe NP was experimentally found. The effect of arachidic acid additives on the compression isotherms of the Langmuir layers of CdSe NP was studied.

Langmuir layers were transferred onto silicon and glass substrates using the Langmuir-Schaefer method. Multilayer CdSe NP films were studied using various methods.

Luminescence spectra of the films detected at 531 and 700 nm.

The topography of the obtained films was studied using scanning electron microscopy (SEM) and atomic force microscopy.

SEM study of the morphology of single- and multilayer CdSe NP films showed that the continuity of the substrate surface coating with the multilayer film is 100%, although when applying single layers, some unevenness was observed due to partial aggregation of NPs. Also the distribution of Cd and Se atoms over the surface is continuous, but not uniform enough. Typical aggregate sizes range noticed from 200 nm and more.

The size of CdSe NPs found by dynamic light scattering and SEM methods correlates with the results of studies of the luminescence spectra of the films.

For the CdSe NPs solution, the calculated value of the energy gap is 2.3 eV, i.e., in the process of synthesis by the laser ablation method, NPs with typical semiconductor properties were obtained.

The conductivity of the sandwich structures was studied using scanning tunneling microscopy (STM) and by probe station with an analyzer of semiconductor devices – Agilent B1500A.

Based on the current-voltage dependence of the light and dark obtained by STM, the spectra of the electronic states were calculated.

CVC measured under illumination differ from those measured in the dark by appr. 5 times for negative voltage and by 13.5 times for positive voltage values.

The studies showed the effect CdSe NP stabilised with arachidic acid on the overall conductivity.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

А.И. АЛЕКСАНДРОВ¹, Т.В. ПАШКОВА^{1,2}, М.С. ГРУЗДЕВ³, Н.С. ВОРОНОВ¹¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия²Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России, Иваново, Россия³Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ЦИНКОВОГО КОМПЛЕКСА С ПОЛИ(ПРОПИЛЕНИМИНОВЫМ) ЛИГАНДОМ

Настоящая работа посвящена исследованию структуры цинкового комплекса, лигандом которого является поли(пропилениминовый) дендимер 2-ой генерации, структурная формула комплекса представлена на рисунке 1. Незатухающий интерес к исследованию дендримерных структур определяется их прикладными перспективами и, в частности, возможностью реализации накопительного эффекта, зависящего как от природы периферийных фрагментов, так и от степени молекулярной разветвленности. В исследовании затрагивается ряд таких вопросов как молекулярная конформация, способность кристаллизоваться, жидкокристаллический полиморфизм и структурные превращения при фазовых переходах. Работу можно рассматривать как продолжение ранее проведенных исследований упомянутого дендримера 2-ой генерации (D2), проявляющего жидкокристаллический полиморфизм, но не способного к кристаллизации [1].

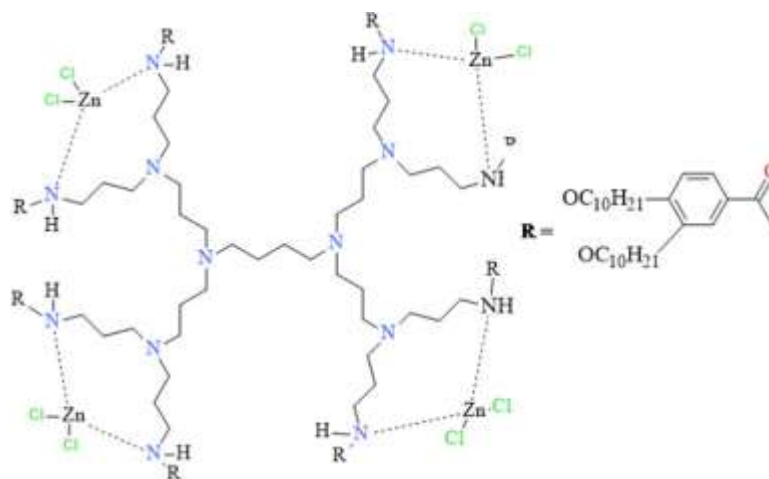


Рисунок 1 – Структурная формула цинкового комплекса

Структурное исследование комплекса цинка проводилось в фильтрованном (Mn-фильтр) FeK α излучении с использованием малоугловой рентгеновской установки КРМ-1. Результаты исследования показали, что в температурном интервале от комнатной температуры до температуры плавления (141 °C) комплекс находится в кристаллическом состоянии, структура которого (по результатам индифференциальной дифрактограмм) соответствует моноклинной кристаллической решетке. Ожидаемого перехода в жидкокристаллическую фазу не обнаружено. Тип решетки сохраняется и после фазового перехода (55 °C по данным ДТА), в результате которого наблюдаются некоторые изменения в угловых положениях регистрируемых дифракционных максимумов и, как следствие, в рассчитанных периодах. Анализ полученных структурных данных показал, что комплекс цинка имеет веерообразную конформацию, аналогичную конформации дендримера D2. Такая конформация определяет основной структурный мотив в укладке молекул комплекса в элементарной ячейке – поворот и сдвиг соседних молекул на половину их длины, что соответствует пространственной группе P2₁.

[1] А.И. Александров, Т.В. Пашкова, М.С. Груздев // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2021, 21(3), 84–91. DOI: 10.18083/LCAppl.2021.3.84

С.Д. БУГАКОВ¹, О.Н. КАРПОВ^{1,2}, Я.И. ДЕРИКОВ^{1,2}, А.С. МЕРЕКАЛОВ², Л.А. ГОЛОВАНЬ¹¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия

СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЕ УПРАВЛЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/ZnS В ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

Благодаря своим уникальным оптическим свойствам полупроводниковые квантовые точки (КТ) широко известны и все чаще находят применение в самых различных областях науки и техники. Помимо возможности управления длинами волн поглощения и люминесценции путем варьирования размера наночастиц, КТ CdSe/ZnS обладают высоким квантовым выходом и стабильностью. Внедрение таких КТ в жидкокристаллические среды является перспективным материалом с точки зрения возможности объединения свойств люминесцирующих частиц и жидкокристаллической матрицы.

На начальном этапе в данной работе проведен синтез КТ CdSe/ZnS одностадийным высокотемпературным методом с последующей модификацией поверхности наночастиц путем замещения исходного лиганда-стабилизатора на 2-((2'-хлоро-4''-гексил-[1,1':4',1''-терфинил]-4-ил)окси)пропановую кислоту. Благодаря чему полученные КТ хорошо растворяются в среде мезогенных молекул выше температуры фазового перехода в изотропную жидкость. Однако при понижении температуры и переходе системы в ЖК фазу, КТ стремятся покинуть организованную фазу, что приводит к их агрегации.

В настоящей работе была использована нематическая ЖК матрица НМ₂, представлявшая собой смесь 4'-пентил-4-цианобифенила (48,5 мас. %), 4'-пропокси-4-цианобифенила (18,2 мас. %), 4'-амилокси-4-цианобифенила (17 мас. %), 4-этоксифенилового эфира транс-4-бутилциклогексанкарбоновой кислоты (10 мас. %) и 4-циано - 4'-дифенилового эфира 4-транс-бутилциклогексанкарбоновой кислоты (6,3 мас. %). Для перевода матрицы из ЖК состояния в изотроп под действием света при температуре ниже температуры изотропизации смесей были использованы азобензолсодержащие молекулы (азохромофоры) CN-AX1 и CN-AX2, имеющие протяженную и разветвленную структуру, способные к фотоизомеризации путем E-Z перехода.

Добавление CN-AX2 незначительно снижает температуру просветления смеси, в то время как CN-AX1 значительно повышает. Полученные температуры просветления составили: нематическая матрица НМ₂ – 64 °С, НМ₂+AX1 10 мас. % – 82 °С, НМ₂+AX2 10 мас. % – 58 °С. Добавление квантовых точек в композитные смеси в количестве до 1 масс. % приводит к незначительному снижению температуры фазового перехода в изотроп, что может быть связано, со структурными особенностями органических лигандов на поверхности КТ.

Проведен анализ распределения КТ CdSe/ZnS в нематической матрице НМ₂ в ЖК и изотропной фазе, полученной при облучении светом и фотоизомеризации азокромофоров с использованием люминесцентного микроскопа. Показана возможность управлять размерами агрегатов наночастиц в ЖК матрице при облучении светом.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-19-00246).
<https://rscf.ru/project/23-19-00246/>*

Н.И. ГИРИЧЕВА, Е.А. ЛАПЫКИНА, А.А. КОНОВАЛОВА, А.И. СМЕРНОВА, О.Б. АКОПОВА,
Н.В. БУМБИНА, Н.В. ЖАРНИКОВА, Н.В. УСОЛЬЦЕВА
НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

РОЛЬ КОНФОРМАЦИОННОГО РАЗНООБРАЗИЯ В РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ 1,2,4,5-ТЕТРА(5-(4'-МЕТОКСИФЕНИЛ-(1,3,4-ОКСАДИАЗОЛ-2-ИЛ)-БЕНЗОЛА

В последнее время возрос интерес к соединениям, содержащим в своей структуре фрагмент оксадиазола. Такие соединения имеют широкий спектр применения: от промышленного использования в качестве светодиодов и ингибиторов коррозии до медицинской химии.

В данной работе с использованием квантово-химических расчетов (Gaussian09, DFT/B97D/6-311G**) выполнено моделирование промежуточной стадии синтеза производного пиромеллитовой кислоты с фрагментами оксадиазола (рис. 1). В ходе реакции происходит образование неустойчивого промежуточного продукта **3**, который при дальнейшем нагреве и удалении из зоны реакции азота превращается в конечный продукт **4**. В ходе расчетов определено строение и термодинамические характеристики возможных конформеров молекул **3** и **4**. Рассчитаны термодинамические характеристики ΔH°_{298} и ΔG°_{298} этой стадии реакции.

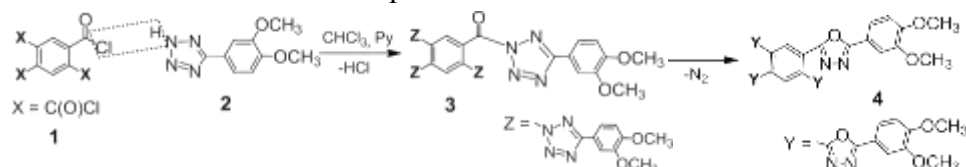


Рисунок 1 – Схема синтеза производного пиромеллитовой кислоты с фрагментами оксадиазола

Установлено, что молекулы **3** и **4** имеют по шесть конформеров, значительно отличающихся направлением поворота тетразольных или оксадиазольных фрагментов относительно центрального фенила, что приводит к большому различию в геометрическом строении и в энергиях конформеров. Важно подчеркнуть, что из наиболее энергетически выгодного конформера молекулы **3** невозможно получить наиболее энергетически выгодный конформер **4**. Это связано с существенной перестройкой остова исходной структуры, сопровождающейся выделением молекул N_2 из тетразольного цикла при образовании оксадиазольного цикла. На рис. 2 показан высокоэнергетический конформер молекулы **3**, из которого образуется наиболее энергетически выгодный конформер молекулы **4**.

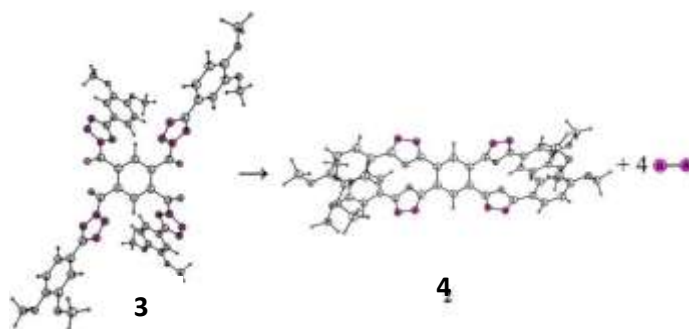


Рисунок 2 – Схема промежуточной стадии синтеза производного пиромеллитовой кислоты **4** с выделением N_2 при образовании оксадиазольных фрагментов

Как видно, формы соответствующих конформеров резко отличаются ориентацией четырех заместителей относительно центрального фенила. Возможно, что рассмотренная стадия синтеза соединения **4** может быть затруднена из-за различий в конформационных свойствах **3** и **4** и их энергетических несоответствий.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2023-0009).

