

Международная конференция



**Химия и технология
функциональных
материалов**

**г. Иваново,
17 декабря 2020 г.**



ISBN 978-5-9616-0565-5

Оргкомитет конференции

Председатели конференции:

чл.-корр. РАН Койфман О.И. д.ф.-м.н., проф. Бутман М.Ф.

Зам. председателей: к.х.н. Марфин Ю.С.

Члены оргкомитета:

академик РАН Анаников В.П. (Москва)

академик РАН Музафаров А.М. (Москва)

академик РАН Белецкая И.П. (Москва)

академик РАН Новаков И.А. (Москва)

академик РАН Бухтияров В.И. (Новосибирск)

академик РАН Овчаренко В.И. (Москва)

чл.-корр. РАН Горбунова Ю.Г. (Москва)

чл.-корр. РАН Озерин А.Н. (Москва)

академик РАН Егоров М.П. (Москва)

академик РАН Синяшин О.Г. (Казань)

д.х.н. Киселев М.Г. (Иваново)

чл.-корр. РАН Федюшкин И.Л. (Н. Новгород)

академик РАН Кукушкин В.Ю. (Санкт-Петербург)

академик РАН Цивадзе А.Ю. (Москва)

академик РАН Мешалкин В.П. (Москва)

чл.-корр. РАН Черкасов В.К. (Нижний Новгород)

чл.-корр. РАН Кучин А.В. (Сыктывкар)

Члены международного оргкомитета:

проф. Карл-Хайнц Оберхаммер (Австрия)

проф. Арне Холанд (Норвегия)

проф. Казимеж Флага (Польша)

проф. Руди ван Элдик (Германия)

проф. Томас Торрес Себада (Испания)

Программный комитет:

Председатель: д.ф.-м.н., проф. Бутман М.Ф.

Зам. председателя: д.х.н., проф. Стужин П.А.

Члены программного комитета:

д.х.н., проф. Базанов М.И., д.т.н., проф. Ильин А.П., д.т.н., проф. Балмасов А.В.,

д.т.н., проф. Липин А.Г., д.т.н., проф. Блиничев В.Н., д.х.н., проф. Макаров С.В.,

д.ф.н., проф. Гиричев Г.В., д.х.н., проф. Мамардашвили Н.Ж., д.т.н., проф. Зайцев В.А.,

д.х.н., проф. Усачева Т.Р.

Ученый секретарь: к.х.н. Малясова А.С.

ЭТАПЫ ОКИСЛЕНИЯ BaLaCuS_3

Азарипин Н.О.¹, Бурханова Т.М.¹, Моница Л.Н.¹

¹Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия

e-mail: n.o.azarapin@utmn.ru

Порошковое соединение BaLaCuS_3 получено методом сульфирования оксидной шихты после термического разложения смеси исходных нитратов. Образец окисляли в потоке воздуха на установке синхронного термического анализа STA 449 F5 Jupiter в диапазоне температур от 50 °С до 1200 °С со скоростью нагрева 15 °С/мин (Рис. 1).

Для каждого зарегистрированного теплового эффекта брался новый образец порошка и окислялся до температуры теплового эффекта. Далее окисленный образец изучался методами рентгенофазового анализа (Табл. 1).

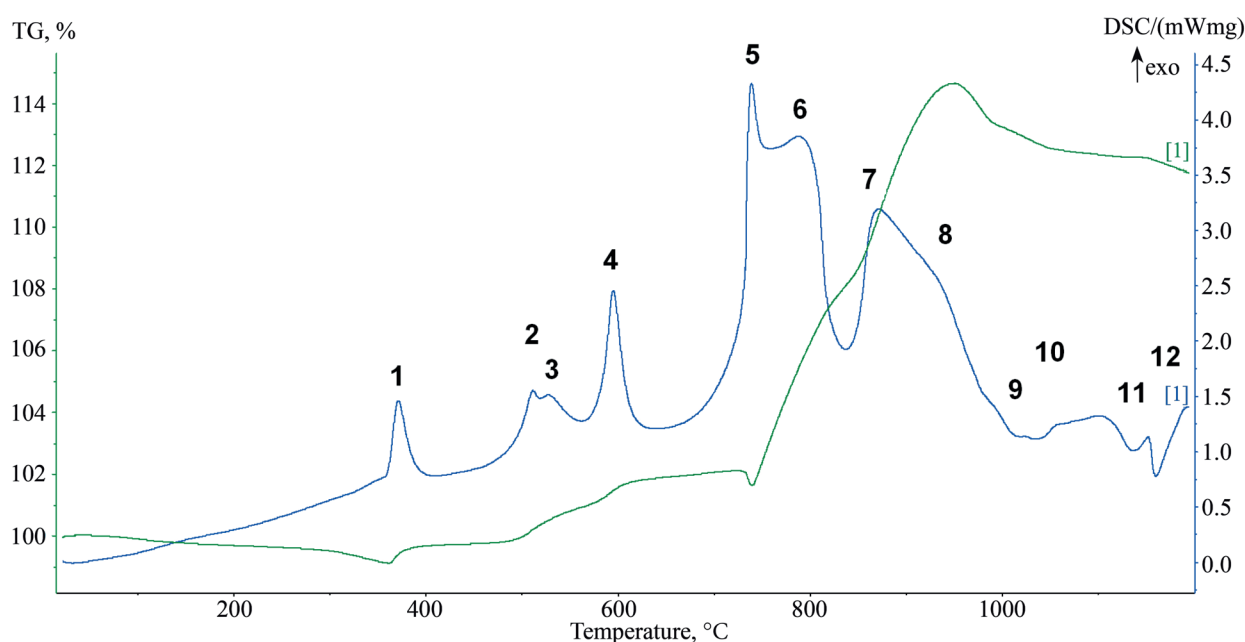


Рис. 1. ДСК (сияния линия) и ТГ (зеленая линия) окисления образца BaLaCuS_3

Таблица 1. Фазовый состав продуктов окисления BaLaCuS_3

Температура остановки нагрева, °С	№ пика	Фазовый состав
380	1	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2 + \text{BaLaCuS}_3$
518	2	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2 + \text{BaLaCuS}_3$
560	3	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2 + \text{BaLaCuS}_3$
630	4	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2 + \text{BaLaCuS}_3$
760	5	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2 + \text{BaLaCuS}_3$
790	6	$\text{BaSO}_4 + \text{CuLaS}_2$
872	7	$\text{BaSO}_4 + \text{La(O)CuS}$
940	8	$\text{BaSO}_4 + \text{La(O)CuS} + \text{La}_2\text{O}_2\text{SO}_4 + \text{CuO} + \text{Cu}_2\text{O}$
1020	9	$\text{BaSO}_4 + \text{La}_2\text{O}_2\text{SO}_4 + \text{Cu}_2\text{O} + \text{CuO}$
1045	10	$\text{BaSO}_4 + \text{La}_2\text{O}_2\text{SO}_4 + \text{Cu}_2\text{O} + \text{CuO}$
1137	11	$\text{BaSO}_4 + \text{La}_2\text{O}_2\text{SO}_4 + \text{CuO}$
1165	12	$\text{BaSO}_4 + \text{La}_2\text{O}_2\text{SO}_4 + \text{CuO} + \text{La}_2\text{CuO}_4$

ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ГАЛЛУАЗИТ/МАГНЕТИТ

Алексеева О.В.¹, Смирнова Д.Н.¹, Носков А.В.¹, Привезенцева К.Д.^{1,2}

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

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

e-mail: avn@isc-ras.ru

В последние годы значительное внимание уделяется исследованиям свойств магнитных наноматериалов в связи с перспективами их использования в биотехнологии, медицине и для решения экологических проблем. Наибольшее практическое применение среди магнитных наночастиц нашли оксиды железа, такие как магнетит Fe_3O_4 , который широко используется для адресной доставки лекарств, в качестве сорбентов, биосенсоров и т.д.

Другое важное направление в использовании магнетита связано с получением композиционных материалов Fe_3O_4 с глинистыми минералами. Одним из распространенных глинистых минералов является галлуазит, который находит практическое применение в керамике, тканевой инженерии, антимикробных покрытиях, косметологии и т.д. Можно ожидать, что при модифицировании галлуазита магнетитом будут синтезированы новые композиционные материалы, физико-химические свойства которых зависят от свойств компонентов.

В настоящей работе получен композиционный материал галлуазит/магнетит, исследованы его поверхностная морфология, пористость и кристаллическая структура.

Композит галлуазит/магнетит (магнетизированная глина) был синтезирован методом химического соосаждения солей железа в порах галлуазита. С этой целью глину диспергировали в растворе гексагидрата хлорида железа $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и тетрагидрата хлорида железа $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ при молярном соотношении ионов $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ в растворе 2:1 в условиях интенсивного перемешивания и воздействии ультразвука.

При анализе распределений частиц галлуазита и магнетизированной глины по размерам, полученных методом лазерной дифракции, установлено, что галлуазит, в основном, содержит частицы с размерами от 100 до 800 нм. Наибольшую долю составляют частицы с размером от 350 до 700 нм. При модификации алюмосиликата магнетитом появляются более крупные частицы.

В соответствие с данными низкотемпературной адсорбции-десорбции паров азота исследуемые галлуазит и магнетизированный галлуазит можно отнести к мезопористым материалам. Модификация силиката магнетитом приводит к незначительному снижению площади удельной поверхности от 57.4 до 53.2 м²/г и уменьшению суммарного объема пор от 1.565 до 1.142 см³/г. Снижение сорбционных характеристик для композита, по видимому, связано с тем, что магнетит осаждается не только на поверхности, но и в порах галлуазита.

Методом сканирующей электронной микроскопии были получены электронные изображения поверхностей галлуазита и магнетизированной глины. На микрофотографии силиката наблюдаются наночастицы цилиндрической формы. Магнетизированная глина представляла собой агрегаты частиц различной морфологии с включениями магнетита.

На рентгеновских дифрактограммах композита наблюдаются пики, характерные для его отдельных компонентов, такие как рефлекс (001), соответствующий межплоскостному расстоянию 0.734 нм в галлуазите, и рефлекс (311), соответствующий магнетиту.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-43-370015-р_а).

Исследования проведены с использованием ресурсов Центра коллективного пользования «Верхне-Волжский региональный центр физико-химических исследований».

ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ КОМПОЗИТОВ ЭТИЛЦЕЛЛЮЛОЗА/ГАЛЛУАЗИТ ПО ОТНОШЕНИЮ К МЕТИЛЕНОВОМУ ГОЛУБОМУ

Алексеева О.В.¹, Носков А.В.¹, Привезенцева К.Д.^{1,2}

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

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: ova@isc-ras.ru

В последние годы одним из актуальных направлений развития современного материаловедения является создание гибридных материалов на основе органо-неорганических систем различной природы для решения экологических задач. Особое внимание уделяется исследованию композитов на основе биоразлагаемых природных полимеров, модифицированных наночастицами слоистых минералов, которые сочетают свойства полимерной матрицы и наполнителя. К таким минералам относится галлуазит, состоящий из многослойных алюмосиликатных нанотрубок. Введение в полимерную матрицу наночастиц галлуазита позволит получать композиционные материалы различного назначения с улучшенным комплексом физико-механических и сорбционных свойств.

Цель данной работы – получение пленочных композитов этилцеллюлоза (ЭЦ) /галлуазит и исследование их адсорбционных свойств по отношению к органическому красителю метиленовому голубому (МГ).

Композиты ЭЦ/галлуазит были получены методом механического диспергирования частиц слоистого силиката в матрице этилцеллюлозы. Содержание неорганического наполнителя в композите варьировали от 0 до 6 мас. %. Кинетические характеристики пленочных композитов с различным содержанием галлуазита были определены при исследовании влияния времени контакта между фазами сорбента и раствора метиленового голубого на количество красителя в фазе сорбента. ИК-спектры порошков галлуазита и МГ, а также пленок ЭЦ и ЭЦ/(6 мас. % галлуазита) в виде таблеток с KBr регистрировали на спектрометре Avatar 360 FT-IR ESP (Thermo Nicolet, USA) в диапазоне волновых чисел 4000–400 см⁻¹.

Установлено, что кинетика адсорбции метиленового голубого на пленках ЭЦ и композитах описывается уравнением реакции псевдвторого порядка. Определены константы скорости процесса сорбции. Выявлено, что равновесие процесса адсорбции метиленового голубого на пленке ЭЦ и композите ЭЦ/(6 мас. % галлуазита) описывается изотермой Ленгмюра. Обнаружено десятикратное увеличение предельной адсорбционной емкости и величины удельной поверхности композита по сравнению с немодифицированной ЭЦ.