ПОЛИИНЫ И КУМУЛЕНА: МОЛЕКУЛЫ X-CCCC-X И ИХ КАТИОНЫ

Известно, что состояние линейной углеродной цепи в соединениях типа X-[C₁CC...CCC_n]-X зависит не только от числа атомов углерода n, но и от природы концевых групп X. Нами на примере двух молекул (CH₃)₂C-CCCC-C(CH₃)₂, (1) и Ph-CCCC-Ph, (2) и их положительных ионов [1]⁺ и [2]⁺ методом DFT/B3LYP/сс-pVTZ рассмотрено состояние углеродной линейной цепи -CCCC-. Для этого выполнена геометрическая оптимизация структур 1, 2, [1]⁺ и [2]⁺ (Рис. 1) и NBO анализ, который позволил определить электронную конфигурацию связей (Табл. 1).

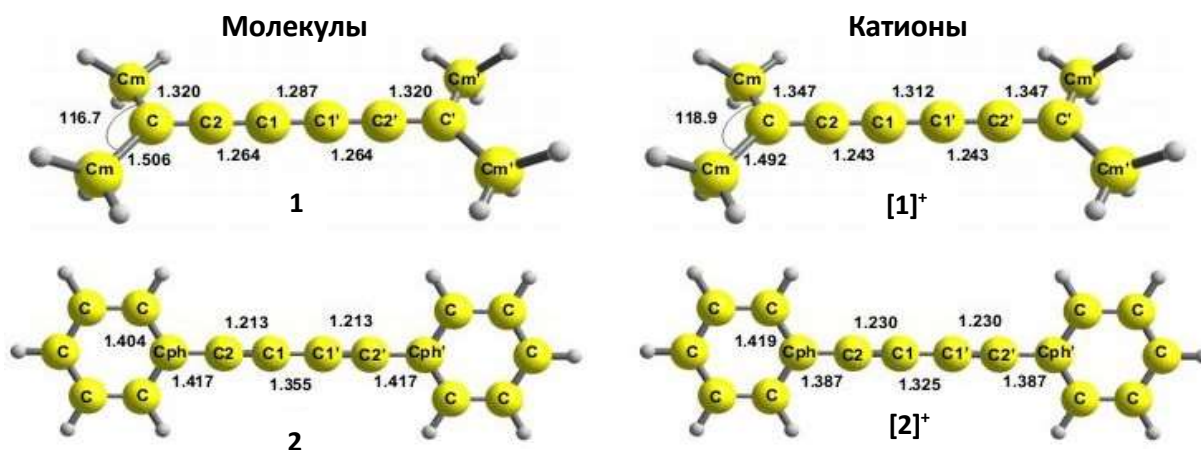
Рисунок 1 – Геометрическое строение молекул X-CCCC-X и катионов (X: =C(CH₃)₂, -Ph)

Таблица 1. Электронные конфигурации* связей в линейных фрагментах молекул и катионов

	C2-X	C1-C2	C1-C1'	Структурная формула углеродной цепи
Молекулы				
1 =C(CH ₃) ₂	$\sigma^2 \pi_x^{1.82}$	$\sigma^2 \pi_y^{1.87}$	$\sigma^2 \pi_x^{1.78}$	C(sp ²)=C2=C1=C1'=C2'=C(sp ²)
2 -Ph	σ^2	$\sigma^2 \pi_x^{1.91} \pi_y^{1.00}$	σ^2	C _{Ph} (sp ²)-C2≡C1-C1'≡C2'-C' _{Ph} (sp ²)
Катионы				
[1]⁺	$\sigma^2 \pi_x^{0.88}$	$\sigma^2 \pi_y^{1.86} \pi_x^{0.83}$	$\sigma^2 \pi_x^{0.91}$	C(sp ²)≡C2≡C1≡C1'≡C2'≡C'(sp ²)
[2]⁺	$\sigma^2 \pi_x^{0.74}$	$\sigma^2 \pi_y^{1.90} \pi_x^{0.93}$	$\sigma^2 \pi_x^{0.78}$	C _{Ph} (sp ²)≡C2≡C1≡C1'≡C2'≡C' _{Ph} (sp ²)

*Нецелочисленность индексов заселенности натуральных орбиталей (NBO) отражает влияние донорно-акцепторных взаимодействий между NBO в молекуле или ионе.

Видно, что длина и электронная плотность связей C-C изменяется в зависимости от вида концевых групп. В молекуле 1 все связи C-C можно рассматривать, как $\sigma\pi$ -двойные связи (кумуляновый характер цепи), в молекуле 2 происходит чередование одинарных σ -связей с $\sigma\pi^2$ -тройными связями (полииновая цепь). При удалении электрона происходит существенное изменение характеристик связей C-C, причем в ионах [1]⁺ и [2]⁺ электронная структура углеродных цепей оказывается практически одинаковой. Следовательно, что удаление электрона из соединения с полииновой углеродной цепью приводит к изменению его природы в направлении кумуленовой цепи, тогда как удаление электрона из соединения с кумуленовой углеродной цепью приводит к изменению его природы в направлении полииновой цепи. Эти выводы, вероятно, применимы и к другим соединениям с линейной углеродной цепью и различными концевыми группами.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2023-0009).

С.А. ДОГАДАЕВА¹, П.О. САМОХВАЛОВА^{1,2}, Л.А. АНТИНА¹, А.А. КСЕНОФОНТОВ¹,
А.А. КАЛЯГИН¹, М.Б. БЕРЕЗИН¹, Е.В. АНТИНА¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

²Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

НОВАЯ СТРАТЕГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭФФЕКТИВНЫХ “HEAVY-АТОМ-FREE” ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ BODIPY ЛЮМИНОФОРОВ

Бор(III)дипиррометеновые красители (BODIPY) – высокоэффективные биосовместимые люминофоры, перспективные для применения в качестве фотосенсибилизаторов в фотодинамической терапии (ФДТ) и в различных других биомедицинских приложениях. Общеизвестными считаются приемы усиления эффективности интеркомбинационной конверсии за счет включения в структуру молекул «тяжелых» атомов галогенов (Br, I), металлов (Pd, Pt), олигомеризации (донорно-акцепторные диады, ортогональные бихромофоры). Такие приемы серьезно усложняют синтез фотосенсибилизаторов (ФС), а в ряде случаев повышают их цитотоксичность или ухудшают мембранную проницаемость из-за увеличения размеров молекул. В ходе наших исследований впервые была обнаружена эффективная генерация синглетного кислорода свободным от «тяжелых» атомов классическим тетраметил-BODIPY с α -незамещенными позициями (Рис. 1), что позволяет позиционировать его как потенциальный “heavy-atom-free” ФС.

В связи с этим, **цель работы** заключалась в выяснении природы возбужденного состояния “heavy-atom-free” BODIPY ФС по результатам квантово-химических расчетов и сравнительного анализа фотофизических характеристик тетраметил-BODIPY **1-3** с незамещенными $\alpha\alpha$ -, $\beta\beta$ - или $\beta'\beta'$ -позициями (Рис. 1, а).

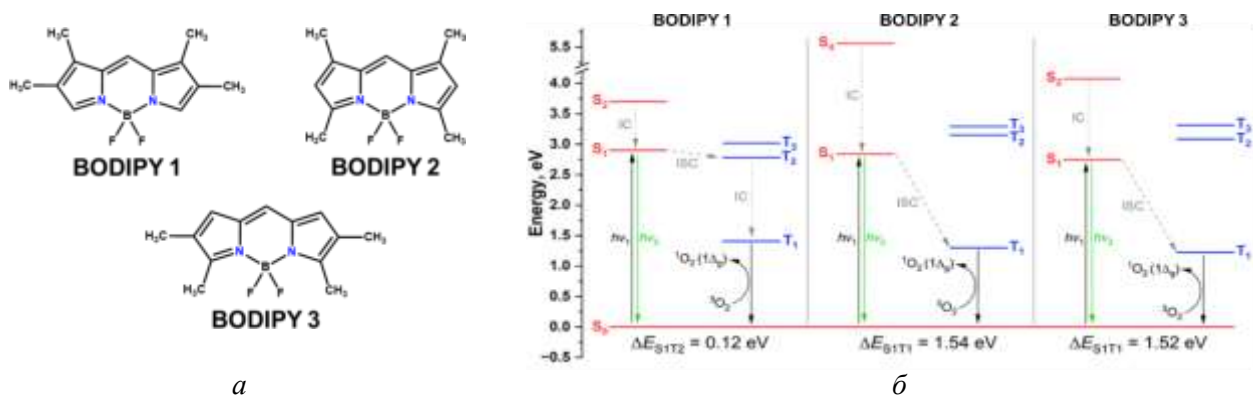


Рисунок 1 – Структурные формулы BODIPY **1-3** (а) и диаграммы Яблонского для BODIPY **1-3** (IC – внутренняя конверсия, ISC – интеркомбинационная конверсия; этанол) (б)

Результаты квантово-химических расчетов показали, что только для BODIPY **1** характерно наличие двух триплетных состояний – T_2 и T_1 , лежащих ниже по энергии относительно S_1 -состояния, т.е. незамещенные α -положения BODIPY ядра способствуют стабилизации T_2 -состояния в сравнении с S_1 -состоянием (Рис. 1, б). Причем для BODIPY **1** значение энергетического зазора между состояниями S_1 и T_2 (ΔE_{S1T2}) составило 0.17 эВ, что согласуется с высокими квантовыми выходами генерации 1O_2 (до 40 % в толуоле, этаноле и ацетонитриле). Высокие энергии $\Delta E_{S1T1} \sim 1.5$ эВ получены для BODIPY **2** и **3**, что свидетельствуют о крайне низкой эффективности ISC и согласуется с практически нулевой генерацией 1O_2 в сочетании с близкой к 100% флуоресценцией, обнаруженных для них в изученных средах.

Полученные результаты позволяют предложить BODIPY **1** в качестве потенциального фотосенсибилизатора для ФДТ и АФДТ. В настоящее время для биомедицинских приложений разрабатываются водорастворимые формы BODIPY **1** и полимерные материалы на его основе.

ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ ФЕНОКСИЗАМЕЩЕННЫЕ ТРЕХЗВЕННЫЕ ПРОДУКТЫ И ИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ С ГАЛЛИЕМ

Молекулярный дизайн потенциальных лекарственных препаратов – чрезвычайно интересная область химии. Одним из способов разработки новых молекул, обладающих свойствами лекарств, является сочетание фрагмента-фармакофора (3,5-диамино-1,2,4-триазола) с феноксизамещенными фталонитрилами, а также введение в молекулу различных биогенных металлов. Исследования в области синтеза триазолсодержащих соединений являются актуальными, перспективными и представляют несомненный теоретический и практический интерес. Поэтому целью данной работы является синтез триазолсодержащих трехзвенных продуктов и их металлокомплексов с галлием на основе фталонитрилов с 2-карбоксифенокси- или 4-циклогексилфенокси группами, а также оценка их антибактериальной активности с помощью прогнозирования спектра биологической активности и диск-диффузионным методом.

С использованием программного обеспечения Way 2 Drug (универсальный математический алгоритм установления зависимостей «структура – активность») был проведен компьютерный скрининг биологической активности триазолсодержащих феноксизамещенных трехзвенных продуктов и их металлокомплексов с галлием. Обнаружено, что указанные соединения могут быть активны по отношению к грамположительным кокковидным бактериям, т.е. могут потенциально применяться для лечения различных гнойно-воспалительных заболеваний.

На первом этапе синтезировали феноксизамещенные трехзвенные продукты, для чего соответствующие феноксизамещенные фталонитрилы добавляли к раствору метилата натрия в метаноле при 20-25 °С, перемешивали в течение 2 часов, затем вносили хлорид аммония и гуаназол, нагревали до 40 °С, выдерживали 8 часов, охлаждали и выливали в воду. Выпавший осадок отфильтровывали, промывали водой, эфиром и высушивали на воздухе. Синтез металлокомплексов ТЗП с галлием проводили нагреванием смеси, состоящей из полученных на первом этапе ТЗП и ацетата Ga в 2-этоксигэтанол. Продукт выделяли выливанием реакционной массы в воду, после чего выпавший осадок отфильтровывали, промывали водой, метанолом, ацетоном, хлороформом и высушивали.

Все полученные соединения охарактеризованы данными ^1H ЯМР и ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии MALDI-TOF.

Оценку правильности прогноза спектров антибактериальной активности, проводили на базе Областного противотуберкулезного диспансера имени М.Б. Стоюнина на трех штаммах бактерий: *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, *Staphylococcus Epidermidis*. Обнаружено, что именно феноксизамещенные металлокомплексы ТЗП с галлием проявляют антибактериальную активность по отношению к вышеуказанным тестовым штаммам, при этом к *Staphylococcus Epidermidis* в большей степени, что хорошо согласуется с данными компьютерного скрининга биологической активности.

Таким образом, в работе синтезированы феноксизамещенные триазолсодержащие трехзвенные продукты и их металлокомплексы с галлием, проведена очистка и идентификация указанных соединений, а также компьютерное моделирование их спектра биологической активности, результаты которого были подтверждены данными диск-диффузионного эксперимента.

Исследование выполнено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ и при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, тема № FZZW-2023-0009.

Е.А. ЛАПЫКИНА, Н.И. ГИРИЧЕВА, А.М. САЛЬКОВА, А.И. СМИРНОВА, О.Б. АКОПОВА,
Н.В. УСОЛЬЦЕВА

НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ОСОБЕННОСТИ РЕАКЦИИ СИНТЕЗА 1,4-бис(3,4-ДИМЕТОКСИФЕНИЛОКСАДИАЗОЛА)-ТЕРЕФТАЛЕВОЙ КИСЛОТЫ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Соединения с фрагментами оксадиазола, проявляющие высокую термическую стабильность, обладающие флуоресцентными свойствами и способностью к образованию тонких пленок, используются в светодиодах (OLED) в качестве фоточувствительных материалов и фотоэлектрических элементов.

В данной работе выполнено квантово-химическое моделирование (КХ) (DFT/B97D/6-311G**) реакции синтеза 1,4-бис(3,4-диметоксифенилоксадиазола)-терефталевой кислоты (**4**) из 3,4-диметоксифенилтетразола (**1**) и терефталойлхлорида (**2**) (Рис. 1). Реакция протекает через стадию образования промежуточного продукта – 1,4-бис(3,4-диметоксифенилтетразола)-терефталевой кислоты (**3**).

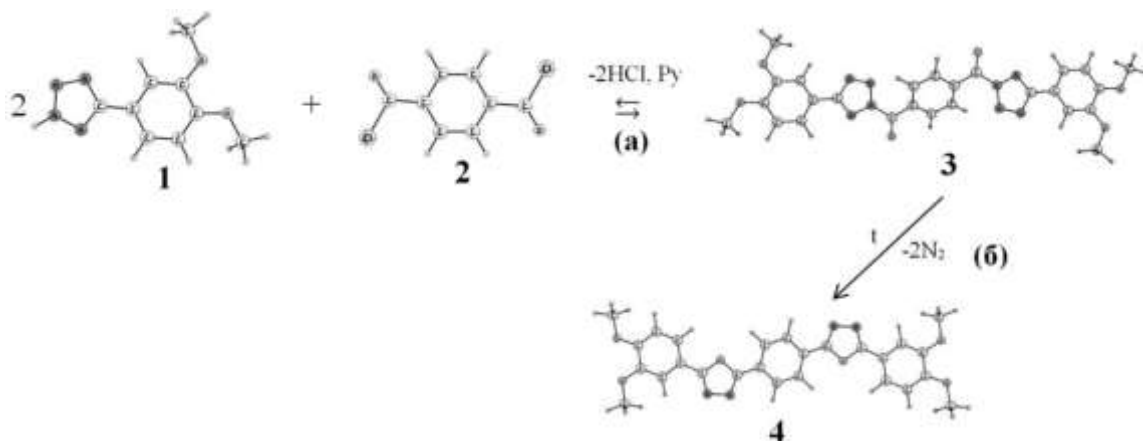


Рисунок 1 – Схема синтеза производного терефталевой кислоты с фрагментами оксадиазола

В процессе КХ моделирования определено геометрическое строение и термодинамические функции всех участников процесса в газовой фазе и в среде растворителя (пиридина, Py). Рассчитаны термохимические характеристики реакций $1+2 \leftrightarrow 3$ (а) и $3 \rightarrow 4$ (б). Величина $\Delta_r G^\circ_{298}(a) \approx 0$, что соответствует получению высокоэнергетического соединения **3**. При КХ моделировании реакции (а) показано, что пиридин может выступать не только в качестве растворителя, но и в качестве участника процесса. В ходе стадии (б) при элиминировании молекулы N_2 из **3** должна происходить существенная перестройка остова **3**, которая может включать несколько стадий. Поэтому выполнено моделирование предполагаемых переходных состояний. Показано, что энергетических затрат (до 14 ккал/моль) требует стадия, в которой происходит ослабление связей между двумя фрагментами N-N и C-N-N тетразольного цикла. Поэтому данная стадия протекает при повышенной температуре. На следующем этапе происходит удаление образовавшейся молекулы N_2 и поворот фрагмента Ph-CON относительно центрального остова, способствующий возникновению связи C-O и замыканию оксадиазольного пятичленного цикла. В результате реакций (а) и (б) могут образоваться два конформера молекул **3** и **4** с близкими термодинамическими характеристиками. Величина $\Delta_r G^\circ_{298}(b) \approx -40$ ккал/моль, что свидетельствует о существенно большей устойчивости и термической стабильности соединений с оксадиазольными фрагментами по сравнению с соединениями, содержащими тетразольные фрагменты. Следовательно, соединение **3** должно отсутствовать в целевом продукте **4**.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2023-0009).

К.С. НИКИТИН^{1,2}, О.В. МАЛЫЦЕВА¹, Н.Ж. МАМАРДАШВИЛИ¹, Н.В. УСОЛЬЦЕВА²¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕТЕЛЬ ГИСТЕРЕЗИСА В ЦИКЛАХ КОМПРЕССИИ-ДЕКОМПРЕССИИ ПЛАВАЮЩЕГО СЛОЯ Zn(II)-ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНА

Изучение процесса формирования плавающих слоев неклассических амфифилов является актуальным направлением исследований при создании тонкопленочных материалов для различных задач науки и техники. Особый интерес представляют металлопорфирины, обладающие уникальными физико-химическими свойствами. Данное исследование было направлено на определение взаимосвязи между химическим строением Zn(II)-тетрафенилпорфирина и термодинамическими характеристиками петель гистерезиса в трех последовательных циклах компрессии-декомпрессии.

Zn(II)-тетрафенилпорфирин был синтезирован по известной методике [1]. Циклы компрессии-декомпрессии получали на установке LT-211 фирмы ОДО «Микротестмашины» (Гомель, Беларусь) при температуре $20 \pm 0.1^\circ\text{C}$. После нанесения раствора плавающий слой выдерживали в течение 15 минут. Скорость компрессии/декомпрессии составляла $55 \text{ см}^2/\text{мин}$. Термодинамические характеристики петель гистерезиса были рассчитаны согласно методике, описанной в [2].

В ходе исследования трех последовательных циклов компрессии-декомпрессии было установлено, что π -А изотермы демонстрируют смещение в сторону больших значений средней площади на молекулу, а площадь петли гистерезиса увеличивается примерно в 3 раза при сравнении первого цикла с третьим. При этом значение сжимаемости слоя уменьшается от 319 мН до 229 мН , что свидетельствует об увеличении жесткости образующихся структур. Известно, что площадь петли гистерезиса соответствует затраченной энергии на создание надмолекулярной организации плавающего слоя, поэтому наблюдаемое уменьшение сжимаемости хорошо согласуется с ростом площади петли гистерезиса. Особый интерес для понимания процесса формирования плавающего слоя Zn(II)-тетрафенилпорфирина представляют полученные термодинамические характеристики циклов компрессии-декомпрессии. Отрицательное значение свободной энергии гистерезиса (ΔG^{hys}) указывает на сохранение энергии в цикле. Значительное изменение величины ΔG^{hys} (от -0.287 кДж/моль до -0.936 кДж/моль) свидетельствует о необратимых изменениях в надмолекулярной организации плавающего слоя порфирина. Наблюдаемые изменения ΔG^{hys} можно объяснить, анализируя значения двумерного коэффициента активности (γ). При небольшом поверхностном давлении ($\pi_i = 0.1 \text{ мН/м}$) величина γ_i остается практически постоянной и равной 1.04 в каждом цикле, что указывает на слабые межмолекулярные взаимодействия. Однако при повышении давления до $\pi_f = 0.7 \text{ мН/м}$ значение γ_f монотонно возрастает в каждом последующем цикле (1.27, 1.30 и 1.32). Это указывает на усиление межмолекулярных взаимодействий от цикла к циклу, что находит отражение в уменьшении сжимаемости слоя и смещении π -А изотерм в сторону больших значений средней площади на молекулу.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственных заданий ИХР РАН (№ 122040500043-7), НИИ наноматериалов ИвГУ (№ FZZM-2023-0009) с привлечением оборудования Верхневолжского регионального центра физико-химических исследований.

[1] O.V. Maltceva, K.S. Nikitin, A.V. Kazak, N.Zh. Mamardashvili, N.V. Usol'tseva, *Liq. Cryst. and their Appl.*, 2023, **23**(2), 29–37. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.2.29

[2] E.J. Grasso, R.G. Oliveira, B. Maggio, *Journal of Colloid and Interface Science*, 2016, **464**, 264–276. DOI: 10.1016/j.jcis.2015.11.034

Т.В. ПАШКОВА^{1,2}, А.И. АЛЕКСАНДРОВ¹, Д.С. АННИКОВ¹¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия²Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России, Иваново, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ГРЕБНЕОБРАЗНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СОПОЛИМЕРОВ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ХИРАЛЬНОГО БИФЕНИЛА

Бурное развитие микро- и оптоэлектроники вызвало пристальный интерес к созданию и исследованию тонких анизотропных пленок на основе жидкокристаллических материалов, преимуществами которых являются простота их получения и уникальные физические свойства. В частности, тонкие полимерные пленки на основе сегнетоэлектрических жидких кристаллов могут быть использованы в качестве активных элементов пироустройств [1, 2]. В большинстве случаев важное значение имеет высокая ориентация молекул, образующих пленочную структуру. Целью работы являлось выяснение влияния на степень совершенства структуры тонких пленок химического строения макромолекул гребнеобразных сополимеров, а именно, содержания хиральных мезогенных групп (поскольку именно с их присутствием связано появление сегнетоэлектрических свойств).

В работе методом спектрального анализа исследована структура пленок жидкокристаллических гребнеобразных сополимеров, боковыми группами которых являются ахиральные фенилбензоаты и хиральные бифенилы с различным содержанием хирального компонента (CPL0, CPL25, CPL50 и CPL75, (цифры указывают процентное содержание хирального бифенила в сополимере)).

Пленки формировали на кварцевых подложках осаждением из раствора в хлороформе. Для получения ориентированных плёнок использовалось ориентирующее влияние поверхности. Придание поверхности ориентирующих свойств осуществлялось методом механического текстурирования (метод Шатлена). Спектры поглощения растворов исследуемых соединений и пленок на их основе получены на спектрофотометре СФ-56.

Структура сополимеров ранее была исследована рентгенографически. В результате проведенных исследований было установлено, что во всех исследованных сополимерах образуются смектические фазы с полярными слоями, что говорит о возможности возникновения сегнетоэлектрических свойств у этих соединений [1]. Известно, что пленки жидкокристаллических полимеров наследуют структуру объемных фаз и, следовательно, их свойства. В ходе спектральных исследований растворов сополимеров установлено, что растворы всех исследованных сополимеров независимо от концентрации и содержания хирального компонента оказались ассоциированными. При этом увеличение содержания хирального бифенила в сополимере уменьшает степень ассоциации раствора. Анализ поляризационных спектров пленок на основе исследуемых сополимеров позволил установить, что все полученные используемым в работе способом пленки имеют высокую степень ориентации (80–88%), которая увеличивается с увеличением доли хирального бифенила в сополимере. Расчеты показывают, что бифенильные фрагменты обладают гораздо большими дипольными моментами по сравнению ахиральными фенилбензоатами. По-видимому, причиной формирования более совершенных пленок из сополимеров с высоким содержанием хирального компонента является сильное диполь-дипольное взаимодействие между бифенильными фрагментами макромолекул, сводящее на нет стерические затруднения в упаковке бифенильных фрагментов по сравнению с фенилбензоатами.