Методом ИК-спектроскопии показано, что процесс сорбции метиленового голубого на ЭЦ и композите ЭЦ/(6 мас. % галлуазита) осуществляется в результате взаимодействия электроноакцепторных центров МГ с электронодонорными гидроксилсодержащими группами композита и полимера.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-43-370015-р-центр-а).

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ОСАДИТЕЛЯ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $\text{CuO}/\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ КОПОЗИЦИЙ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ СИНТЕЗА МЕТАНОЛА

Батанов А.А., Румянцев Р.С., Сушкова К.А., Ильин А.А., Ильин А.П.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: rrrn@isuct.ru*

Метанол является крупнотоннажным продуктом и используется для получения различных химических веществ органического синтеза [1]. На сегодняшний день медьцинкалюминиевые композиции являются ведущими катализаторами для процесса синтеза метанола [2].

Целью работы является исследование влияния концентрации осадителя и растворов нитратов на физико-химические и каталитические свойства $\text{CuO}/\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$ катализатора.

Образцы были приготовлены методом соосаждения. В качестве исходных веществ использовались растворы нитратов меди ($\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$), цинка ($\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) и алюминия ($\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$), концентрация которых варьировалась в интервале 0,5–2 моль/л. В качестве осадителя нами было предложено использовать раствор щавелевой кислоты ($\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$) и оксалата аммония ($\text{NH}_4\text{C}_2\text{O}_4$). Концентрации растворов осадителей изменялась в интервале 5–15 % масс. Полученные осадки были профильтрованы, промыты дисстилизованной водой, просушены при 110 °С и прокалены при 350 °С в течении 4 часов.

При выполнении исследований привлекались такие методы как рентгенофазовый, синхронный термический анализ, метод низкотемпературной адсорбции-десорбции азота, сканирующая электронная микроскопия, лазерный анализ распределения частиц по размерам, газовая хроматография. Каталитические свойства исследованы на установке проточного типа ПКУ-2ВД.

Установлено, что с увеличением концентрации нитратов Cu, Zn, Al наблюдается рост удельной поверхности образцов с достижением максимума при концентрации 1 моль/л. Повышение же концентрации нитратов Cu, Zn, Al до 2 моль/л приводит к уменьшению поверхности композиций. Такая зависимость характерна для каждой концентрации осадителя. Изотермы адсорбции-десорбции азота полученных образцов можно отнести к IV типу по классификации Дубинина. Это свидетельствует о том, что катализаторы состоят преимущественно из мезопор.

На основании полученных данных авторами определены оптимальные параметры синтеза катализаторов (концентрации растворов осадителя и исходных растворов, скорости сливания растворов, температура и длительность термической обработки). Установлена взаимосвязь кислотно-основных свойств полученных катализаторов с их активностью.

В части синтеза и исследования катализаторов, осажденных растворами щавелевой кислоты работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (Тема №FZZW-2020-0010). В части исследования синтеза и свойств катализаторов, осажденных растворами оксалата аммония работа выполнена при поддержке Стипендии Президента СП-3800.2019.1 Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ».

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Rumyantsev R.N., Il'in A. A., Il'in A.P., Katkova N.N. Mechanochemical Synthesis of Molybdates: Influence of Mechanical Activation on Structure of Molybdenum Oxides and Iron. Formaldehyde : synthesis, applications, and potential health effects. Amy Patton, editor. Nova Science Publishers. 2015. P. 155–167
- [2] Behrens M., Studt F., Kasatkin I., Kühl S., Hävecker M., Abild-Pedersen F., Zander S., Girgsdies F., Kurr P., Knier P., Tovar M., Fischer R., Nørskov J., Schlögl R. The Active Site of Methanol Synthesis over $\text{Cu}/\text{ZnO}/\text{Al}_2\text{O}_3$. Industrial Catalysts, Science. 2012. V. 336, N 6083, P. 893–897.

СИНТЕЗ ПОРФИРИНПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Батракова А.А.¹, Алопина Е.В.^{1,2}, Агеева Т.А.¹

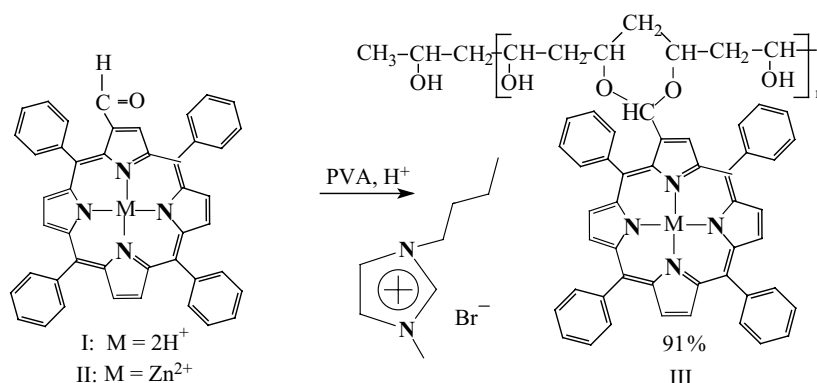
¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

e-mail: alopina@mail.ru

В последние годы создание функциональных материалов с новой молекулярной структурой и уникальными физико-химическими свойствами, привлекли значительный интерес из-за высокого потенциала применения их в области биомедицины [1]. Ранее нами было установлено, что металлокомплексы порфиринов, ковалентно иммобилизованные на поливиниловый спирт обладают антибактериальной активностью [2]. Использование ионных жидкостей (ИЖ) в качестве новых реакционных сред может решить проблему эмиссии растворителей и повторного использования дорогостоящих катализаторов.

ИЖ оказывает влияние в процессах полимерного синтеза. Чен и др. показали, что добавление ионной жидкости к раствору полимера приводит к созданию новой сети водородных связей между молекулой полимера и ИЖ [3]. Эти взаимодействия могут изменить макромолекулярные полимерные цепи и привести к повышению гибкости полимерных пленок.



В нашей работе показано, что структура и химические свойства ИЖ влияют на процесс ковалентной иммобилизации порфириновых соединений на полимеры-носители за счет образования водородных связей в растворе. Оптимальный выбор типа ИЖ в зависимости от природы тетрапиррольного макрогетероциклического соединения и полимера позволит предложить перспективные реакционные среды для проведения макромолекулярного синтеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-03-00986).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] An K., Hyeon T. Synthesis and biomedical applications of hollow nanostructures. *Nano Today*. **2009**, 4, 359–373.
- [2] Алопина Е.В., Агеева Т.А., Любимцев А.В., Кузнецов О.Ю., Сырбу С.А., Койфман О.И. Синтез и иммобилизация мезо-нитрофенил-β-формил-трифенилпорфирин и его медного комплекса на поливиниловый спирт. *Макрогетероциклы*. **2012**, 5(1), 76–80.
- [3] Chen M., Runge T., Wang L., Li R., Feng J., Shu X.L., Shi Q.S. Hydrogen bonding impact on chitosan plasticization. *Carbohydr. Polym.* **2018**, 200, 115–121.

РОЛЬ ПРЕКУРСОРОВ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ СТАННАТОВ БАРИЯ (СТРОНЦИЯ): МАКРОСКОПИЧЕСКИЙ И ЛОКАЛЬНЫЙ УРОВЕНЬ

Бикяшев Э.А., Кубрин С.П., Мараховский М.А., Барановская Л.В., Поподько Д.О.

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия

e-mail: eabikyashhev@yandex.ru

Станнаты типа $M\text{SnO}_3$ (M = щелочноземельный катион) имеют структуру перовскита и, благодаря особенностям своей электронной структуры являются перспективными материалами для применения в качестве оптически прозрачных проводящих фаз и фотокатализаторов ультрафиолетового диапазона.

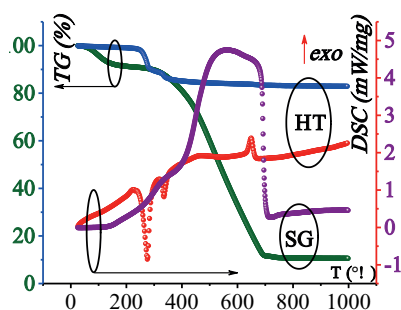


Рис. 1. Термограммы процесса нагревания прекурсоров синтеза BaSnO_3 , полученных HT и SG методами.

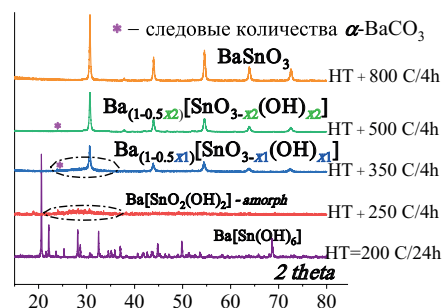


Рис. 2. Дифрактограммы $\text{Ba}[\text{Sn}(\text{OH})_6]$ и фаз, полученных его обжигом

В данной работе исследована возможность их синтеза с использованием активных прекурсоров, полученных гидротермальным (HT) и золь-гель (SG) методами. В гидротермальных условиях были получены гидроксостаннаты типа $M[\text{Sn}(\text{OH})_6]$. Гелевые формы рентгеноаморфны. Их термолит на воздухе исследован термогравиметрически (на рис. 1, в качестве примера, приведены термограммы, полученные в процессе синтеза BaSnO_3). Последовательность фазообразования исследована рентгенографически и методом мессбауэровской спектроскопии образцов, полученных при последовательных изотермических обжигах. Установлено, что независимо от выбора прекурсора, синтез BaSnO_3 проходит легче. При разложении $\text{Ba}[\text{Sn}(\text{OH})_6]$ вначале проходит частичная дегидратация с образованием $\text{Ba}[\text{SnO}_2(\text{OH})_2]$. Кубическая перовскитная фаза обнаруживается уже после обжига при $300\text{ }^\circ\text{C}/4\text{ часа}$ (в стронциевой системе – при $400\text{ }^\circ\text{C}$). Однако вплоть до $800\text{ }^\circ\text{C}$ по мессбауэровским спектрам в структуре BaSnO_3 обнаруживаются два сорта позиций ионов ^{119}Sn . Только при $1500\text{ }^\circ\text{C}$ удается сформировать структуру BaSnO_3 с параметром элементарной ячейки 4.113 \AA и практически нулевыми значениями изомерного сдвига и квадрупольного расщепления в спектре ^{119}Sn . Для SrSnO_3 только при $1500\text{ }^\circ\text{C}$ удается перевести рентгенографически кубическую фазу в характерную ромбическую сингонию (пр. гр. Pbnm). Из гелевых прекурсоров перовскитные фазы $M\text{SnO}_3$ образуются только при $700\text{ }^\circ\text{C}$. Однако при дальнейшем нагревании диффузионные процессы протекают значительно быстрее, чем в случае разложения $M[\text{Sn}(\text{OH})_6]$. После обжига при $1250\text{ }^\circ\text{C}/6\text{ часов}$ удается получить очень качественные кристаллические фазы с кубической и ромбической ячейками. Однако мессбауэровские спектры свидетельствуют о слабых искажениях локального окружения ^{119}Sn . Возможно, они связаны с небольшим нарушением кислородной стехиометрии.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №19-12-00205).

СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФЕРРОСТАНАТОВ СТРОНЦИЯ

Бикишев Э.А., Кубрин С.П., Попов А.В., Поподько Д.О., Барановская Л.В.

*Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: eabikyashev@yandex.ru*

Среди многочисленных фаз системы Sr–Fe–Sn–O активный интерес в последние годы вызывают твердые растворы со структурой перовскита: $\text{Sr}[\text{Sn}_{1-x}\text{Fe}_x]\text{O}_{3-\delta}$. Нарушение кислородной стехиометрии обусловлено проблемами стабилизации катиона Fe^{4+} . Установлено, что локальная и кристаллическая структура зависят от технологии синтеза, парциального давления кислорода. Самостоятельной задачей является поиск взаимосвязи структуры твердых растворов с перспективными свойствами (электронная/ионная проводимость, фотокаталитическая активность, колоссальное магнитосопротивление).