[1] А.И. Александров, Т.В. Пашкова, *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2013, **23**(4), 82–93. DOI: 10.18083/LCAppl.2023.4.82

[2] Т.В. Пашкова, А.И. Александров, *Сб. материалов Всероссийской научно-практической конференции «Естественные науки и пожаробезопасность: проблемы и перспективы исследований»*, Иваново, 21 марта 2024 г. С. 86–90.

П.С. СЕМЕНОВА, М.С. ФЕДОРОВ

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

МЕЗОМОРФНЫЕ СВОЙСТВА 4(3'-ГИДРОКСИОКТИЛОКСИ)-4''-ЦИАНОАЗОБЕНЗОЛА И ПЕРСПЕКТИВА ЕГО ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ЖК

Использование методов супрамолекулярной химии при создании новых ЖК позволяет просто и без больших затрат получать мезоморфные системы с заданными характеристиками. Широкую перспективу для применения в данном случае имеют молекулярные компоненты, сочетающие в себе донорные и акцепторные группы для формирования Н-связей.

В данной работе исследуются мезоморфные свойства молекулы 4(3'-гидроксиоктилокси)-4''-цианоазобензола, которую мы планируем использовать в качестве компонента супрамолекулярных комплексов с производными пиридина. Мезоморфные свойства исследуемого соединения устанавливались в рамках эксперимента с помощью поляризационного микроскопа Nikon Eclipse Si-POL, оснащенного термостоликом, позволяющим вести наблюдение вплоть до 350 °С, а также поддерживать постоянную температуру (точность измерения 0,1 °С). На рисунке представлены текстуры исследуемого соединения в поляризационном микроскопе при различных температурах.

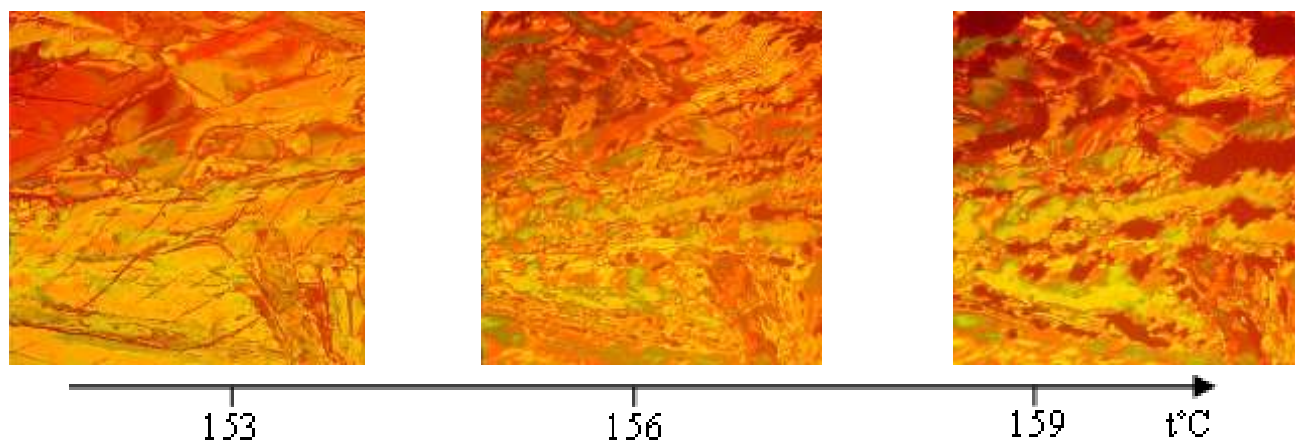


Рисунок 1 – Переход из кристаллической фазы в жидкокристаллическую фазу

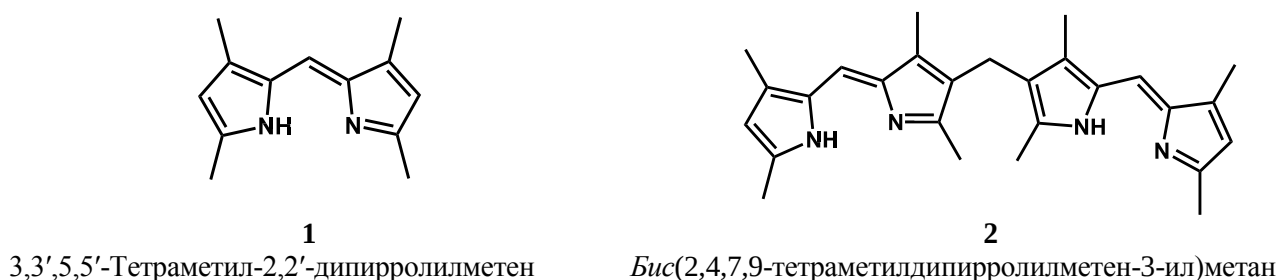
Видно, что при нагревании кристаллическая структура переходит в жидкокристаллическую, которую можно идентифицировать как веерную смектическую А фазу (SmA), она возникает в температурном интервале 156–159 °С, таким образом, исследуемое соединение является мезогенным, и данные этой работы будут использованы для анализа изменения ЖК свойств при включении этого компонента в супрамолекулярную систему.

А.С. СОРОКИНА^{1,2}, Н.А. БУМАГИНА², Е.В. АНТИНА²¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

АНАЛИЗ ИОНОВ Zn^{2+} В БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВКАХ С ПРИМЕНЕНИЕМ ДИПИРРОМЕТЕНОВЫХ СЕНСОРОВ

Цинк является микроэлементом, необходимым для протекания широкого спектра биопроцессов в живых организмах. Среднее совокупное содержание цинка в организме человека составляет около 2-3 г. Он распределен практически по всем тканям организма, где находится преимущественно в связанном с белками виде. Хотя сбалансированный рацион питания обеспечивает достаточное поступление Zn^{2+} в организм, дефицит цинка возникает достаточно часто. Для коррекции дефицита Zn^{2+} применяют различные цинксодержащие биологически активные добавки (БАД) [1]. Поэтому крайне важен контроль содержания ионов Zn^{2+} в таких препаратах. Новые возможности в контроле состава, качества и безопасности лекарственных средств открывает применение аналитических методик с использованием высокочувствительных и селективных аналитических агентов.

В докладе представлены первые результаты исследования лигандов 3,3',5,5'-тетраметил-2,2'-дипирролилметена (HL) **1** и бис(2,4,7,9-тетраметилдипирролилметен-3-ил)метана (H_2L) **2** (Рис. 1) в качестве хромо-флуорогенных сенсоров для анализа ионов Zn^{2+} в цинксодержащих биологически-активных добавках (БАД) в виде капсул или леденцов, содержащих цитрата цинка в качестве активного вещества.

Рисунок 1 – Структурные формулы соединений **1** и **2**

В докладе рассмотрены методики приготовления, анализа и возможности детектирования ионов Zn^{2+} в образцах БАД с применением дипиррометенового и бис(дипиррометенового) сенсоров подтверждали результатами сравнения оптических откликов в спектрах поглощения и флуоресценции растворов лигандов **1** и **2** в ДМФА до и после добавления к ним водного экстракта цинксодержащего препарата. Действие сенсоров основано на реакции комплексообразования соответствующего лиганда с солью $Zn(II)$ в полученной водно-органической смеси ДМФА/вода (9:1, об./об.). При добавлении к раствору индивидуального сенсора в ДМФА водного экстракта цинксодержащего препарата в спектрах поглощения и флуоресценции наблюдается 2-3 кратный гиперхромный эффект и красный (51–58 нм) сдвиг интенсивной полосы поглощения, а также 37–45-кратное увеличение интенсивности флуоресценции в зависимости от структуры сенсора. Полученные результаты свидетельствует о высокой чувствительности разработанных сенсоров в анализе содержания цинка в БАД.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00058, <https://rscf.ru/project/25-23-00058/>

[1] А.А. Кирилук. Журнал «Рецепт», 2021, **24**(4), 558–574. DOI: 10.34883/PI.2021.24.4.012

В.В. ТЕРЕНТЬЕВ¹, С.М. ХАЧАТРЯН¹, О.Б. АКОПОВА²¹Верхневолжский государственный агробиотехнологический университет, Иваново, Россия²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

УЛУЧШЕНИЕ УСЛОВИЙ СМАЗЫВАНИЯ СТАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ ПУТЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ ИНДУСТРИАЛЬНОГО МАСЛА ЛАУРАТОМ МЕДИ

Долговечность большинства деталей машин во многом определяется условиями их эксплуатации. Одной из основных причин возникновения деградационного отказа детали является ее износ. Одним из эффективных путей снижения износа трущихся деталей в эксплуатационных условиях является применение качественных смазочных материалов, позволяющих образовывать на поверхности детали прочные смазочные пленки. Для обеспечения надежного разделения контактирующих поверхностей и реализации при работе процесса гидродинамического смазывания товарные смазочные материалы дополнительно легируют различными присадками и наполнителями. Ранее проведенные исследования различными авторами, свидетельствуют о перспективности легирования пластичных смазочных материалов различными жидкокристаллическими (ЖК) соединениями. В настоящее время проводится поиск эффективных ЖК соединений, позволяющих при установившихся и неустановившихся режимах работы машин обеспечивать минимальную скорость изнашивания, имея высокие антифрикционные свойства смазки. Исследования, проведенные ранее авторами, показали эффективность применения в качестве антифрикционной и противоизносной присадки к пластичным смазочным материалам на углеводородной основе продукта синтеза лауриновой кислоты с гидроксидом меди.

Целью данной работы является определение эффективности применения лаурата меди в качестве противоизносной и антифрикционной присадки к индустриальным маслам. Присадка вводилась в индустриальное масло в процентном соотношении от 0,25 до 1,0 мас. %. Эффективность определялась по оценке триботехнических параметров на машине трения СМТ-1 при переменных нагрузках на образцы (вращающийся ролик-сталь 45 ГОСТ 1050-2013, неподвижный шар – сталь ШХ15 ГОСТ 801-78). Лаурат меди вводился в индустриальное масло И-20А в виде порошка, далее осуществлялось смешивание мешалкой в течение 15 мин. Далее проводился цикл триботехнических испытаний. Нагрузка на образцы изменялась ступенчато от 200 Н до 800 Н, частота вращения ролика – 500 мин⁻¹. Опыты проводились с 5 кратным повтором.

Согласно полученным данным, можно отметить снижение момента трения между образцами от 1,1 до 1,9 раз (в зависимости от нагрузки на образцы) за счет улучшения условий смазывания поверхностей и образования на поверхности трения ориентированных маслянистых слоев слоистой структуры.

Образование слоев маслянистой пленки, прочно адсорбированной в зоне трения способствует эффективному разделению поверхностей и предотвращению их контакта в процессе работы, что приводит к реализации устойчивого режима как гидродинамического, так и граничного смазывания. Это в свою очередь способствует снижению изнашивания как неподвижного, так и подвижного образца. Износ шара в процессе исследований после введения присадки снижается 1,10-1,86 раза, а износ ролика – в 1,28-2 раза. Температура в зоне трения уменьшается в среднем на 10 %, нагрузка задира повышается в 1,2 раза.

Таким образом, можно отметить эффективность применения лаурата меди-мезогена в качестве трибоактивной присадки к индустриальным маслам, позволяющего существенно улучшать условия смазывания стальных поверхностей, понижая при этом энергетику процесса трения в виде снижения температурной напряженности, способствуя уменьшению интенсивности изнашивания поверхностей и повышению в дальнейшем их долговечности.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (FZZM-2023-0009).

А.А. ФИЛИППОВ, А.Д. ГРИШИНА, М.С. ФЕДОРОВ, Е.А. ЛАПЫКИНА
Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕЗОМОРФНЫХ СВОЙСТВ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ *para*-ФЕНОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

Супрамолекулярный подход получил широкое распространение в области создания новых мезоморфных систем благодаря простоте использования и возможности получать новые разнообразные ЖК материалы. В основном в таких материалах реализуются процессы самоорганизации за счет межмолекулярных водородных связей. Установление влияния типа межмолекулярных взаимодействий и проявляемых свойств является важнейшей задачей в данной области исследований. Органические сульфокислоты обладают способностью образовывать водородные связи, например, с производными пиридина, что делает их идеальной основой для создания жидкокристаллических материалов, а установление зависимостей между строением и мезоморфными свойствами таких систем позволит создавать материалы с заданными характеристиками.