В настоящей работе были применены как твердофазные методы синтеза (по реакциям между оксидами Fe_2O_3 , SnO_2 и SrCO_3 или $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$), а также методы основанные на использовании водорастворимых реагентов: гидротермальный и золь-гель. Фазовый состав контролировался с использованием рентгеновского дифрактометра ARL X'TRA, оснащенного высокотемпературной камерой НТК1200. Локальная структура исследована методом ядерного гамма-резонанса, оптическое поглощение порошков и растворов при моделировании фотокалитических экспериментов регистрировались с помощью спектрометра Cary 5000. Установлено, что карбонатно-оксидная смесь позволяет получить однофазные твердые растворы при $x \leq 0.15\text{--}0.20$ с температурой финишного обжига $1400\text{--}1500$ °С. В гидротермальном методе даже при использовании хелатообразующих лигандов не удается подобрать условия для гомогенизации всех компонентов в щелочной среде. Лучшие результаты в большом интервале составов получены при использовании нитратно-оксидных смесей и золь-гель метода. Однако из-за большей локальной дефектности на материалах, полученных обжигом гелевых прекурсоров, сложно сформировать характерную для SrSnO_3 ромбическую сверхструктуру. Все твердые растворы (вплоть до $x = 0.85$) оказались псевдокубическими. Трехстадийным обжигом нитратно-оксидных смесей удалось показать, что вплоть до $x \approx 0.40$ твердые растворы кристаллизуются в ромбической сингонии. Впервые определены температуры переходов в высокотемпературную кубическую модификацию.

Интерпретацией мессбауэровских спектров удалось показать, что все ионы олова имеют степень окисления $+2$ и находятся в слабо искаженном кислородно-октаэдрическую окружении. Спектры от ядер ^{57}Fe удается описать в предположении наличия октаэдрически координированных ионов Fe^{4+} и трех сортов ионов Fe^{3+} , координированных октаэдрически и квадратно-пирамидально. Магнитные фазы формируются в интервале температур Нееля $25\text{--}75$ К при $0.50 \leq x \leq 0.85$.

Увеличение содержания ионов железа постепенно размывает и смещает в видимую область фундаментальную полосу поглощения SrSnO_3 . Это сказывается на фотокаталитической активности ферростанатов. В модельных экспериментах с раствором метиленового синего было установлено, что в присутствии станната стронция SrSnO_3 обесцвечивание происходит только при воздействии излучения с $\lambda = 250\text{нм}$. Введение 10% ионов железа позволяет выполнить обесцвечивание красителя под облучением с длиной волны $\sim 380\text{нм}$, а при $x = 0.30$ и 0.50 увеличивается скорость обесцвечивания при воздействии излучения с $\lambda \approx 440\text{нм}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-12-00205).

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА, ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ СИНТЕЗА И ПОСТСИНТЕЗНОЙ ОБРАБОТКИ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ, ЛОКАЛЬНУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ ФЕРРОСТАНАТОВ БАРИЯ

Бикяшев Э.А., Кубрин С.П., Тер-Оганесян Н.В., Попов А.В., Дудченко В.С.

*Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: eabikyashev@yandex.ru*

Твердые растворы $\text{Ba}[\text{Sn}_{1-x}\text{Fe}_x]\text{O}_{3-\delta}$ в зависимости от состава представляют интерес как особенностями своей электронной структуры, а также перспективами практического применения. В литературе, в основном описываются свойства отдельных материалов, полученных по твердофазным реакциям. При этом мало затрагивается влияние кислородной стехиометрии на их структуру и свойства.

В данной работе исследована возможность синтеза искомых фаз из карбонатно-оксидных, нитратно-оксидных смесей, а на примере $\text{Ba}[\text{Sn}_{1/2}\text{Fe}_{1/2}]\text{O}_{3-\delta}$ были опробованы, кроме того гидротермальный (НТ) и золь-гель (SG) методы. На данном этапе синтез с использованием $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ показал неудовлетворительные результаты. По реакции между BaCO_3 и оксидами SnO_2 и Fe_2O_3 в результате двухстадийного обжига при 1100/6 часов и 1300/10 часов (с промежуточной перешихтовкой) были получены фазы с кубической структурой перовскита ($0.2 \leq x \leq 0.85$), дифрактограммы которых не содержали примесных рефлексов. Однако в фазе $\text{Ba}[\text{Sn}_{0.15}\text{Fe}_{0.85}]\text{O}_{3-\delta}$ по данным мессбауэровской спектроскопии оказалась аномально завышена доля ионов Fe^{3+} в «тетраэдрической» координации. Методом температурного сканирования была определена температура перехода в магнитное состояние. Она монотонно увеличивается от ~10К до ~70К, что коррелирует с общим содержанием атомов Fe.

Использование активных форм прекурсоров позволяет снизить температуру получения чистой фазы $\text{Ba}[\text{Sn}_{1/2}\text{Fe}_{1/2}]\text{O}_{3-\delta}$ до ~700 °С (НТ) и 900 °С (SG), соответственно. Однако анализ профильных параметров дифракционных пиков свидетельствует о высоком вкладе микродеформаций в их интегральную ширину (особенно, при использовании SG-прекурсора). При дополнительном обжиге в токе кислорода величины микронапряжений поменялись незначительно. Но сильно уменьшился средний размер областей когерентного рассеяния (ОКР): от ~320 нм до ~95 нм. В результате окислительного обжига отклонение от кислородной стехиометрии (δ) по мессбауэровским данным уменьшилось, в среднем, от 0.345 до 0.175. Анализ мессбауэровских спектров от ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn свидетельствует о том, что наблюдающийся комплекс макроскопических и локальных изменений структуры в ходе насыщения фаз $\text{Ba}[\text{Sn}_{1/2}\text{Fe}_{1/2}]\text{O}_{3-\delta}$ кислородом можно объяснить тем, что они, главным образом, вызываются усиливающимися искажениями полиэдров $[\text{SnO}_6]$. Отклонение от кислородной стехиометрии в установленном интервале приводит к появлению дефектов в окружении практически исключительно ионов железа. В то же время повышение доли ян-теллеровских катионов Fe^{4+} во второй координационной сфере по отношению к ионам Sn^{4+} способствует деформации связей в цепочках $-\text{O}-\text{Fe}^{4+}-\text{O}-\text{Sn}-\text{O}-\text{Fe}^{4+}-\text{O}$, что в свою очередь, объясняет уменьшение размеров ОКР.

Измерения в магнитной фазе $\text{Ba}[\text{Sn}_{1/2}\text{Fe}_{1/2}]\text{O}_{3-\delta}$ свидетельствуют о том, что спектр только ~15 % ионов олова подвергается зеемановскому расщеплению. Это говорит о сильной сегрегации катионов Sn и Fe в кислородно-«октаэдрических» позициях перовскитной структуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-12-00205).

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ (1-X-Y)PMN-XLMN-YPT НА ИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПОВЕДЕНИЕ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Бикяшев Э.А., Дармаева Н.Д.

*Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: eabikyashev@yandex.ru*

Система магнониобаты свинца-лантана (PMN-LMN) активно используется для исследования катионного упорядочения Mg^{2+}/Nb^{5+} в кислородно-октаэдрических позициях перовскитной структуры. Система $PMN-PbTiO_3$ (PT), в том числе с малыми добавками La^{3+} , представляет практический интерес, как материаловедческая основа разнообразных электромеханических и электрокалорических преобразователей.

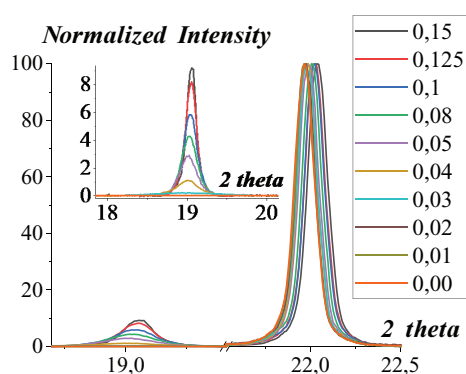


Рис. 1. Дифракционные профили рефлексов ($1/2 1/2 1/2$) относительно нормированных пиков (100) для образцов сечения с $y = 0$. На вкладке сверхструктурные пики ($1/2 1/2 1/2$) в увеличенном масштабе.

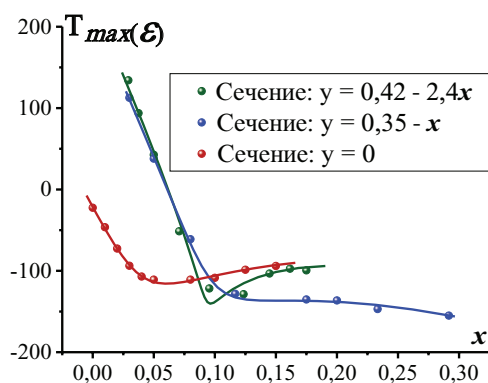


Рис. 2. Концентрационные зависимости температур диэлектрических максимумов (измерены на частоте 1кГц) для трех сечений исследованной системы.

В данной работе приводятся результаты подробного исследования фрагмента тройной системы вблизи вершины PMN. Подтверждено противоположное влияние ионов и на катионное упорядочение и локальную/макроскопическую поляризацию. В то же время показано, что первые признаки катионного упорядочения (при малых $[La^{3+}]$) в рентгеновской дифракции всегда обнаруживаются по сильно уширенным сверхструктурными рефлексами (рис. 1). Рассчитанные по ним средние размеры областей когерентного рассеяния значительно меньше аналогичных величин, найденных по фундаментальным отражениям. С ростом концентрации La^{3+} интегральные ширины пиков ($1/2 1/2 1/2$) и (100) постепенно выравниваются, что свидетельствует о постепенном переходе от упорядочения $(Mg)_{B'}:(Nb)_{B''}=1:1$ в наноразмерных кластерах к макроскопическому упорядочению типа $(Mg_{2/3}Nb_{1/3})_{B'}:(Nb)_{B''}=1:1$. Впервые показано, что переход к макроскопическому упорядочению сопровождается фиксацией температур диэлектрических максимумов (примеры на рис. 2). При этом, несмотря на продолжающееся усиление диффузности диэлектрического пика, частотная дисперсия проходит через максимум. Как следствие, наблюдаются экстремумы в концентрационных зависимостях энергии и температуры Фогеля-Фулчера. Это может быть связано с постепенной стабилизацией антисегнетоэлектрической системы дипольного упорядочения. Полученные результаты используются для объяснения закономерностей изменения индуцируемых в сильных полях поляризации и электрострикционной деформации.

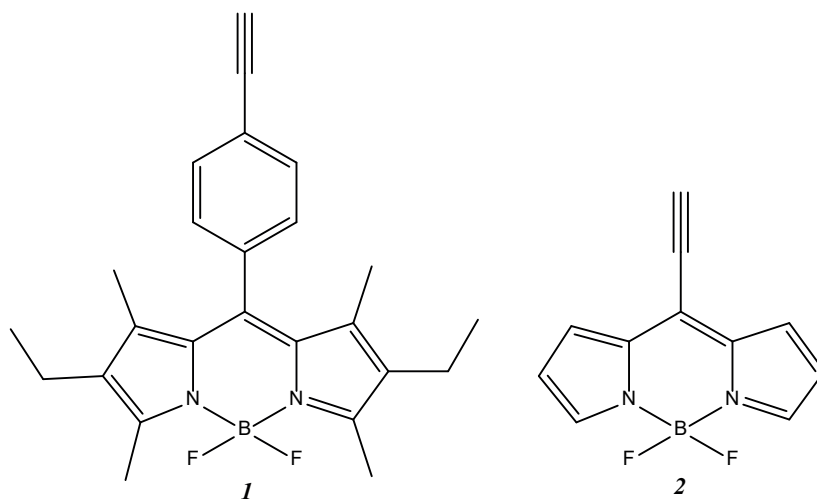
СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ BODIPY С ТРОЙНОЙ СВЯЗЬЮ

Водянова О.С., Банакова Е.А., Марфин Ю.С.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: osvodyanova@isuct.ru*

Создание молекулярных сенсоров, в том числе для биохимических исследований, а также терапевтических препаратов для лечения онкологических заболеваний – значимые области применения люминофоров в настоящее время. В качестве компонентов и активных сред наиболее эффективным представляется использование соединений, обладающих интенсивными хромофорными и флуоресцентными свойствами, а также высокой устойчивостью к агрессивным параметрам микроокружения. В дополнение к перечисленным характеристикам борфторидные комплексы дипирринов (**boron dipyrins**, bodipy) обладают широкими возможностями структурной модификации. Данные изменения приводят к тонкой настройке характеристик соединений, что используется для решения конкретных практических задач. Таким образом, соединения данного класса являются одними из самых перспективных органических флуорофоров.