В данной работе исследуется система на основе *para*-фенолсульфоновой кислоты (коммерческий препарат, Absc) и пиридинового эфира 4-*n*-додецилоксибензойной кислоты (синтезирован в ИГХТУ). Предварительно была выполнена серия квантово-химических расчетов (DFT: B3LYP и B97D), основной задачей которых являлось установление структурных единиц исследуемой системы. Оказалось, что наиболее вероятным результатом самоорганизации в системе состава 1:1 являются Н-комплексы с водородной связью между сульфокислотной группой одной молекулы и пиридиновым фрагментом другой. При этом результаты расчетов, а также анализ кристаллографической базы данных позволяют ожидать, что в таких комплексах будет реализовываться перенос протона на пиридиновый фрагмент. Геометрическая форма комплексов отличается от стержнеобразной и может быть сведена к изогнутой или бананообразной форме.

Получение предполагаемых Н-комплексов (Рис. 1, а) состава 1:1 проводилось путем полного растворения кристаллических компонентов, взятых в стехиометрическом соотношении, в этаноле при нагревании (55 °С) и интенсивном перемешивании. После чего растворитель был удален, а полученные кристаллы вакуумировались до постоянной массы. Идентификацию мезофаз проводили с помощью поляризационного микроскопа «Nikon Eclipse Ci-Pol» с камерой и термостолком, который работает в широком диапазоне температур (до 350 °С) и длительное время поддерживает заданную температуру. Точность измерения температуры составляет ± 0.1 °С.

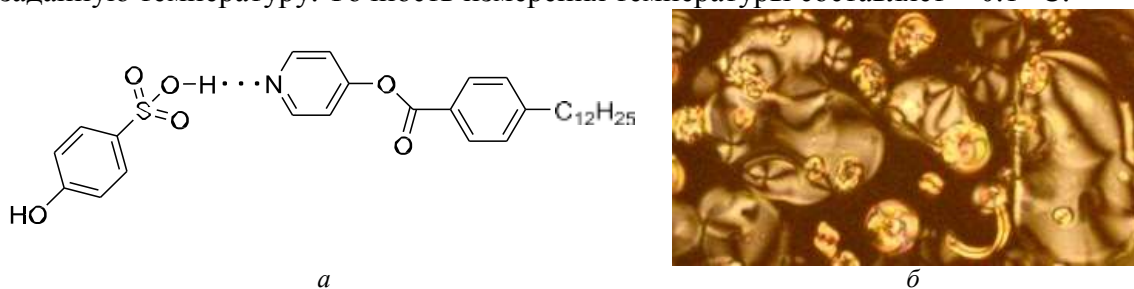


Рисунок 1 – а) Структурная формула предполагаемых Н-комплексов; б) шликер текстура мезофазы (85 °С)

Результаты эксперимента позволяют заключить, что полученная система, структурными единицами которой предположительно являются Н-комплексы, обладает мезоморфными свойствами в широком интервале температур (65–90 °С). Исследуемый образец имеет шликер текстуру, характерную для нематической мезофазы. Отметим, что в аналогичных системах на основе 4-алкилбензолсульфокислот индуцируется смектическая мезофаза [1].

[1] М.С. Федоров, А.А. Филиппов, С.А. Сырбу, М.Р. Киселев, *Изв. вузов. Химия и хим. технология*, 2024, **67**(12), 64–72. DOI: 10.6060/ivkkt.20246712.7094

Ю.А. ШИЛОВА^{1,2}, А.С. ШЕРУДИЛЛО¹, Л.А. АНТИНА¹, М.Б. БЕРЕЗИН¹, Е.В. АНТИНА¹¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия²Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВАНИЛИН-СТИРИЛ-ЗАМЕЩЕННОГО NIR-BODIPY ЛЮМИНОФОРА И ПЕРСПЕКТИВЫ ЕГО ПРИМЕНЕНИЯ

Бор(III)дипиррометенаты (BODIPY) за последние годы стали наиболее популярными люминофорами благодаря универсальной возможности настройки их практически значимых характеристик (спектрального диапазона, эффективности поглощения и флуоресценции) под различные практические задачи. Большинство классических монохроматических алкил-, арилзамещенных BODIPY люминофоров интенсивно поглощают и флуоресцируют в зеленой области видимого спектрального диапазона. В настоящее время активно проводятся работы по подбору оптимальной стратегии функционализации BODIPY люминофоров с целью смещения их рабочего спектрального диапазона в ближнюю к ИК область спектра для применения в биомедицине. Основным синтетическим приемом является расширение хромофорной π -системы за счет введения в молекулярный остов BODIPY красителей определенных типов функциональных заместителей, например, стирильных групп. Синтетическая схема введения стирильных заместителей в альфа-положении молекул BODIPY достаточно проста. Изменение числа стирильных заместителей и их функционализация по ароматическому кольцу позволяют тонко настраивать величину спектрального сдвига, эффективность хромофорных и флуоресцентных характеристик BODIPY, а также их чувствительность к природе среды.

В связи с этим, цель настоящего исследования заключалась в синтезе ванилин-стирил-BODIPY красителя (Рис. 1) и исследовании его хромофорных и флуоресцентных характеристик в органических растворителях различной природы.

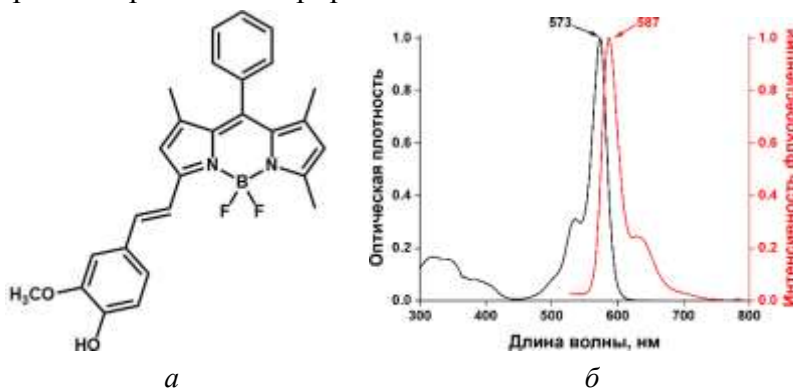


Рисунок 1 – BF₂-ms-фенил-5-[2-(4-гидрокси-3-метоксифенил)этиленил]-3,3',5'-триметил-2,2'-дипиррометен (ванилин-стирил-BODIPY) (а) и его спектры поглощения (черный) и флуоресценции (красный) в хлороформе (б)

Анализ спектральных характеристик ванилин-стирил-BODIPY показал, что краситель обладает интенсивным поглощением: значения $\lg \epsilon$ характеристической полосы достигают 4.90 - 4.98 в изученных растворителях. Максимумы интенсивной полосы поглощения и испускания люминофора лежат в диапазонах 569–580 и 585–595 нм соответственно. Ванилин-стирил-BODIPY краситель демонстрирует эффективную флуоресценцию во всех исследованных растворителях различной полярности, о чем свидетельствуют большие значения квантовых выходов флуоресценции (от 70 до 85 %). Полученные результаты показали перспективы исследования возможностей практического применения моно- и ди-ванилин-стирил-производных BODIPY, в том числе получения водорастворимых форм путем их инкапсуляции в мицеллы плуроников или ПЭГ, для применения в роли биовизуализаторов в медицинских приложениях.

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

ФОТООТВЕРЖДАЕМОЕ ПОЛИМЕРНОЕ ПРЕДКЕРАМИЧЕСКОЕ СВЯЗУЮЩЕЕ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ОКСИДНОЙ КЕРАМИКИ МЕТОДОМ ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ СВЕТОМ (DLP)

Постоянно растущий спрос на все более эффективные и мощные двигатели для самолетов и космических аппаратов, которые должны работать в экстремальных условиях эксплуатации, таких как высокие температуры, высокие скорости и агрессивные среды, стимулирует разработку новых передовых керамических материалов и технологий их изготовления. В последнее время одними из наиболее интенсивно развивающихся направлений изготовления керамических материалов являются технологии, которые совмещают методы аддитивного производства и получения керамики из кремнийорганических полимеров-прекурсоров. Данное сочетание технологий позволяет получать керамические изделия сложной конфигурации с высоким разрешением печати, а также путем подбора состава и молекулярной структуры предкерамического полимера контролировать в большом диапазоне микроструктуру и общий состав керамического материала.

В данной работе исследование было направлено на разработку фотоотверждаемого полимерного предкерамического связующего с целью повышения плотности оксидной керамики, полученной из высоконаполненных керамических суспензий технологией цифровой обработки светом (DLP). В ходе работы было разработано фотоотверждаемое полимерное предкерамическое связующее на основе триметилпропантриакрилата (ТМПТА), кремнийорганической смолы, содержащей винильные группы, и фотоинициатора 819. Динамическая вязкость разработанного связующего составляла 2,2 – 2,42 Па·с в диапазоне скорости сдвига 0,1 – 100 с⁻¹ и температуре 25 °С, что позволяло осуществить 3D-печать без применения ракеля. Синтез «зеленого» образца проводили на DLP-принтере путем формирования слоев толщиной 50 мкм при энергии УФ-излучения 50 мДж/см² и длине волны 405 нм. В результате 3D-печати из фотоотверждаемого полимерного предкерамического связующего был получен образец гексагональной структуры с высоким разрешением (рис. 1). Методом ИК-спектроскопии было установлено, что отверждение фотоотверждаемого полимерного предкерамического связующего проходит в основном за счет реакций гомополимеризации молекул ТМПТА, а вклад реакций гетерофункциональной полимеризации был невысоким. В результате пиролиза при 1000 °С в атмосфере воздуха был получен образец состава SiO_{0.99}C_{0.04}P_{0.01} с выходом керамики 33,15 мас. % и линейной усадкой по осям ХУ – 22,5 %, а по оси Z – 23,07 %. В дальнейшем планируется использовать полученное фотоотверждаемое полимерное предкерамическое связующее в работах по разработке высоконаполненных керамических суспензий для получения оксидной керамики с улучшенным комплексом свойств по технологии DLP.

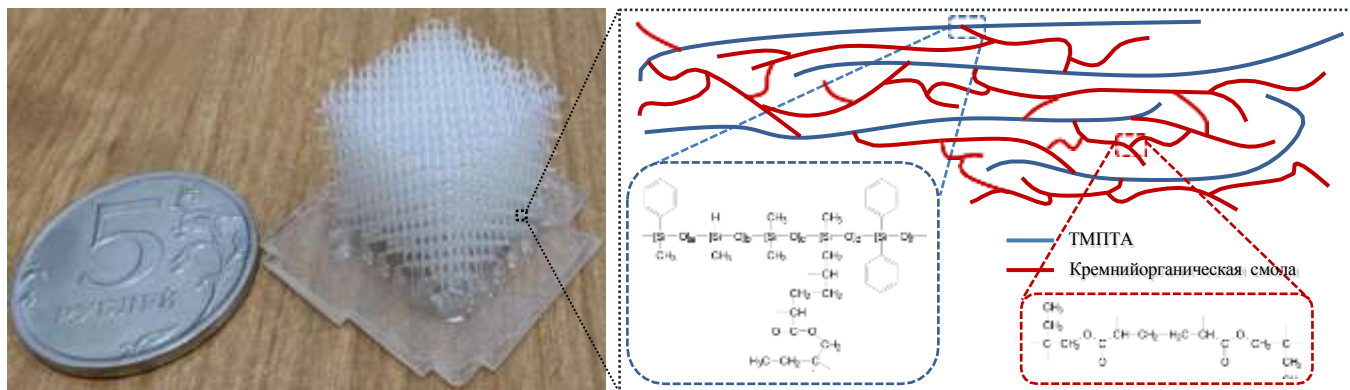


Рисунок 1 – Напечатанный с помощью технологии DLP образец гексагональной структуры из разработанного фотоотверждаемого полимерного предкерамического связующего

А.В. БУТУЗОВ, Ю.Е. ЛЕБЕДЕВА, Е.А. СЕРКОВА, А.В. СЕМИНА, М.В. ТУРЧЕНКО
НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, Москва, Россия

АДДИТИВНОЕ ПОЛУЧЕНИЕ ОБРАЗЦОВ АЛЮМООКСИДНОЙ КЕРАМИКИ ИЗ ВЫСОКОНАПОЛНЕННЫХ КЕРАМИЧЕСКОЙ СУСПЕНЗИИ ТЕХНОЛОГИЕЙ DLP

В настоящее время все более активно развиваются технологии аддитивного производства керамических изделий. Одной из наиболее многообещающих технологий аддитивного производства керамики является технология цифровой обработки светом (DLP). Цифровая обработка светом – это один из методов непрямого аддитивного производства, в котором жидкие фотоотверждаемые композиции селективно и послойно отверждаются (т.е. меняют свое физическое состояние, переходя из жидкого в твердое) в результате светоактивируемой полимеризации под действием УФ-излучения. Данная технология позволяет производить керамические образцы сложной конфигурации с высоким разрешением, относительной плотностью $> 99\%$ и свойствами, сравнимыми со свойствами деталей, полученных традиционными методами.