В рамках работы синтезированы, очищены и идентифицированы борфторидные комплексы дипирролилметенов следующего строения:



Проанализированы спектральные и агрегационные свойства исследуемых соединений в ряду органических растворителей. Определено влияние структурных факторов (введение заместителей по периферии и удаление тройной связи от остова молекулы с помощью фенильного кольца) и сольватного окружения, моделирующего различные типы межмолекулярных взаимодействий, на фотофизические характеристики соединений в растворах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 19-73-10107).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Graf K., Korzdorfer T., Kummel S., Thelakkat M. Synthesis of donor-substituted meso-phenyl and meso-ethynylphenyl BODIPYs with broad absorption. *New Journal of Chemistry*. **2013**, 37, 1417–1426.
- [2] Bizet F., Ipuu M., Bernhard Y., Lioret V., Winckler P., Goze C., Perrier-Cornet J.-M., Decreau R. Cellular imaging using BODIPY-, pyrene- and phthalocyanine-based conjugates. *Bioorganic and Medicinal Chemistry*. **2018**, 26, 413–420.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КООРДИНИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ОБРАЗОВАНИЕ ИЗОПОРФИРИНАТОВ ЦИНКА В РАСТВОРЕ

Глазкова М.Е., Родина Ю.С., Агеева Т.А., Койфман О.И.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: mega2010@mail.ru*

Металлоизопорфиринаты являются таутомерами порфиринов и обладают большим потенциалом для применения в медицине, катализе, а также для создания функциональных материалов [1]. Нами ранее было установлено, что подобные соединения могут образовываться при взаимодействии металлопорфиринов с органическими пероксидами [2].

Спектральным методом впервые исследовано влияние процесса координации, а также концентраций координирующих добавок – пиридина (Py), имидазола (Im), 2-метилимидазола (2-MeIm) – на процесс образования бензоата мезо-тетрафенилбензоилоксиизопорфирината цинка в хлороформе.

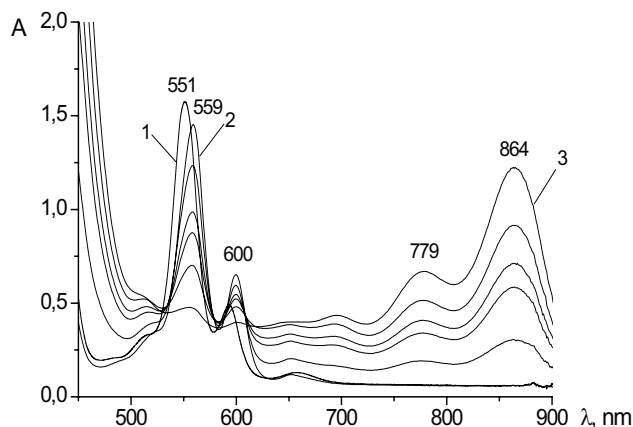


Рис. Электронные спектры поглощения:

1 – ZnTPP ($5 \cdot 10^{-5}$ моль/л), 2 – ZnTPP + Py ($1,25 \cdot 10^{-3}$ моль/л),
3 – ZnTPP(Py) + PV ($5 \cdot 10^{-4}$ моль/л), 25 °С, $\tau = 101$ мин

Установлено, что малые концентрации координирующих добавок (до стократного избытка по отношению к металлопорфируну) замедляют процесс образования металлоизопорфиринов, но не изменяют спектральные характеристики этого процесса (рисунок).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №18-03-00986.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Bhuyan J. Metalloisoporphyrins: from synthesis to applications. *Dalton Trans.* **2015**, 44(36), 15742–15756.
- [2] Глазкова М.Е., Агеева Т.А., Николаева О.И., Румянцева Ю.В., Койфман О.И. Взаимодействие цинкового комплекса мезотетрафенилпорфирина с органическими пероксидами в растворе. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* **2011**, 54(3), 104–108.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ РЕДОКС-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КАПСУЛ

**Гончаренко А.А.¹, Тараканчикова Я.В.¹, Трофимов М.А.¹, Пельтек О.О.¹,
Лепик К.В.², Муслимов А.Р.³**

¹*QR.bio, Санкт-Петербург, Россия*

²*Первый Санкт-Петербургский Государственный медицинский Университет
им. ак. И.П. Павлова, Санкт-Петербург, Россия*

³*Санкт-Петербургский Политехнический Университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия
e-mail: aleksandr.goncharenko@qrbio.net*

Одним из актуальных направлений развития фармакологии является создание нано-размерных систем доставки биологически активных веществ (БАВ) [1]. Моделируемые физико-химические свойства таких носителей БАВ позволят преодолеть неоптимальный характер распределения нативного вещества *in vivo*, а также доставить действующее вещество непосредственно в клетки интереса.

Настоящая работа сосредоточена на разработке систем внутриклеточной доставки на основе биodeградируемых полимеров. Структура частицы-носителя представляет собой капсулу, состоящую из политиол содержащих мономеров, связанных между собой системой дисульфидных связей. Преимущество использования дисульфидной связи заключается в возможности её разрушения в организме лишь под действием восстановительных соединений (НАДФ-Н, свободный цистеин, гомоцистеин, глутатион), в значительной мере содержащихся в цитоплазме клетки и практически отсутствующих во внеклеточной среде. Дополнительным преимуществом дисульфидной связи является эффект усиленного проникновения, основанный на реакции тиол-дисульфидного обмена [2]. Свободные тиоловые группы, находящиеся на поверхности клетки, разрывают дисульфидные связи, одновременно образуя ковалентную связь с носителем, это позволяет повысить степень адгезии капсулы к мембране клетки и увеличить эффективность захвата.

Новизна работы заключается в разработке метода межфазной поликонденсации политиолов с использованием обратной эмульсии. Водная фаза содержит мономер и БАВ, что позволяет эффективно производить инкапсуляцию практически любого водорастворимого соединения. Использование эмульсии также позволяет варьировать размер полученных частиц от сотен нанометров до десятков микрометров.

В настоящий момент проведена оптимизация синтеза капсул, доказана возможность запаковки гидрофильных низко- и высокомолекулярных соединений, а также произведена оценка цитотоксичности полученных транспортных систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант №19-29-04025 и №19-015-00098.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Shim M.S., Kwon Y.J. Stimuli-responsive polymers and nanomaterials for gene delivery and imaging applications. *Advanced Drug Delivery Reviews*. **2012**, 64(11), 1046–1059.
- [2] Song Q., Wang X., Wang Y. Reduction responsive self-assembled nanoparticles based on disulfidelinked drug-drug conjugate with high drug loading and antitumor efficacy. *Mol Pharm*. **2016**, 13(1), 190–201.

КОВАЛЕНТНАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПОЛИАЛЛИЛАМИНА МОЛЕКУЛАМИ РОДАМИНА-Б И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ СВЯЗЫВАНИЕ С КЕПЛЕРАТОМ Mo_{132}

Гржегоржевский К.В.¹, Туктакиева К.Э.

¹Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия
e-mail: kirillvalentinovich@urfu.ru

В рамках концепции по созданию систем пролонгированного высвобождения биоактивных молекул (БМ), ассоциированных с нанокластерным полиоксомолибдатом (ПОМ) – Кеплератом Mo_{132} , с функцией обратной связи (мониторинга остаточной концентрации БМ) нами были проведены эксперименты по разработке методики ковалентной модификации полиаллиламина гидрохлорида (ПАХ) молекулами ксантенового красителя родамина-Б (РдБ), находящегося в катионной форме, а также было изучено поведение системы «ПАХ-РдБ-ПОМ-Глутаровый диальдегид» в водном растворе при pH-зависимой деструкции Mo_{132} . Выбор Кеплерата в качестве ядра-носителя БМ обусловлен его способностью как макроаниона к ассоциации с широким спектром органических молекул, в том числе, белковой природы, за счет электростатических, ван-дер-Ваальсовых взаимодействий и водородных связей. При физиологическом значении pH происходит постепенная деструкция ПОМ, что приводит к высвобождению БМ и разгоранию флуоресценции ассоциированного с ним РдБ.

На первом этапе нами был получен NHS-эфир РдБ (NHS-РдБ), который далее был ассоциирован с Mo_{132} в водном растворе (pH = 4.2) и затем добавлен к водному раствору ПАХ (конечное значение pH = 2.8). При такой кислотности среды гидролиз NHS-эфиров протекает медленно, полимер находится в протонированной форме. После перемешивания (2 часа) раствор был разделен на две части. К первой добавили ацетон, что привело к выделению ассоциата ПАХ- Mo_{132} в виде отдельной вязкой фазы, тогда как РдБ целиком остался в растворе. Ко второй части был добавлен сшивающий агент (глутаровый диальдегид – ГДА, ПАХ:ГДА=1:0.06). Полученный гель имел темно-малиновую окраску и проявлял сольватохромный эффект: при замене воды на ацетон в структуре геля в областях, свободных от ПОМ, происходило разгорание флуоресценции, в CH_3CN (апротонный растворитель) снова происходило тушение, которое исчезало при добавлении небольшого количества воды. При выдерживании геля в тетраборатном буфере (pH = 9.18) происходила деструкция ПОМ и высвобождение связанных с ним молекул РдБ, что подтверждает идею о высвобождении БМ, ассоциированных с ПОМ. При этом структура геля позволяла обратимо сорбировать и десорбировать сводный РдБ.

Для проведения ковалентной модификации полимера ПАХ был переведен в несолевую форму (ПАА) путем обработки анионитом. К раствору ПАА в метаноле был добавлен NHS-РдБ. Смесь перемешивали в течение 2 дней в атмосфере аргона, после чего раствор перенесли в диализную мембрану (12 кДа) и поместили в дистиллированную воду на сутки при перемешивании. Раствор полимера сохранил интенсивную окраску родамина-Б, а принимающий раствор приобрел слабый розовый оттенок. Подобный эксперимент, проведенный не в метаноле, а в водной среде с ПАА не привел к ковалентной модификации последнего и весь РдБ прошел через диализную мембрану в принимающий раствор. Таким образом, нами разработана методика ковалентной модификации ПАА в среде метанола молекулами РдБ и показана принципиальная возможность релизинга БМ после деструкции ПОМ.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 19-73-00177).

МЕХАНОХИМИЧЕСКАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ С ПОЛУЧЕНИЕМ КРЕМНИЙОКСИУГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ

Гришин И.С., Смирнов Н.Н.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: grish.in.03.97@gmail.com*

К кремнийоксиуглеродным композитам обычно относят материалы на основе оксикарбида кремния (SiOC), которые формально могут быть описаны как продукты внедрения углерода в сетевую структуру силикатов. Эти композиты отличаются уникальной сетевой архитектурой, а также нано- и микро-структурой, которая и определяет все свойства SiOC. Особый интерес эти соединения вызывают, так как они могут быть основой для синтеза мультикомпонентных композитных материалов, обладающих заданными свойствами, например в результате внедрения металлов. Высокая прочность, термическая и химическая устойчивость расширяют область применения оксикарбидов кремния. С технологической точки зрения они могут быть отличными носителями для катализаторов или адсорбентами. Известны случаи их применения для очистки сточных вод. Однако синтез кремнийоксиуглеродных композитов в настоящее время является относительно дорогостоящим, поскольку подразумевает использование прекурсоров с высокой стоимостью, а также термической обработки при высокой температуре. Поэтому поиск новых способов получения этих уникальных материалов является актуальной проблемой.

В работе предложен новый подход к синтезу кремнийоксиуглеродных композитов, основанный на взаимодействии более дешевого активированного угля и белой сажи при их механической обработке в измельчающем оборудовании. Деформационные процессы значительно изменяют структуру реагентов, а подводимая механическая энергия ускоряет протекающие реакции за счет локальных перегревов. Было обнаружено, что взаимодействие активированного угля, белой сажи и кислорода воздуха имеет несколько последствий. Во-первых, окисление угля, в результате которого изменяется его химическая структура, а во-вторых, образование связей между активированным углем и диоксидом кремния белой сажи, что фактически означает образование оксикарбида кремния. Это подтверждено по результатам исследования синтезированных композитных материалов с применением различных экспериментальных методик, в частности рентгеновской дифракции, ИК-спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии и т.д. Интенсивная механическая обработка деформирует структуру активированного угля, поэтому удельная поверхность и пористость готового композита уменьшаются, однако это может быть компенсировано значительно более высокой адсорбционной активностью по отношению к определенным соединениям. В частности, кремнийоксиуглеродные композиты позволяют более эффективно очищать экстракционную фосфорную кислоту от фторид-ионов.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (Тема № FZZW-2020-0010). При выполнении исследований привлекалось оборудование ЦКП ИГХТУ.