В данной работе проводились исследования с целью разработки жидкой стабильной высоконаполненной керамической суспензии, а также изучение свойств плотной алюмооксидной керамики, полученной технологией цифровой обработки светом из данной композиции.

В НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ была разработана стабильная высоконаполненная низковязкая керамическая суспензия с содержанием частиц оксида алюминия 56,4 об. % и вязкостью 3,3 Па·с при скорости сдвига 30 с^{-1} и температуре $25\text{ }^{\circ}\text{C}$. Выбранная система диспергаторов в составе светоотверждаемого (мет)акрилатного связующего позволила получить керамические суспензии с содержанием частиц Al_2O_3 на 20 мас. % больше, чем без ее использования. Полученная керамическая суспензия проявляла неньютоновское поведение, характеризующееся снижением вязкости с увеличением скорости сдвига. Такое поведение керамических суспензий является предпочтительным для технологии DLP, так как оно предотвращает седиментацию частиц в фотоотверждаемой керамической суспензии в состоянии покоя и способствует адекватному течению при приложении скорости сдвига. Высокой седиментационно-стабильности удалось достигнуть за счет дефлокуляции наночастиц оксида алюминия и высокой наполненности керамической суспензии, что остановило осаждение тяжелых частиц микронного размера. В ходе работы было установлено, что концентрация диспергирующих добавок влияет не только на стабильность и вязкость керамических суспензий, но и существенно образом оказывает влияние на процессы деламинации и образования трещин на стадиях отмывки и пироллиза «зеленых» керамических образцов.

В результате работы по технологии DLP были получены образцы алюмооксидной керамики (Рис. 1), характеризующиеся следующими свойствами: плотность $3,48\text{ г/см}^3$, пористость 9,38 % и прочность при изгибе 142 – 223 МПа.



Рисунок 1 – Изделия алюмооксидной керамики, полученные по технологии DLP из низковязкой высоконаполненной керамической суспензии

К.А. ГЛИНОВ¹, Я.В. ВЕРЕМЕЙЧИК¹, А.И. ГАЛЕЕВА², Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ²¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград, Россия²Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

ФАЗОВОЕ ПОВЕДЕНИЕ EU(III)-СОДЕРЖАЩИХ МЕЗОФАЗ С ВКЛЮЧЕНИЕМ СУЛЬФОНАМИДНЫХ СТРУКТУР

Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) обладают уникальными физико-химическими характеристиками, которые позволяют применять их в различных областях [1]. На сегодняшний день ЛЖК находят широкое применение в биомедицине в качестве средств адресной доставки лекарственных соединений различной природы. ЛЖК на основе неионогенных сурфактантов способны инкапсулировать лекарственные средства, проходить через мембраны и пролонгировано высвобождать целевые соединения, что повышает их биодоступность в организме. Дополнение ЛЖК-систем ионами ряда Ln(III) позволяет получать комплексные системы с люминесцентными свойствами, что может применяться для визуализации.

Синтезированное ранее новое сульфонамидное соединение бензотиазинового ряда с включением аминокислотного фрагмента проявило антибактериальную активность против *B. Subtilis*. С синтезированным сульфонамидом (Рис. 1) была получена мезогенная система на основе монодецилового эфира декаэтиленгликоля и воды, а также изучено её фазовое поведение [2]. В настоящей работе получены новые лантаноидсодержащие ЛЖК-системы с ионами Eu^{3+} ($\text{C}_{12}\text{EO}_{10}:\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O} / \text{H}_2\text{O} / \text{сульфонамид}$, $\text{C}_{12}\text{EO}_{10}:\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O} = 1:1$ моль). Полученные образцы были изучены методом поляризационной оптической микроскопии и характеризуются гексагональной лиомезофазой (Рис. 2, 3). Температура фазовых переходов составила: $T_{\text{н.ф.п.}} = 54,5^\circ\text{C}$, $T_{\text{к.ф.п.}} = 55,5^\circ\text{C}$.

Таким образом, широкий температурный диапазон существования мезофазы в совокупности с люминесцентными свойствами Eu(III) позволяют применять полученные лиомезофазы в качестве средств визуализации, тераностики и проводить изучение прохождения ЛЖК через мембраны на клеточных культурах *in vitro*.

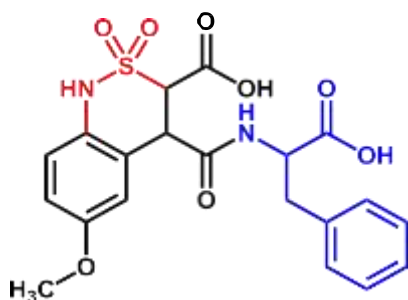


Рисунок 1 – Структура нового сульфонамидного соединения

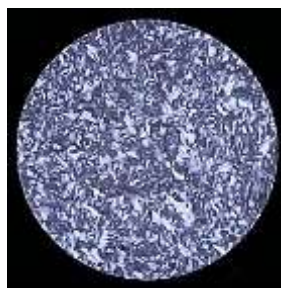


Рисунок 2 – Микрофотография ЛЖК-системы ($\text{C}_{12}\text{EO}_{10}/\text{Eu}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O} / \text{H}_2\text{O} / \text{сульфонамид}$) в поляризованном свете (x100)



Рисунок 3 – Фотография образца ЛЖК-системы

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00 (FZSG-2023-0008).

[1] А.И. Галеева, А.Н. Безруков, А.С. Крупин, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2024, **24**(2), 32–42. DOI: 10.18083/LCAppl.2024.2.32

[2] К. А. Глинов, А. С. Маилов, Я. В. Веремейчик, А. И. Галеева, Ю. Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2024, **24**(3), 14–24. DOI: 10.18083/LCAppl.2024.3.14

ТЕМПЕРАТУРОЗАВИСИМАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ(III)

Люминесцентная термометрия благодаря своим преимуществам является перспективным методом измерения температур для использования в технике, биологии и медицине. Комплексы лантаноидов представляют собой класс молекулярных материалов, которые интенсивно изучаются в этом аспекте в последние годы. Способность некоторых из них изменять люминесцентные характеристики в зависимости от температуры позволяет использовать их в качестве рабочих элементов люминесцентных термометров. В работе предложены термочувствительные материалы на основе мезогенных комплексов Eu(III), полученные путем стеклования из расплава (рис. 1). Благодаря аморфному строению комплексы способны образовывать однородные пленки без кристаллических дефектов.

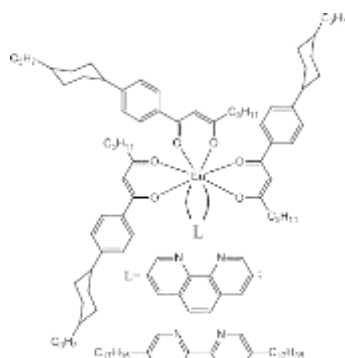


Рисунок 1 – Структура мезогенного (L=bpy₁₇₋₁₇) и немезогенного (L=phen) комплексов Eu(III)

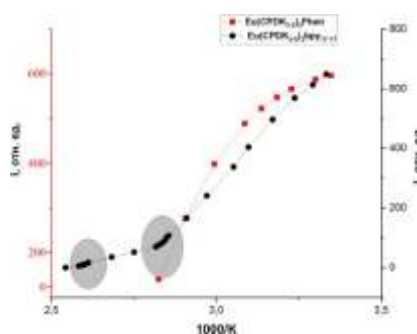


Рисунок 2 – Температурная зависимость интенсивности люминесценции мезогенного (черная кривая), немезогенного (красная кривая) комплексов

Изучено влияние температуры на люминесцентные свойства пленок. Было определено, что пленки на основе ЖК-комплексов Eu(III) проявляют температурную чувствительность люминесценции в более широком интервале температур по сравнению с немезогенным аналогом. Значение относительной чувствительности интенсивности люминесценции ЖК-комплекса составило $10\% \cdot K^{-1}$, что в 2 раза превышает чувствительность немезогенного аналога. Это предположительно обусловлено изменением межмолекулярных взаимодействий и характера взаимной ориентации, в связи с упорядочением молекул в процессе нагревания в ЖК-фазе. Максимальное значение относительной чувствительности времени жизни для пленки ЖК комплекса Eu(III) составил $9,36\% \cdot K^{-1}$ при 352 К. Полученные образцы выдерживают многократные циклы нагрева и охлаждения и являются фотостабильными. Таким образом показано, что жидкокристаллические комплексы Eu(III) могут быть использованы в качестве высокочувствительных термосенсоров, работающих в области физиологических температур.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 20-73-10091.

[1] Ziyatdinova R.M., Knyazev A.A., Sagdeev D.O., Galyametdinov Yu.G., *Supramolecular Materials*, 2025, P. 100098. DOI: 10.1016/j.supmat.2025.100098

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ И МАГНИТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ НА ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ФЕРРОНЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

Одним из важных факторов, стимулирующих исследования жидких кристаллов (ЖК), является создание на их основе перспективных функциональных материалов с модифицированными электрическими, магнитными, механическими и оптическими свойствами [1]. Видоизменение характеристик в таких системах достигается за счет диспергирования в ЖК различных по своим свойствам частиц. Взаимодействие между молекулами ЖК и коллоидными частицами приводит к дополнительным механизмам влияния на ориентационную структуру системы.

В настоящей работе теоретически изучено влияние электрической поляризации жидкокристаллической матрицы и сегрегации диспергированных магнитных частиц на ориентационные переходы в ферронематике (ФН) – гибридном материале, представляющем собой нематический ЖК, функционализированный магнитными наночастицами [2, 3]. Рассмотрен плоский слой ФН с «мягким» гомеотропным типом сцепления между ЖК-матрицей и магнитной подсистемой, помещенный в электрическое и магнитное поля. На границах слоя сцепление молекул ЖК считалось жестким и планарным.

Как известно, поляризация ЖК под действием электрического поля приводит к искажению ориентационной структуры и, как следствие, к неоднородности электрического поля среды [4], а магнитное поле вызывает перераспределение внедренных в ЖК магнитных частиц [2, 5], и, таким образом, оказывает существенное воздействие на переходы между ориентационными фазами ФН. Характер ориентационных переходов из однородной фазы в неоднородную может быть как первого, так и второго рода и зависит от параметра сегрегации [6]. В работе было показано, что эффект электрической поляризации ЖК с учетом магнитной сегрегацией, в дополнение к описанному выше трикритическому поведению ФН, приводит к неоднозначности в уже деформированной области ФН. В неоднородной фазе при сильной анизотропии диэлектрической проницаемости обнаружено скачкообразное изменение ориентационной структуры. При определенных значениях параметра сегрегации и анизотропии диэлектрической проницаемости происходит ориентационный переход по типу фазового перехода второго рода из однородной фазы в слабо неоднородную, за которым следует переход первого рода из слабо неоднородной в сильно неоднородную в пределах возмущенной области. В то же время, по мере уменьшения энергии сцепления магнитных частиц с жидкокристаллической матрицей диапазон существования неоднозначности сужается. Отмечено, что деформация ориентационной структуры ФН в слое ослабевает с увеличением параметра анизотропии диэлектрической проницаемости. Кроме того, были получены пространственные зависимости компонент приведенной намагниченности ФН, их усредненные значения по слою как функции магнитного поля, а также проанализирован магнитооптический отклик суспензии.