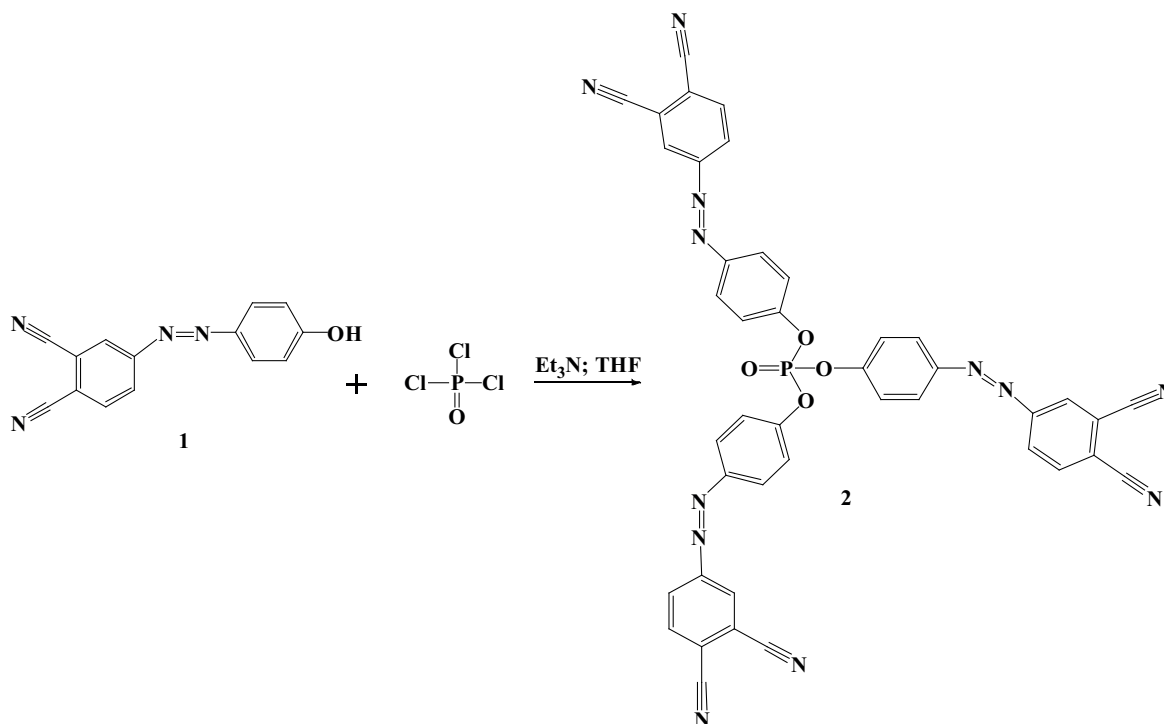
ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЙ МОНОМЕР НА ОСНОВЕ 4-[(E)-(4'-ГИДРОКСИФЕНИЛ)ДИАЗЕНИЛ] ФТАЛОНИТРИЛА

Гуськов С.А., Кострова Е.А., Малясова А.С., Тихомирова Т.В., Александрыйский В.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: bubnalla@yandex.ru

Полимеры на основе фталонитрилов отличаются высокими физическими свойствами и используются в качестве матриц для полимерных композиционных материалов (ПКМ). Для получения ПКМ на основе фталонитрилов особое внимание уделяется температурному диапазону процесса стеклования. Для фталонитрилов характерна повышенная температура данного процесса, поэтому так важна их модификация [1,2].

В данной работе впервые был получен трис-(4-(3,4-дицианодиазенил)фенил)фосфат **2** в результате реакции между 4-[(E)-(4'-гидроксифенил)дiazенил]фталонитрилом [3] **1** и оксихлоридом фосфора в ТГФ в присутствии триэтиламина [1].



Полученное соединение охарактеризованно методами ЭСП, ИК- и ^1H ЯМР спектроскопии, масс-спектрометрии и данными элементного анализа.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Yakovlev M.V., Morozov O.S., Afanaseva E.S., Bulgakov B.A., Babkin A.V., Kerpan A.V. *Reactive and Functional Polymers*. **2020**, 146, 104409. DOI:10.1016/j.reactfunctpolym.2019.104409
- [2] Bulgakov B.A., Babkin A.V., Dzhevakov P.B., Bogolyubov A.A., Sulimov A.V., Kerpan A.V. *European Polymer Journal*. **2016**, 84, 205–217. DOI:10.1016/j.eurpolymj.2016.09.013
- [3] Тихомирова Т.В., Груздева О.М., Шапошников Г.П. *Журнал общей химии*. **2015**, 85(12), 2049–2056.

ТРОПИЛИРОВАННЫЕ АМИНЫ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ОБЪЕКТЫ С АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Данилова Е.А.¹, Юнникова Л.П.², Суворова Ю.В.¹, Исляйкин М.К.¹

¹*Ивановский государственный химико-технологический университет, 153000, Российская Федерация, г. Иваново, Шереметевский проспект, 7*

²*Пермский государственный аграрно-технический университет им. акад. Д.Н. Прянишникова, 614045 Российская Федерация, г. Пермь, Петропавловская ул., 23*

Важной задачей медицинской химии является поиск и разработка новых, в том числе более безопасных и эффективных лекарственных препаратов. Со временем многочисленные бактерии и другие клинические патогены приобретают резистентность к лекарствам и приводят к росту заболеваемости. Для первичного отбора наиболее перспективных соединений широко применяются методы биоинформатики, которые позволяют не только осуществлять прогнозирование различных видов биологической активности, но и оценивать острую токсичность изучаемых химических соединений.

В настоящее время насчитывается большое количество лекарственных средств, содержащих 1,3,5-циклогептатриеновый (тропилиденовый) фрагмент. Так, 1,3,5-циклогептатриеновый цикл входит в состав лоратадина – современного антигистаминного препарата, который обладает противоаллергическим, противозудным, противоэкссудативным действием, а также антидиабетического комплекса. Синтетические производные природных тропонов и трополонов (синтезируемых растениями и грибами) обладают противовирусным, антиканцерогенным, антибактериальным и противогрибковым действием. Например, туяплицины – антибиотики, содержащие в своем составе тропилиденовый цикл, ингибируют рост дрожжей рода *Candida*, грибковые болезни растений и деятельность микроскопических клещей.

В работе представлены данные по синтезу, свойствам и установлению строения, с использованием методов квантовой химии и РСА тропилированных амино- и диаминопроизводных гетероциклического ряда, а также компьютерное прогнозирование и экспериментальное тестирование их антимикробной активности.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-03-00888.

БАКТЕРИЦИДНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ С НАНОЧАСТИЦАМИ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ

Евдокимова А.В.¹, Евдокимова О.Л.²

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова, Иваново, Россия

e-mail: anastasia.eudokimova@mail.ru.

Поиск новых превентивных стратегий для предотвращения развития инфекций является одним из главных приоритетов на международном уровне. Наночастицы металлов и их оксидов представляют собой новый класс «наноантибиотиков», которые не вызывают резистентность у микроорганизмов, также нетоксичны, биосовместимы, обладают химически изменяемыми физическими свойствами, уникальными электрическими, тепловыми и механическими характеристиками. Создание новых антибактериальных агентов на основе гибридных органо-неорганических наноматериалов является одним из чрезвычайно перспективных направлений в борьбе с антибиотической резистентностью и нерациональным использованием антибиотических препаратов.

Гибридные материалы с органическим / неорганическим или био–неорганическим характером представляют собой не только новую область фундаментальных исследований, но также, благодаря своим замечательным новым свойствам и многофункциональной природе, гибриды открывают перспективы для многих новых применений в чрезвычайно разнообразных областях. Органические / неорганические гибридные материалы, полученные с помощью золь-гель подхода, быстро стали увлекательной новой областью исследований в области материаловедения. Бурное развитие деятельности в этой области в последнее десятилетие привело к значительному прогрессу как в фундаментальном понимании золь–гель процесса, так и в разработке и применении новых органических/неорганических гибридных материалов. Полимер -неорганический нанокомпозит представляет собой интересный подход к улучшению разделительных свойств полимерных материалов, поскольку они обладают свойствами как органических, так и неорганических, такими как хорошая проницаемость, селективность, механическая прочность, а также термическая и химическая стабильность.

Настоящая работа направлена на повышение эффективности антибактериальной терапии с помощью разработки новых типов гибридных органо-неорганических наноматериалов, полученных на основе водных суспензий наноцеллюлозы и наночастиц TiO_2 , Fe_3O_4 [1] и Cu_2O и их комбинаций ($\text{TiO}_2/\text{Cu}_2\text{O}$, $\text{TiO}_2/\text{Fe}_3\text{O}_4$) в различных соотношениях. Проведен комплексный анализ физико-химических, а также фотокаталитических и адсорбционных свойств полученных наноматериалов. Исследование антибактериальных свойств полученных пленок проведено против грамотрицательных (*E.coli*) и грамположительных (*Bacillus cereus*, *B. thuringiensis* subsp. *Israelensis*) бактерий с помощью диффузионных методов. В результате, применение наноцеллюлозы в качестве биоматрицы в сочетании с наночастицами оксидов металлов позволило получить материалы в виде пленочных структур, обладающих новыми, не присущими целлюлозе свойствами, такими как бактерицидными, магнитными, фотокаталитическими.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №18-33-00807 мол_а).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Евдокимова О.Л., Федулова А.Д., Евдокимова А. В., Кусова Т. В., Агафонов А. В. Получение гибридных нанокомпозитов на основе наноразмерной целлюлозы и магнитных наночастиц с фотокаталитическими свойствами. Перспективные материалы, 2019, № 7. С. 34–41. DOI: 10.30791/1028-978X-2019-7-34-41

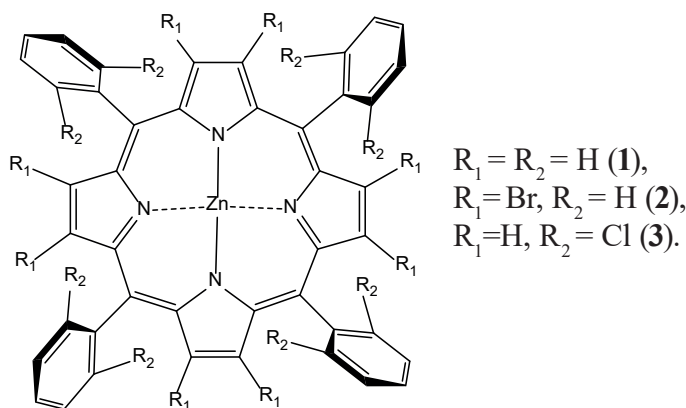
ВЛИЯНИЕ ГАЛОГЕНИРОВАНИЯ МАКРОЦИКЛА НА РЕЦЕПТОРНЫЕ СВОЙСТВА ZN(II)- ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К АМИНОКИСЛОТАМ

Койфман М.О.¹, Мамардашвили Н.Ж.²

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

В представленной работе синтезированы комплексы цинка(II) с тетрафенилпорфином (1), 2,3,7,8,12,13,17,18-октабром-тетрафенилпорфирином (2) и 5,10,15,20-тетра-(2,6-дихлорфенил)-порфирином (3). Методом спектрофотометрического титрования и ¹H ЯМР-спектроскопии изучены рецепторные свойства порфиринов (1-3) по отношению к метиловым эфирам ряда аминокислот [валин (L1), аланин (L2) и *para*-аминобензойная кислота (L3)].



Согласно данным ¹H ЯМР и квантово-химических расчетов данное изменение молекулярной структуры сопровождается существенным искажением макроцикла с образованием «седлообразных» конформеров. Рассчитаны константы устойчивости образующихся комплексов порфиринов (1-3) с лигандами (L1-L3) и найдено соответствие между экспериментальными и термодинамическими значениями энергии связи катион металла макроцикла-атом азота аминокислоты в соответствующих комплексах. Установлено, что максимальное увеличение комплексообразующей способности (в 25 раз) наблюдается в случае одновременного наличия в макроциклическом рецепторе восьми атомов брома (в пиррольных фрагментах) и восьми атомов хлора (в *ortho*-положениях фенильных фрагментов). Образование аксиальных комплексов ZnP-L с высокими константами связывания подтверждали методами двойного ЯМР.

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований: проект №19-03-00078А, в части синтеза порфиринов и их комплексов с цинком; проект № 18-43-370001 р_а, в части исследования координационных свойств созданных порфириновых рецепторов.

ПОТЕНЦИАЛ ХЛОРИНА ДЛЯ ИНАКТИВАЦИИ SARS-COV-2

Койфман О.И.², Юрина Е.С.¹, Малясова А.С.², Зданович С.А.¹, Койфман М.О.²

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, г.Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет, г.Иваново, Россия
e-mail: yurina_elen77@mail.ru

Пандемия COVID-19 – остро респираторного вирусного заболевания, вызванного новым коронавирусом SARS-CoV-2 длится уже более 8 месяцев. На данный момент зарегистрировано уже более 46 миллионов подтвержденных случаев заболевания, более чем в 205 странах. И пока медики сражаются с эпидемией, ученые продолжают исследовать вирус и его особенности, ведется поиск лекарственных препаратов и испытание потенциальных вакцин.