[1] I. Dierking, *Crystals*, 2025, **15**, 321. DOI: 10.3390/cryst15040321

[2] F. Brochard, P.G. de Gennes, *Journal de Physique*, 1970, **31**(7), 691–708. DOI: 10.1051/jphys:01970003107069100

[3] S.V. Burylov, Y.L. Raikher, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1995, **258**(1), 123–141. DOI: 10.1080/10587259508034553

[4] H.J. Deuling, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1972, **19**(2), 123–131. DOI: 10.1080/15421407208083858

[5] V. Lacková, M.A. Schroer, M. Hähsler, K. Zakutanská, S. Behrens, P. Kopčanský, N. Tomašovičová, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2024, **589**, 171616. DOI: 10.1016/j.jmmm.2023.171616

[6] D.V. Makarov, A.N. Zakhlevnykh, *Soft Matter*, 2012, **8**(24), 6493–6503. DOI: 10.1039/C2SM07390K

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛИГАНДНОГО ОКРУЖЕНИЯ НА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III)

Мезогенные комплексы европия(III) (Eu(III)) с уникальными структурными и жидкокристаллическими (ЖК) свойствами, отличительно интенсивным оптическим и магнитным поведением являются многообещающими компонентами для создания эффективных полифункциональных материалов для оптоэлектронных устройств [1]. Однако неоднозначно установленные корреляции между молекулярным строением, составом и наблюдаемыми свойствами данных соединений, их зависимости от различных факторов, недостаточно обоснованные физико-химические процессы, лежащие в основе проявляемых ими оптических и ЖК свойств, усложняют применение данных соединений. Тогда как центральный ион Eu(III) и лиганды подбираются до стадии синтеза, структурные и геометрические особенности строения комплексов и оценка влияния лигандов на процессы фотовозбуждения не могут быть явно и однозначно изучены экспериментально. В данной работе методы квантово-химического моделирования [2, 3] были применены для исследования взаимосвязи между молекулярным строением комплексов Eu(III) с различным лигандным окружением (замещенными β -дикетонами и основаниями Льюиса), величинами энергий их триплетных и синглетных возбужденных состояний, показателями интенсивности люминесценции по теории Джадда – Офельта, эффективностью внутримолекулярного прямого и обратного переноса энергии и значениями теоретического квантового выхода. На основе полученных в результате расчетов энергий возбужденных состояний и скоростей переноса энергии были определены каналы внутримолекулярного переноса энергии. Были проанализированы механизмы влияния природы заместителей в β -дикетонах и основаниях Льюиса на люминесценцию комплексов Eu(III). Выявленные подходы к модификации молекулярного строения комплексов направлены на усиление эффективности их излучения с целью разработки эффективных люминесцентных материалов.

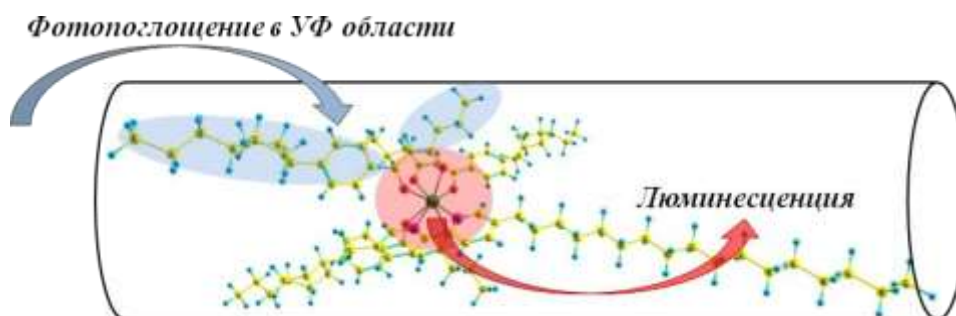


Рисунок 1 – Оптимизированная геометрия одного из рассмотренных мезогенных комплексов европия(III)

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения» (FZSG-2023-0008).

[1] K. Romanova, Y. Galyametdinov, A. Kremleva, *International Journal of Quantum Chemistry*, 2021, **121**(7), e26569. DOI: 10.1002/qua.26569

[2] К.А. Романова, А.В. Кремлева, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и их практическое использование*, 2019, **19**(2), 15–24. DOI: 10.18083/LCAppl.2019.2.15

[3] К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидкие кристаллы и их практическое использование*, 2022, **22**(1), 16–26. DOI: 10.18083/LCAppl.2022.1.16

Н.М. СЕЛИВАНОВА¹, РЫБАКОВА А.И.², В.Э. СЕМЕНОВ¹¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия²Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

БИОАКТИВНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 1,2,3 – ТРИАЗОЛОВ И ИХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСЫ В ТРАНСДЕРМАЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ДОСТАВКИ

Триазолы представляют собой важный класс фармацевтических и медицинских соединений, которые на сегодняшний день находят применение в коммерческих лекарственных препаратах, благодаря противовоспалительным, противомикробным и противораковым свойствам [1]. Имея в структуре активные функциональные группы триазолы вступают в реакции комплексообразования с ионами металлов [2]. Известно, что процессы хелатирования усиливают биологическую активность триазолов при координации с атомами металлов, что расширяет потенциал их применения. В данной работе исследовалась серия замещенных 1,2,3 – триазолов. Соединения были синтезированы реакцией клик химии, охарактеризованы методом элементного анализа и использовались в качестве лигандов для гетеролигандных комплексов Ln(III) - La, Tb, Eu. Структуры комплексов представлены на рис. 1.

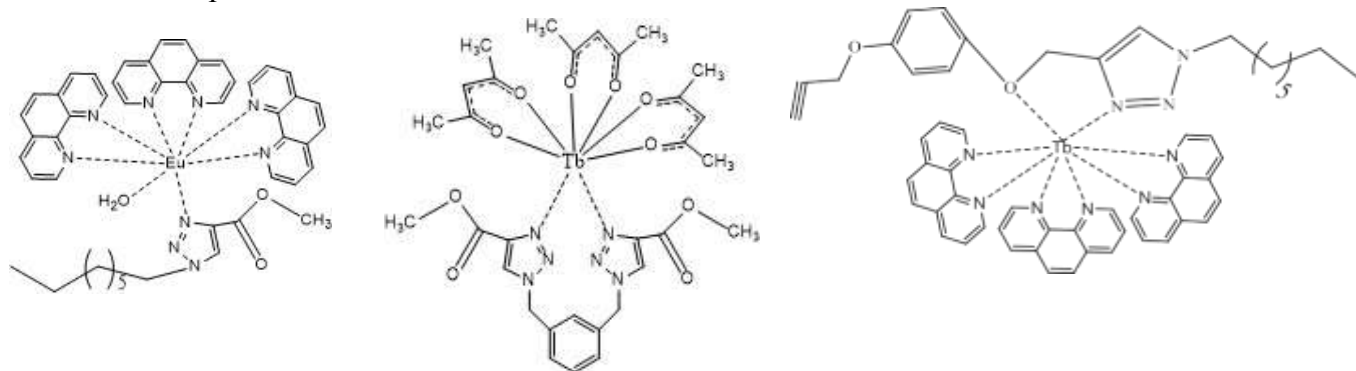


Рисунок 1 – Структуры гетеролигандных комплексов с 1,2,3 – триазолами

Исследование оптических свойства показало, что синтезированные комплексы Tb и Eu обладают характерной люминесценцией в зеленой и красной области спектра и демонстрируют высокие оптические характеристики. Для разработки трансдермальных систем индивидуальные лиганды – замещенные 1,2,3 - триазолы и их комплексы лантаноидов были инкорпорированы в систему на основе блок-сополимера P123/ДМСО [3] и биосовместимую систему каппа-каррагинан/Н₂О/ДМСО. В поляризованном свете образцы систем демонстрировали двулучепреломление, что указывало на формирование лиотропной жидкокристаллической мезофазы. Исследование кинетики высвобождения *in vitro* с помощью диффузионной ячейки Франца, через модельную мембрану, имитирующую роговой слой кожи, показало пролонгированный эффект релизинга до 470 мин. Кинетический профиль кривой высвобождения демонстрирует различную скорость высвобождения, включая индукционный период для системы каппа-каррагинан/Н₂О/ДМСО. Таким образом, полученные данные демонстрируют высокий потенциал исследуемых систем для биомедицины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00187, <https://rscf.ru/project/24-23-00187>

[1] N. Selivanova, M. Shulaeva, A. Voloshina, V. Semenov. *J. of Molecular Liquids*. 2024, 415, 126352. DOI: 10.1016/j.molliq.2024.126352

[2] Selivanova N., Shulaeva M., Semenov V., Galyametdinov Y. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 2024, 305, 12355. DOI: 10.1016/j.saa.2023.123558

[3] Selivanova N.M., Galeeva A.I., Ziganshin M.A., Galyametdinov Y.G. *J. Phys. Chem. B*. 2024, **128**(20), 5127–5134. DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c00929

Р.И. ХУСНУТДИНОВА, А.И. ГАЛЕЕВА, А.С. КРУПИН, А.Э. ЗАВОРОТЬКО,
Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЛИОТРОПНОЙ СИСТЕМЫ С ГОЛУБЫМИ С-ТОЧКАМИ

Углеродные точки (С-точки) обладают эффективными оптическими характеристиками, биосовместимостью, что делает их перспективными для создания гибридных лиотропных надмолекулярно-организованных сред на их основе для применения в биоанализе и тераностике [1,2].

В работе были синтезированы С-точки, обладающие люминесценцией в синей области спектра (bCD) [3]. При исследовании функциональных групп на поверхности полученных наночастиц методом ИК-спектроскопии установлено, что С-точки обладают ароматическим центром, состоящим из замещенных бензольных колец, и функционализированы по ободу карбонильными, гидроксидными и аминогруппами (рис. 1).

С ранее синтезированными С-точками были получены лиотропные надмолекулярно-организованные среды содержащие монодециловый эфир тетраэтиленгликоля и водный раствор деканола. Для получения данных о строении гибридных ЛЖК, образующихся при формировании лиомезофазы с С-точками и выявления молекулярно-структурных изменений, происходящих при этом, использовался метод ИК-спектроскопии. В ИК-спектре (рис. 1) монодецилового эфира с деканолом (рис. 1(2)) отмечается присутствие гидроксильных групп ($3500-3000\text{ см}^{-1}$), $\text{C}=\text{C}$ связей (1637 см^{-1}). При сравнении спектров С-точек (рис. 1(1)) и их комплекса с жидкими кристаллами (ЖК) (рис. 1(3)) наблюдается исчезновение колебаний при 2358 см^{-1} , что указывает на образование новой полимерной структуры. Установлено, что в комбинированных с С-точками системах, базирующихся на монодециловом эфире изменение интенсивности и сдвиг полос колебаний в области ОН групп ($3000-3500\text{ см}^{-1}$), ножничных колебаний ($2858-2859\text{ см}^{-1}$) и деформационных колебаний $\text{C}-\text{H}$ ($1250-900\text{ см}^{-1}$) указывает на взаимодействие между соединением ЖК и С-точек.

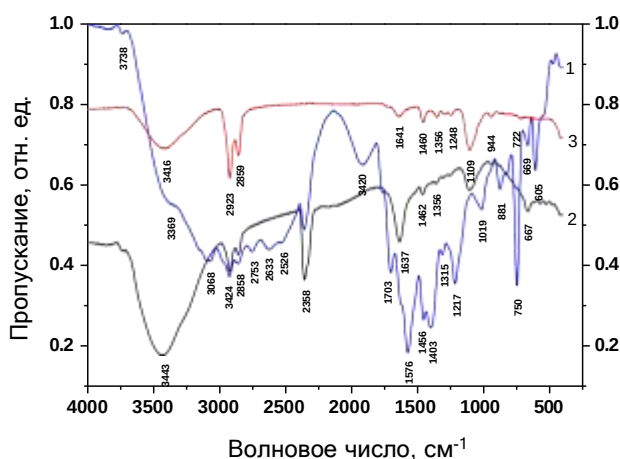


Рисунок 1 – ИК-спектры исследуемых образцов: 1 – С-точки, 2 – ЛЖК, 3 – ЛЖК с С-точками

Таким образом, по данным ИК-спектроскопии определено строение гибридного мезогенного комплекса.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант № FZSG-2023-0008).

[1] А.И. Галеева, А.Н. Безруков, А.С. Крупин, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.* 2024, **24**(2), 32–42. DOI: 10.18083/LCAppl.2024.2.3

[2] А.Э. Загоротько, И.Д. Максимова, А.С. Крупин, Ю.Г. Галяметдинов, *Вестник технологического университета*, 2024, **27**(12), 18–22.