Создание противовирусных препаратов, способных оказывать не только ингибирующее действие, но и обладающих вирулицидной активностью актуальная и злободневная задача. Как правило от момента идеи до выпуска фармакологическими компаниями действующего лекарства проходят десятилетия, так как кроме создания самого препарата длительные процедуры доклинических и клинических испытаний. В случае вирусной инфекции, вызванной COVID-19, и обостряющейся пандемии вопрос о использовании разрешенных в лечебной практике препаратов для лечения того или иного заболевания особенно актуален. Вирусная частица SARS-COV-2 содержит ряд неструктурных белков, часть из которых воздействует на гемоглобин. Это белки orf1ab, ORF3a, ORF10 они координируют атаку на 1-бета цепь гемоглобина, при этом происходит не только изменение конформации гемоглобина, но и осуществляется деметаллизация протопорфириновой группы, высвободившийся протопорфирин с высоким сродством взаимодействует с ORF8 [1]. С другой стороны, известно, что порфирины и родственные им соединения могут использоваться в терапии онкозаболеваний, и некоторые из них разрешены для применения в медицинских учреждениях РФ, в том числе препарат на основе хлорина [2, 3]. С учетом меньшей ароматичности, и более интенсивного дальневолнового поглощения хлорина по сравнению с протопорфирином и гемом, он вполне может ингибировать действие ORF8. Целью данной работы являлась *Ex tempore* оценка возможности использования хлорина для инактивации белка ORF8. Методом молекулярного докинга установлено, что энергия взаимодействия ORF8 с хлорином составляет $-9,6$ ккал/моль, что существенно выше, чем аналогичное значение, полученное для гема ($-8,3$ ккал/моль) и протопорфирина ($-7,9$ ккал/моль).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-04-60108)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] R. Read Flawed methods in “COVID-19: Attacks the 1-Beta Chain of Hemoglobin and Captures the Porphyrin to Inhibit Human Heme Metabolism”. **2020**
- [2] Койфман О.И. и др. Фотосенсибилизатор для фотодинамической терапии. *Патент на изобретение* RU 2548726 С2, 20.04.2015. Заявка №2013157604/15 от 25.12.2013.
- [3] Койфман О.И. и др. Фотосенсибилизатор и способ его получения. *Патент на изобретение* RU 2535097 С1, 10.12.2014. Заявка №2013136977/15 от 07.08.2013.

СОЛЬВАТАЦИЯ КВЕРЦЕТИНА В РАСТВОРИТЕЛЕ ВОДА–ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИД

Куранова Н.Н.¹, Кабиров Д.Н.¹, Кашина О.В.¹, Фам Тхи Лан², Усачева Т.Р.¹

¹Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Российская Федерация

²Вьетнамская академия наук и технологий, Институт тропической технологии, Ханой, Вьетнам
e-mail: oxt@mail.ru, ptlan@itt.vast.vn

Изучение фармакокинетических свойств биологически активных веществ является одним из важнейших этапов доклинических испытаний новых лекарственных препаратов. Распределение лекарств в тканях организма обычно происходит неравномерно из-за различий в интенсивности кровоснабжения, связывания с тканями, местного рН и проницаемости клеточных мембран и пропорционально значениям коэффициентов распределения этих веществ. В связи с чем появляется необходимость в экспериментальном определении коэффициентов распределения биомолекул *in vitro*.

Флавоноид кверцетин (QCT) относится к гидрофобным биомолекулам, проявляет противовоспалительное, антиоксидантное, противомикробное и противоопухолевое действие [1] и широко используется в фармацевтике.

В настоящей работе методом межфазного распределения вещества между двумя несмешивающимися фазами: водно-диметилсульфоксидного раствора и н-гексана определены коэффициенты распределения кверцетина (К) в растворителе вода-диметилсульфоксид (DMSO) при T= 298.15 К и рН 6.86 (фосфатный буфер) и рассчитаны энергии Гиббса переноса кверцетина из воды в растворитель H₂O-DMSO, также обладающий фармакологическими свойствами и способностью усиливать проникновение через биологические мембраны ряда лекарственных веществ, увеличивая тем самым их биодоступность. Концентрацию кверцетина определяли спектрофотометрически (УФ-спектрофотометр SPECORD M400).

Таблица. Коэффициенты распределения и изменение энергии Гиббса пересольватации кверцетина в растворителях вода-диметилсульфоксид

$\chi_{\text{DMSO, мол. д.}}$	0	0,1	0,3	0,5
К	0,30 ± 0,10	0,06 ± 0,03	0,02 ± 0,01	0,09 ± 0,02
$\Delta_{\text{tr}} G^0(QCT) \pm 0,50, \text{ кДж/моль}$	0	-4,12	-6,44	-3,03

Полученные результаты свидетельствуют об усилении сольватации кверцетина, при переходе от водных растворов к диметилсульфоксидным.

Представленные результаты могут являться моделью для изучения некоторых аспектов развития окислительного стресса и возможной роли в этом процессе полифенольных соединений. Эти данные также могут оказаться полезными при объяснении антиоксидантных свойств флавоноидов в уже существующих модельных системах.

Исследование проведено в Институте термодинамики и кинетики химических процессов Ивановского государственного химико-технологического университета (ИГХТУ) в рамках государственного задания на выполнение НИР (Тема №FZZW-2020-0009) и при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ в рамках научного проекта №19-53-54004.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Hollman P.C., Katan M.B. Dietary flavonoids: Intake, health effects and bioavailability. *Food Chem. Toxicol.* **1999**, 37, 937–942.

АФФИННОСТЬ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА КРОВИ К СИНТЕТИЧЕСКИМ И ПРИРОДНЫМ ПОРФИРИНАМ

Лебедева Н.Ш.¹, Юрина Е.С.¹, Губарев Ю.А.¹, Лебедев М.А.², Гусейнов С.С.¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

e-mail: yurina_elen77@mail.ru

Сывороточный альбумин крови выполняет множество жизненно-важных функций, среди которых поддержание осмотического давления, регуляторная функция, а также транспортная функция. Уникальное строение альбумина позволяет ему связывать и распределять по кровяному руслу различные по природе эндогенные (аминокислоты, жирные кислоты, гормоны, продукты метаболизма) и также экзогенные вещества (токсины, лекарственные препараты). Соединения порфиринового класса обладают фотодинамической активностью, т.е. под действием света способны аккумулировать и затем передавать световую энергию кислороду и другим рядом расположенным молекулам, генерируя активные формы кислорода (синглетный кислород, радикал ОН и др.). Из литературных данных известно, что гидрофобные порфирины имеют большую фотодинамическую активность, обладают лучшими показателями туморотропности, но при этом для их доставки к пораженному органу необходима эндо- или экзогенная транспортная система. В качестве эндогенного транспортного агента может выступать альбумин. Целью данной работы являлось сравнительное исследование аффинности альбумина к ряду природных и синтетических порфиринов (CoPc, CuPc, ZnHP, ZnDP, H2PP, H2HP, H2MP, H2DP, ClFeDP, ClFePP). Исследования проводили методами электронной адсорбционной и флуоресцентной спектроскопии, анализировались спектральные изменения при прямом и обратном титровании. Для всех изученных систем установлено тушение флуоресценции БСА (при длине волны возб. 295 нм обусловленной наличием Trp135 и Trp214 остатков в полипептидной цепи). Типичный спектр титрования представлен на рисунке. Спектральные данные были обработаны по методике Скетчарда, получены константы аффинности белка, в докладе проанализировано влияние периферийного замещения на свойства комплексов.

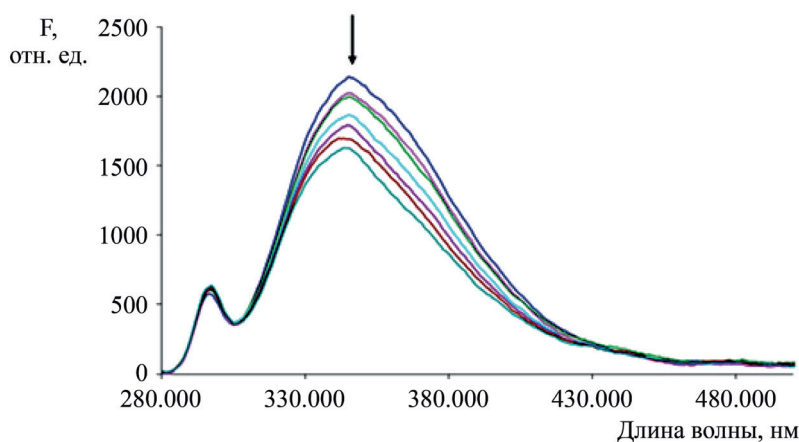


Рис. Спектр флуоресценции БСА (0,08 %) при титровании H2HP (0 – 4.0 E⁻⁶ M) в H₂O – NaCl (0.05 M) – ДМФА (0,19 M)

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АГЕНТЫ ТЕРАНОСТИКИ ОПУХОЛЕЙ НА ПЛАТФОРМЕ НОВЫХ (ЦИАНО-АРИЛ)ПОРФИРАЗИНОВЫХ ПИГМЕНТОВ С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ АРОМАТИЧЕСКИМИ ГРУППАМИ В ПЕРИФЕРИЙНОМ ОКРУЖЕНИИ МАКРОЦИКЛА

Лермонтова С.А.¹, Шилягина Н.Ю.², Костюк А.Б.², Балалаева И.В.², Клапшина Л.Г.¹

¹Институт металлоорганической химии РАН, Нижний Новгород, Россия

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (ННГУ),

Нижний Новгород, Россия

e-mail: lermontovasa@rambler.ru

В данной работе получены и охарактеризованы новые тетра(арил)тетрацианопорфиразины с конденсированными ароматическими группами в периферийном обрамлении макроцикла. Продемонстрирован их высокий потенциал в качестве сенсбилизаторов для фотодинамической терапии (ФДТ). Уникальной особенностью разработанных нами соединений является необычная для тетрапирроллов высокая чувствительность параметров флуоресценции (квантового выхода и времени жизни флуоресценции) к вязкости окружающей среды. Такая особенность фотофизического поведения полученных нами пигментов характерна для флуорофоров, известных в литературе под термином «флуоресцентные молекулярные роторы», и связана она с существенной сегментальной подвижностью отдельных фрагментов молекулы при возбуждении светом [1]. Важно отметить, что внутриклеточная вязкость является важным параметром, определяющим физиологический статус клеток живого организма. Динамика ее изменения дает важную информацию о протекающих внутриклеточных процессах. Большим преимуществом разработанных нами (циано-арил)порфиразиновых фотосенсбилизаторов по сравнению с другими известными тетрапирролами является возможность их использования в качестве высокочувствительных неинвазивных оптических сенсоров внутриклеточной вязкости, позволяющих в процессе ФДТ проводить мониторинг отклика опухоли на терапевтическое воздействие в режиме реального времени. Это обеспечивает строго персонифицированный, а следовательно, более эффективный подход к лечению.

Проведенные нами эксперименты *in vitro* на клеточной линии A431 (эпидермоидная карцинома человека) продемонстрировали принципиальную возможность не только успешного осуществления ФДТ, но и регистрации отклика раковых клеток на фотодинамическое воздействие в режиме реального времени. С помощью время- разрешенного имиджинга и конфокальной микроскопии (метод FLIM) было показано, что после начала ФДТ в интервале времени 5–45 мин в облученных клетках наблюдается быстрое увеличение времени жизни флуоресценции фотосенсбилизатора, связанное с увеличением регидности внутриклеточного микроокружения макроцикла в результате окислительного стресса, вызванного генерацией синглетного кислорода.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента МК-1469.2019.3.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kuimova M.K., Botchway S.W., Parker A.W., Balaz M., Collins H.A., Anderson H.L., Suhling K., Ogilby P.R. Imaging Intracellular Viscosity of a Single Cell During Photoinduced Cell Death *Nat. Chem.* **2009**, *1*, 69–73.

ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ ТИОПИРИНА И ЕГО КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ С ЖЕЛЕЗОМ (III)

Мабаткадамзода К.С., Сафармамадов С.М., Рахматуллоев Б.К.

*Таджикский национальный университет, г. Душанбе, Республика Таджикистан
e-mail: sash65@mail.ru*

Потенциометрически установлена обратимость окислительно-восстановительной системы RSSR/2RS, где RS – тиопирин, в растворах H_2SO_4 разной концентрации. При 298K электродный потенциал этой системы оказался равным 159,8 мВ.

С использованием окислительно-восстановительной системы RSSR/2RS впервые исследован процесс комплексообразования Fe(III) в широком интервале концентрации H_2SO_4 при различных температурах. Обработка экспериментальных данных показало, что для системы железо(III) – тиопирин– X моль/л H_2SO_4 , (X=1÷6 моль/л H_2SO_4) величина функции образования (\bar{n}) в зависимости от температуры изменяется от 0,25 до 5,31. Полученный экспериментальный факт свидетельствует в пользу образования пяти комплексных форм в изученной системе. В таблице приводятся величины ступенчатых констант устойчивости комплексов Fe(III) с тиопирином при 273–338K в растворе 6 моль/л H_2SO_4 .

Таблица. Величины ступенчатых констант устойчивости комплексов Fe(III) с тиопирином при 273–328 K в растворе 6 моль/л H_2SO_4

T, K	$\lg K_1$ [FeL(H ₂ O) ₅] ³⁺	$\lg K_2$ [FeL ₂ (H ₂ O) ₄] ³⁺	$\lg K_3$ [FeL ₃ (H ₂ O) ₃] ³⁺	$\lg K_4$ [FeL ₄ (H ₂ O) ₂] ³⁺	$\lg K_5$ [FeL ₅ (H ₂ O)] ³⁺
273	9,42 ± 0,01	6,54 ± 0,02	4,98 ± 0,10	4,3 ± 0,01	3,58 ± 0,10
288	8,60 ± 0,01	5,44 ± 0,09	4,49 ± 0,10	3,92 ± 0,02	3,26 ± 0,20
298	8,34 ± 0,01	5,04 ± 0,10	4,20 ± 0,08	3,70 ± 0,05	3,04 ± 0,10
308	7,86 ± 0,01	4,72 ± 0,10	3,95 ± 0,07	3,45 ± 0,05	2,81 ± 0,20
318	7,64 ± 0,01	4,58 ± 0,10	3,78 ± 0,07	3,24 ± 0,04	2,57 ± 0,10
328	6,69 ± 0,01	4,39 ± 0,10	3,64 ± 0,06	3,12 ± 0,05	2,44 ± 0,19

Из таблицы видно, что увеличение температуры отрицательно влияет на устойчивость, образующихся комплексов. Так, если при 273 K величина константы устойчивости монозамещённого комплекса составляет 9,42, то при увеличении температуры до 328 K эта величина уменьшается до 6,69 лог. ед., т.е. в 1,4 раза. С возрастанием количества молекул тиопирина во внутренней координационной сфере комплексов величины констант устойчивости уменьшаются, что связано со стерическими факторами.

Проведённые исследования показали, что при переходе от солянокислого раствора [1] к сернокислому устойчивость комплексных соединений Fe(III) с тиопирином увеличивается. Это увеличение очень значительно для монозамещённого комплекса. Так при температуре 273K разница в устойчивости монозамещённого комплекса в растворе H_2SO_4 по сравнению с раствором HCl составляет 4,42. Эта разница с возрастанием температуры уменьшается.

ЛИТЕРАТУРА

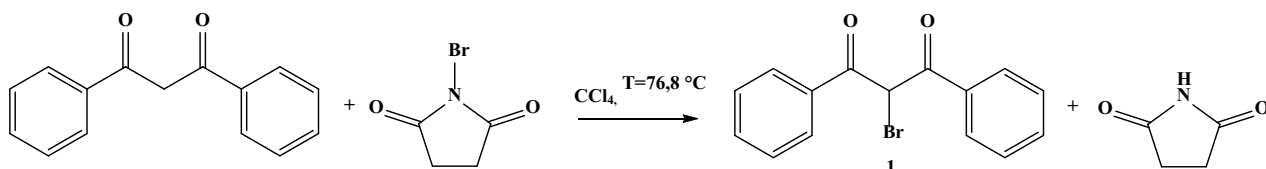
- [1] Рахматуллоев Б.К., Сафармамадов С.М. Комплексообразование железа (III) с 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 6 моль/л HCl. *Вестник ТНУ, сер. естеств. наук.* **2016**, № 1/3(200), 172–176.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИРАЗИНОВ

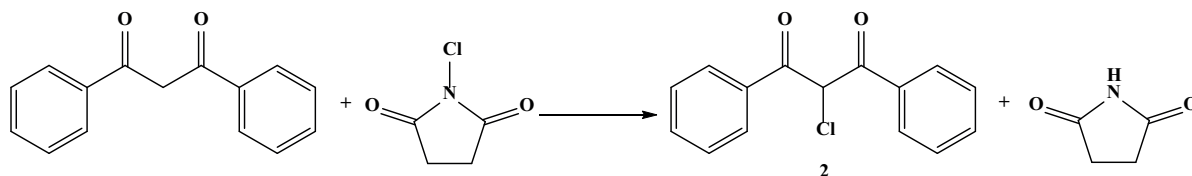
Малясова А.С., Смирнова П.Н., Трунникова А.С., Пичужкин Е.С.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново
e-mail: bubnalla@yandex.ru

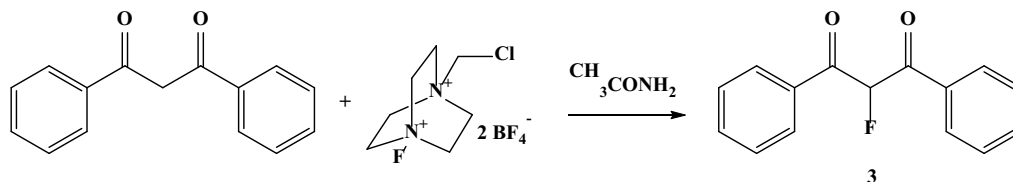
Бромирование дибензоилметана осуществляли N-бромсукцинимидом по методике [1]:



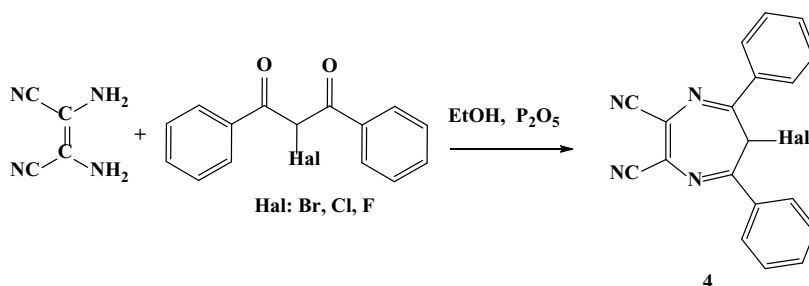
Хлорирование дибензоилметана осуществляли двумя способами: первый – аналогично [1], второй – в ионной жидкости [Bmim]PF₆: [2]:



Дибензоилфторметан получали путем усовершенствования методики [3]:



2,3-дициано-5,7-дифенил-6-галогендiazепин получали на основе синтезированных выше галогенпроизводных дибензоилметана и диаминомалеонитрила [4]:



Полученные соединения 1-4 охарактеризованы методами ИК-, ¹H ЯМР спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Roshchupkina, G. I. et al. *European Journal of Organic Chemistry*. **2004**, 2004(8), 1765–1773.
- [2] Meshram H. M. et al. *Tetrahedron letters*. **2006**, 6(47), 991–995.
- [3] Howard J. L. et al. *Green Chemistry*. **2017**, 12(19), 2798–2802.
- [4] Pia Donzello M. et al. *European journal of inorganic chemistry*. **1999**, 11, 2075–2084.

ОДНОСТАДИЙНЫЙ СИНТЕЗ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ХЕМОСОРБЕНТА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИНКА

Мельников А.А.¹, Смирнов Д.В.¹, Прозоров Д.А.¹, Афинеевский А.В.¹, Румянцев Р.Н.¹

¹*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: melnikoffwork@yandex.ru*

Оксид цинка и каталитические хемосорбенты на его основе получили широкое распространение в химической промышленности [1], например, в качестве каталитического хемосорбента для очистки технологических газов от сернистых соединений используют как чистый оксид цинка с развитой поверхностью, так и с различными промотирующими добавками, такими как оксид алюминия, меди, никеля. Количество вводимых добавок может достигать до 50 % [2]. Основной характеристикой эффективности работы сорбционного материала является его максимальная хемосорбционная емкость, измеренная до проскока сероводорода и других серосодержащих органических соединений, что может быть достигнуто увеличением удельной поверхности.

Цель данной работы исследование возможности одностадийного механохимического синтеза каталитического хемосорбента на основе оксида цинка, поиск корреляций природы и количества вводимого поверхностно-активного вещества (ПАВ), величин подведенной энергии при механоактивации, количество вводимой функциональной добавки – $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, с величинами удельной поверхности и размером пор каталитического хемосорбента. Механоактивация смеси ZnO и Al_2O_3 происходила в двух типах мельниц: ролико-кольцевая вибромельница VM-4 и планетарной мельницы «Активатор – 2SL».

После проведения процесса механоактивации в планетарной мельнице «Активатор – 2SL» наблюдается изменение цвета оксида цинка. Был получен энергодисперсионный анализ на электронном сканирующем микроскопе VEGA3 TESCAN, который показал отсутствие каких-либо примесей в виде намола, что исключает его образование в самой вибромельнице. Стоит отметить, что в ролико-кольцевой вибромельнице VM-4 такого эффекта изменения цвета оксида цинка не наблюдается при различных режимах проведения испытаний, что нельзя сказать про планетарную мельницу. В результате проведенных исследований величина удельной поверхности у лучшего опытного образца увеличилась до 29 м²/г. В докладе будут также представлены результаты исследований, которые устанавливают оптимальное время активации, его влияние на физико-химические свойства получаемого адсорбента.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР, тема № FZZW-2020-0010 (синтез в планетарной мельнице). Синтез в ролико-кольцевой мельнице выполнен при поддержке Стипендии Президента РФ (проект СП-3800.2019.1). План работ согласован с НИР Научного совета РАН по физической химии на 2020 (№ 20-03-460-28). При выполнении исследований использовалось оборудование ЦКП ИГХТУ

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ильин А.П., Прокофьев В.Ю., Гордина Н.Е. Экструдированные сорбенты на основе оксида цинка // Научные основы приготовления катализаторов. Творческое наследие и дальнейшее развитие работ профессора ИП Кириллова: монография/под ред. А.П. Ильина; ГОУ ВПО Иван. гос. хим.-технол. ун-т.–Иваново, **2008**. 156 с., ил. ISBN 978-6-9616-0269-2. С. 97.
- [2] Ильин А.П., Кириллов И.П., Широков Ю.Г. Выбор оптимальных условий приготовления формованного катализатора-хемосорбента на основе оксидов цинка и алюминия. // Изв. ВУЗ СССР. Химия и химическая технология, **1973**, Т. 17. Вып. 2. С. 246.

РАЗРАБОТКА ИЗДЕЛИЙ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ЛЬНА И ЛЬНОНАНОКОМПОЗИТОВ

Морыганов А.П., Дымникова Н.С.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия
e-mail: apm@isc-ras.ru*

На основе выявленных в ИХР РАН приемов целенаправленного регулирования гидролитической и окислительной деструкции природных спутников целлюлозы льна разработаны способы получения из низкономерного льноволокна высокоочищенных, высокосорбционных волокон для изготовления изделий медицинского назначения без использования экологически опасных кислых растворов хлорсодержащих реагентов и надуксусной кислоты. С учетом полученных данных разработаны технологические схемы и оптимизирован состав технологических линий по производству медицинской льноваты и антимикробных перевязочных средств «Биолен». Все изделия прошли государственную регистрацию, разрешены к промышленному производству и медицинскому применению, рекомендованы для принятия на обеспечение лечебных учреждений Минобороны РФ. В 2011 г. на специально построенном заводе «ЛенОм» (Омская обл.) освоен промышленный выпуск отбеленного льноволокна и, на его основе, – ваты медицинской гигроскопической хирургической льняной стерильной и нестерильной ВХЛС-«ИХР».

На основе отбеленного льноволокна в ОАО «НИИНМ» (г. Серпухов) разработаны оригинальные структуры нетканых полотен (атравматичных, ламинированных, дублированных). Натурные испытания изготовленных из них готовых изделий (перевязочных средств, впитывающих салфеток, текстильных носителей лекарственных и косметических препаратов) в клинических условиях и у потенциальных потребителей выявили их положительные гигиенические и функциональные свойства. Разработанные нами композиции антисептиков (в том числе, на основе наночастиц серебра) могут применяться для функционализации не только льняных, но и других целлюлозных материалов. Это позволяет обеспечить антимикробную активность многослойным марлевым салфеткам или нетканым полотнам на основе хлопковых и/или гидратцеллюлозных волокон при невысокой (в сравнении с аналогами) себестоимости [1].