СОДЕРЖАНИЕ

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Антина Л.А.

Инновационные материалы на основе органических люминофоров: современные стратегии получения и перспективы применения 5

Безбородов В.С., Михалёнок С.Г., Кузьменок Н.М., Лапаник В.И.

Полифункциональные жидкокристаллические и анизотропные материалы. Подходы развития и разнообразие практического применения 6

Долганов П.В.

Об экспериментах по жидким кристаллам на международной космической станции (МКС) 7

Кац Е.И.

Эффекты не-ньютоновской реологии жидких кристаллов 8

Мамардашвили Н.Ж.

Разработка наноструктурированных фоточувствительных материалов путем направленного дизайна тетрапиррольных макроциклических соединений 9

Никитин К.С., Мальцева О.В., Мамардашвили Н.Ж., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.

Надмолекулярная организация плавающих слоев порфиринов и сенсорные свойства их пленок Ленгмюра-Шеффера 10

Палто С.П., Гейвандов А.Р., Касьянова И.В., Рыбаков Д.О., Симдянкин И.В., Уманский Б.А., Штыков Н.М.

Электро-индуцированные жидкокристаллические фотонные структуры 11

Савилов С.В., Яковлев С.В., Суслова Е.В.

Основные принципы коммерциализации результатов научных исследований в химии и материаловедении 12

Шилов М.А., Усольцева Н.В.

Наноуглеродные модификаторы реологических характеристик смазочных материалов 13

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

Безруков А.Н., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г.

Микрофлюидные люминесцентные среды на основе жидких кристаллов и углеродных наноточек: влияние геометрии канала и динамики среды 15

Бушкевич В.В., Юсубова А.Ф., Харламов С.С., Пасечник С.В., Дубцов А.В.

Динамические процессы на границе раздела нематический жидкий кристалл – водный раствор полимера с азобензолсодержащим поверхностно-активным веществом 16

Груздев М.С., Червонова У.В., Бичан Н.Г., Ксенофонтов А.А.

Гетеролептические β -дикетонатные комплексы Eu (III), Ga(III), Fe (III) 17

Догадаева С.А., Антина Л.А., Березин М.Б., Антина Е.В.

Сравнительный анализ влияния методики получения BODIPY@ZIF-8 композитов на их текстурные и физико-химические свойства 18

Долганов П.В., Спириденко Н.А., Долганов В.К. Образование и аннигиляция топологических дефектов на границе изотропная жидкость – нематик, индуцированное изменением топологии капель	19
Еремеева Ю.В., Гусева Г.Б., Антина Е.В. Функционализированные BODIPY люминофоры и их конъюгаты с монотерпеноидами как тераностические агенты для фотодинамической терапии	20
Жаркова Г.М., Коврижина В.Н. Разработка принципов формирования жидкокристаллических смесей для панорамной диагностики температур на поверхности исследуемых объектов	21
Заворотько А.Э., Арменков К.В., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г. Исследование концентрационного тушения люминесценции водных растворов углеродных точек	22
Касьянова И.В., Гейвандов А.Р. Ориентация жидкого кристалла поверхностью отслоенной анизотропной пленки из полимеризуемого ЖК	23
Климович М.А., Колыванова М.А., Морозов В.Н. Об оптическом полиморфизме жидкокристаллических дисперсий ДНК	24
Коблов И.В., Кравченко И.Е., Зорина Т.Е., Касьяненко Я.Ю., Зоркальцев В.М., Зорин В.П. Количественная оценка коэффициента распределения в системе термочувствительный сополимер/вода для фотосенсибилизатора темпорфин методом флуоресцентной спектроскопии	25
Копытова Е.А., Петров Д.А. О представлении свободной энергии ферромагнитных жидкокристаллических суспензий в форме разложения Ландау – де Жена	26
Кузнецов А.В., Клепач А.Д., Пожидаев Е.П. Широкотемпературная ферриэлектрическая фаза в бинарной смеси ахирального смектика С и немезогенного хирального соединения	27
Кузьмина А.А., Монахов Л.О., Новиков И.В., Александрийский В.В., Бурмистров В.А. Влияние структуры и молекулярных параметров оптически активных допантов на особенности хиральной индукции в нематических жидких кристаллах	28
Курилов А.Д., Клочков А.А., Губарева А.В., Зубков С.А. Модель Бойля в исследовании структурно-индуцированной диэлектрической анизотропии магнитных жидкостей	29
Кучеров Р.Н., Курилов А.Д., Смирнова А.И., Столбов Д.Н., Усольцева Н.В., Чаусов Д.Н. Вязкоупругие свойства дисперсий тридецилата холестерина с азот-допированными углеродными наноструктурами	30
Ляпин Д.С., Фомин Н.С., Кустова Т.В. Разработка технологии получения и исследование водорастворимых хлориновых фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии и диагностики	31

Мальцева О.В., Никитин К.С., Дмитриева О.А., Мамардашвили Н.Ж., Усольцева Н.В., Брагина Н.А.	
Дизайн и сенсорные свойства порфириновых пленок Ленгмюра-Шеффера по отношению к субстратам различной природы в водной среде и газовой фазе	32
Манукян А.С., Кустова Т.В.	
«Горькое» сокровище природы: лабораторное получение гидролата полыни и его свойства	33
Молчанов Е.Е., Марфин Ю.С.	
Синтез и физико-химические свойства дипиррометенатов бора (III), содержащих алкильные и ароматические заместители	34
Морозов В.Н., Климович М.А., Колыванова М.А.	
Холестерические жидкокристаллические дисперсии ДНК и ионизирующее излучение: от радиационных измерений до радиобиологической модели	35
Овчинников Т.А., Петров Д.А.	
Порог электрического перехода Фредерикса в суспензии углеродных нанотрубок на основе нематического жидкого кристалла	36
Пасечник С.В., Васильева А.А., Захаров А.В.	
Комбинированное воздействие осциллирующего потока Пуазейля и электрического поля на структуру и оптические свойства гибридно ориентированного слоя жидкого кристалла	37
Рассолова А.Е., Майзлис В.Е., Березина Г.Р.	
Растворимость тетра-3-(метоксифеноксифталоцианинов меди в хлороформе	38
Сошникова В.А., Усольцев С.Д.	
Синтез производных BODIPY с протяженными алифатическими фрагментами в мезоположении дипирринового остова	39
Турченко М.В., Лебедева Ю.Е., Бутузов А.В., Светогоров К.И., Ваганова М.Л., Чайникова А.С.	
Получение высокоплотной алюмооксидной керамики методом лазерной стереолитографии	40
Харламов С.С., Пасечник С.В.	
Управляемая потоком жидкокристаллическая дифракционная решетка	41
Шатило А.Г., Набасов А.А., Галанин Н.Е., Усольцев С.Д., Марфин Ю.С.	
Исследование влияния количества и природы галогеновых заместителей 3-(хинолин-2-илметил)изоиндолин-1-она на его спектральные и агрегационные характеристики	42
Шерудилло А.С., Антина Л.А., Березин М.Б., Антина Е.В.	
Фотофизические характеристики и молекулярная агрегация димерных BODIPY фотосенсибилизаторов в растворах и пленках хитозана	43
Hassoon O.A.H., Salman O.N., Mironyuk V.N., Karatyshova T.Y., Glukhovskoy E.G.	
Conductivity of structures containing CdSe layers produced by Langmuir-Blodgett method	44

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Александров А.И., Пашкова Т.В., Груздев М.С., Воронов Н.С. Исследование структуры цинкового комплекса с поли(пропилениминовым) лигандом	46
Бугаков С.Д., Карнов О.Н., Дериков Я.И., Мерекалов А.С., Головань Л.А. Светоиндуцированное управление распределением квантовых точек CdSe/ZnS в жидком кристалле	47
Гиричева Н.И., Лапыкина Е.А., Коновалова А.А., Смирнова А.И., Аконова О.Б., Бумбина Н.В., Жарникова Н.В., Усольцева Н.В. Роль конформационного разнообразия в реакции получения 1,2,4,5-тетра(5-(4'-метоксифенил)-(1,3,4-оксадиазол-2-ил)-бензола	48
Гиричева Н.И., Твердова Н.В., Гиричев Г.В. Полиины и кумулены: молекулы X-CCCC-X и их катионы	49
Догадаева С.А., Самохвалова П.О., Антина Л.А., Ксенофонов А.А., Калягин А.А., Березин М.Б., Антина Е.В. Новая стратегия получения эффективных "Heavy-atom-free" фотосенсибилизаторов на основе BODIPY люминофоров	50
Кустова Т.В., Знойко С.А. Триазолсодержащие феноксизамещенные трехзвенные продукты и их металлокомплексы с галлием	51
Лапыкина Е.А., Гиричева Н.И., Салькова А.М., Смирнова А.И., Аконова О.Б., Усольцева Н.В. Особенности реакции синтеза 1,4-бис(3,4-диметоксифенилоксадиазола)-терефталевой кислоты. Квантово-химическое моделирование	52
Никитин К.С., Мальцева О.В., Мамардашвили Н.Ж., Усольцева Н.В. Термодинамические характеристики петель гистерезиса в циклах компрессии-декомпрессии плавающего слоя Zn(II)-тетрафенилпорфирина	53
Пашкова Т.В., Александров А.И., Анников Д.С. Исследование анизотропных пленок на основе гребнеобразных жидкокристаллических сополимеров с различным содержанием хирального бифенила	54
Семенова П.С., Федоров М.С. Мезоморфные свойства 4(3'-гидроксиоктилокси)-4''-цианоазобензола и перспектива его использования в супрамолекулярных ЖК	55
Сорокина А.С., Бумагина Н.А., Антина Е.В. Анализ ионов Zn^{2+} в биологически активных добавках с применением дипиррометеновых сенсоров	56
Терентьев В.В., Хачатрян С.М., Аконова О.Б. Улучшение условий смазывания стальных поверхностей путем легирования индустриального масла лауратом меди	57

Филиппов А.А., Гришина А.Д., Федоров М.С., Лапыкина Е.А.
Исследование мезоморфных свойств супрамолекулярной системы на основе пара-фенолсульфокислоты 58

Шилова Ю.А., Шерудилло А.С., Антипа Л.А., Березин М.Б., Антипа Е.В.
Спектральные характеристики ванилин-стирил-замещенного NIR-BODIPY люминофора и перспективы его применения 59

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

Бутузов А.В., Лебедева Ю.Е., Серкова Е.А.
Фотоотверждаемое полимерное предкерамическое связующее для получения оксидной керамики методом цифровой обработки светом (DLP) 61

Бутузов А.В., Лебедева Ю.Е., Серкова Е.А., Семина А.В., Турченко М.В.
Аддитивное получение образцов алюмооксидной керамики из высоконаполненных керамической суспензии технологией DLP 62

Глинов К.А., Веремейчик Я.В., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г.
Фазовое поведение Eu(III)-содержащих мезофаз с включением сульфонамидных структур 63

Зиятдинова Р.М., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.
Температурозависимая люминесценция жидкокристаллического комплекса Европия(III) 64

Макаров Д.В., Уткин М.А.
Влияние электрической поляризации и магнитной сегрегации на ориентационные переходы в ферронематическом жидком кристалле 65

Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.
Квантово-химическое изучение влияния лигандного окружения на люминесценцию мезогенных комплексов Европия(III) 66

Селиванова Н.М., Рыбакова А.И., Семенов В.Э.
Биоактивные производные 1,2,3 – триазолов и их металлокомплексы в трансдермальных системах доставки 67

Хуснутдинова Р.И., Галеева А.И., Крупин А.С., Заворотько А.Э., Галяметдинов Ю.Г.
Взаимодействие лиотропной системы с голубыми С-точками 68

Сетевое электронное издание

**ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ
И «УМНЫЕ» НАНОМАТЕРИАЛЫ
(XI Чистяковские чтения)**

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**

Россия, Иваново, 20–21 мая 2025 г.

[12+]

Директор издательства Л.В. Михеева

Выпускается в авторской редакции

Дата размещения на сайте 04.06.2025.

Уч.-изд. л. 4,7. Объем 2,9 МБ.

Издательство «Ивановский государственный университет»

✉ 153025 Ивановская обл., г. Иваново, ул. Ермака, 39

☎ (4932) 93-43-41. E-mail: publisher@ivanovo.ac.ru