Проведено сравнение антимикробной активности льноволокна, полученных разными способами и допированных препаратами серебра или четвертичных аммониевых солей [2]. Элементаризованное льняное волокно, полученное методом многократных циклических деформирующих нагрузок, принципиально отличается от известных аналогов (котонизированного волокна) практически полным отсутствием механических примесей. Установлено, что элементаризованное льноволокно более эффективно подавляет рост микрофлоры тест-культур *E.coli*, *Staphylococcus aureus* и дрожжеподобного гриба *Candida albicans*, чем механически очищенное.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 15-48-03021 р-центр-а).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Морыганов А.П. Инновационная продукция текстильного, медицинского и технического назначения на основе модифицированного короткого льноволокна. *Известия ВУЗов. Технология текстильной промышленности*, **2017**, № 1. С. 297–301.
- [2] Дымникова Н.С. Ерохина Е.В., Морыганов А.П. Исследование эффективности придания антимикробных свойств элементаризованному льняному волокну. *Химия растительного сырья*, **2018**, № 2. С. 191–197.

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБРАБОТКИ ПЭТФ ПЛЕНОК НА АДГЕЗИЮ КРАСОЧНЫХ СЛОЕВ

Муратов И.И.¹, Гарипов Р.М.¹, Ефремова А.А.¹, Хасанов А.И.¹

¹*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия
e-mail: iskander.muratov@mail.ru*

В настоящее время ПЭТФ пленки, которые входят в структуру многослойной пищевой упаковки, являются основой для нанесения красочных слоев. При этом многим упаковочным материалам требуются высокие барьерные свойства по кислороду и влаге. Для придания барьерных свойств, в структуре многослойной упаковки широко используются ПЭТФ пленки с нанесенным слоем оксида алюминия (АlОх). Однако данные пленки имеют недостаток, связанный с низкой адгезией красочных слоев к слою АlОх. В связи с этим представлял интерес изучить влияние акрилового покрытия (АП), нанесенного поверх слоя АlОх, на улучшение адгезии красочных слоев.

В качестве объектов исследования были использованы пленка ПЭТФ с барьерным покрытием на основе оксида алюминия (ПЭТФ/АlОх) толщиной 12 мкм, и полученная на её основе пленка ПЭТФ/АlОх/АП с акриловым покрытием толщиной 14,5 мкм. В качестве сравнения были исследованы промышленные марки ПЭТФ пленок производства фирмы Uflex (Индия) толщиной 12 мкм: ПЭТФ F-PAР с коронной обработкой, ПЭТФ F-UPF с модифицированной поверхностью, ПЭТФ F-SHE с химически модифицированной поверхностью, ПЭТФ F-PLX с барьерным покрытием оксида алюминия. Оценка свободной поверхностной энергии (СПЭ) ПЭТФ пленок проводилась с помощью тестовых маркеров Accu Dyne Test (Diversified Enterprises, США), заполненных чернилами с известным значением поверхностного натяжения. В качестве красочных слоев были использованы поливинилхлоридные краски PV-77 синего цвета и PV-87 пурпурного цвета (Siegwerk, Германия). Красочные слои были нанесены на ПЭТФ пленки с помощью пробопечатного станка K Printing Proofer (RK Print, Великобритания), имитирующего метод глубокой печати. Оценка адгезии красочных слоев проводилась путем отслаивания адгезионного скотча Scotch (3M, США) шириной 25 мм с помощью универсальной испытательной машины AG-X Plus (Shimadzu, Япония) при скорости 500 мм/мин.

Диапазон значений СПЭ промышленных марок ПЭТФ пленок и пленки ПЭТФ/АlОх составил 44–56 Дин/см. Нанесение защитного покрытия привело к снижению СПЭ пленки ПЭТФ/АlОх/АП до 36 Дин/см. Диапазон значений усилия отслаивания скотча от красочных слоев PV-77 и PV-87 у образцов промышленных марок ПЭТФ пленок и образца пленки ПЭТФ/АlОх/АП составил 4,22–4,81 Н/25мм. На данных пленках перехода красочного слоя на адгезионный скотч не наблюдалось, что говорит о высокой адгезии красок PV-77 и PV-87 к данным пленкам. У образца ПЭТФ/АlОх усилие отслаивания адгезионного скотча составило 0,32–0,72 Н/25 мм. При этом наблюдался полный переход красочного слоя на адгезионный скотч, что говорит о низкой адгезии красок PV-77 и PV-87 к слою оксида алюминия.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что промышленные марки ПЭТФ пленок с различной поверхностной обработкой имеют высокую адгезию красочных слоев. При этом пленка ПЭТФ/АlОх существенно уступает им по адгезионным свойствам. Нанесение поверх слоя оксида алюминия акрилового покрытия улучшает адгезию красок до уровня промышленных марок ПЭТФ пленок.

ХИМИЯ ЭНЕРГОЕМКИХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ

Мясоедова В.В.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр Химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук, Москва, Россия,
veravm777@gmail.com*

Химическая модификация целлюлозы, ее производных и синтетических полимеров, разработка способов повышения их совместимости и введения разнообразных дисперсных наполнителей являются актуальными для развития современной химии и науки о материалах и энергоемких композитов. Задачи этого направления для синтетических полимеров различной химической природы могут быть решены не только в процессе синтеза их из олигомеров, но и в процессе синтеза их из олигомеров, но и путем химических превращений уже существующих полимеров. С другой стороны, для одного из наиболее распространенных на Земле и важнейших представителей класса природных полимеров – целлюлозы, химический состав и полиморфные превращения которой обусловлены в природе биохимическим синтезом, придание заданных свойств возможно как химической модификацией ее структуры, так и путем создания композитов за счет повышения совместимости природного и синтетического полимеров с применением разнообразных модификаторов [1].

Рассмотрены инновационные подходы к созданию составов и способов получения композитов на основе смесей природных полимеров за счет нахождения возможности совместить целлюлозу, полисахариды и их производные и синтетическими полимерами и высоко-дисперсными добавками неорганических веществ.

Представлены экспериментальные результаты по введению термоэластопластов, например, полиолефинового и стирольного типов в качестве компатибилизаторов, способствующих модификации полимеров при переработке смесевых композиций в формованные изделия методами экструзии, литья под давлением и термопрессования.

Приводятся экспериментальные данные, полученные методами ИК-фурье спектроскопии, термогравиметрического анализа и дифференциальной сканирующей калориметрии, полученные в широком диапазоне составов для смесей полиолефинов, этилцеллюлозы, бутадиен-нитрильных каучуков, модифицированных сополимерами стирол-этилен-бутилен-стирола, стирол-бутилен-стирола и другими термоэластопластами в широком диапазоне составов.

Показано, что в изученной области составов достигнута совместимость полимеров, причем модификация не связана с химическим взаимодействием, а обусловлена изменением аморфно-кристаллического состояния компонентов и композиций.

Установлено существенное улучшение теплофизических и других эксплуатационных свойств формованных топливных изделий [2] на основе смесей сортированных вторичных полимеров (из лигноцеллюлозных материалов, полиолефинов, каучуков, пластиковых отходов электронного оборудования, автокомпонентов и изношенных шин), в том числе дисперсно-наполненных.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Химия энергоемких полимерных композитов: Монография / В.В. Мясоедова. М.: ИД Академии Жуковского, 2020. 212 с.
- [2] Патент на изобретение RU N2697865 (Мясоедова В.В.), 2019.

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ ДЛЯ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Одинцова О.И., Усачева Т.Р., Петрова Л.С., Кабиров Д.Н.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Российская Федерация
e-mail: milafck@gmail.com*

Придание текстильным материалам антимикробных свойств преследует две основные цели: защиту от действия микроорганизмов и защиту от действия патогенной микрофлоры объектов, соприкасающихся с текстильными материалами. Достижение этих целей приобретает особое значение в связи со сложившейся эпидемиологической ситуацией и её возможными последствиями.

В связи с этим в данной работе методом изотермической калориметрии титрования изучено взаимодействие поверхностно-активных веществ -Карбоксипав, а так же полиэлектролитов ВПК-402 и Акремона В, использующихся при обработке волокнистых материалов. Метод изотермической калориметрии является одним из самых востребованных методов, как для проведения научных исследований, так и для тестирования качества или реакционной способности различных материалов, используемых в промышленности. Одной из областей применения ИКТ может быть термодинамический контроль мицеллообразования в растворах полиэлектролитов, применяющихся в качестве текстильно-вспомогательных веществ. Термохимические измерения выполнены на калориметрической системе ТАМ III (TA Instruments) при $T = 298.15$ К. Было проведено две серии экспериментов. В первой серии в калориметрическую ячейку помещали раствор Карбоксипав, к которому последовательно был добавлен раствор ВПК-402 и затем – раствор Акремона В. В отдельных экспериментах было проведено добавление ВПК-402 в калориметрическую ячейку, содержащую воду, и, аналогично, добавление Акремона В к воде. Вторая серия опытов состояла в изучении взаимодействия ВПК с Акремоном В. Для этого в основном опыте в калориметрическую ячейку загружался раствор ВПК с начальной концентрацией 10г/л. Титрантом служил раствор Акремона В с концентрацией 20 г/л. Тепловой эффект взаимодействия полиэлектролитов был откорректирован на соответствующий тепловой эффект холостого опыта. Условия основных и корректировочных (холостых) экспериментов в каждой серии были одинаковыми. Регистрируемые тепловые эффекты находились в пределах от $0.3 \cdot 10^{-3}$ Дж до $3.0 \cdot 10^{-3}$ Дж. Установлено, что смешение Карбоксипав с ВПК-402 эндотермично, а дальнейшее добавки Акремона В к раствору Карбоксипав + ВПК-402 свидетельствуют о экзотермичности процесса смешения. Однако, взаимодействие ВПК-402 с Акремоном В сопровождается эндоэффектом, а разведение раствора ВПК-402 в воде -экзоэффектом. В случае добавления раствора Акремона В в воду первоначальные добавки титранта сопровождаются эндоэффектами, а затем знак теплового эффекта меняется на противоположный. В результате смешения раствора ВПК с раствором Акремона В визуально наблюдалось помутнение раствора, что свидетельствует об образовании нестехиометрического комплекса ВПК-402 – Акремон В, а также подтверждается результатами калориметрических титрований.

Работа выполнена в Институте термодинамики и кинетики химических процессов ИГХТУ с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ».

БИСТИАДИАЗОЛЫ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Петухова Е.А., Суворова Ю.В.

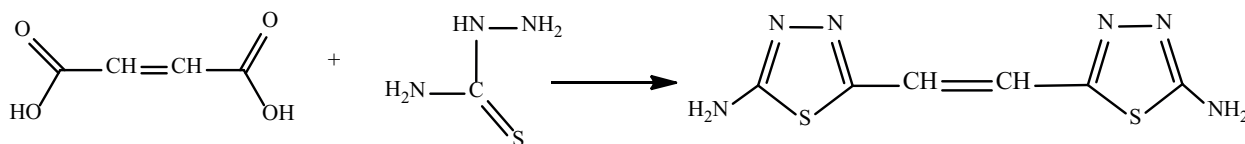
*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: butina@isuct.ru*

Ранее установлено, что двухъядерные диамины, содержащие 1,3,4-тиадиазольные циклы, проявляют антибактериальную активность и противогрибковые свойства [1], поэтому могут найти применение в фармакологии для создания новых лекарственных препаратов.

Для получения бистиадиазолов используют конденсацию дикарбоновых кислот с тиосемикарбазидом в среде соляной кислоты, хлорокиси фосфора или оксида фосфора (V) [1, 2]. Однако в предложенных условиях методики оказались трудновоспроизводимыми.

Ранее, внося изменения в известные литературные методы синтеза [1, 2], мы получили бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)этан и -бутан двумя способами: в среде соляной кислоты и в среде хлорокиси фосфора [3, 4].

Для продолжения ряда двухъядерных тиадиазолов нами взаимодействием малеиновой кислоты с тиосемикарбазидом в среде соляной кислоты был синтезирован бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)этен. Строение полученного соединения подтверждено данными электронной, ИК спектроскопии и масс-спектрометрии.



Потенциально бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)этен обладает антибактериальными свойствами, кроме этого, может быть использован для синтеза макрогетероциклических соединений с увеличенной координационной полостью, имеющих непрерывающуюся систему сопряжения, т.е. перспективных соединений для фотодинамической терапии онкологических заболеваний.

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента РФ МК-1396.2020.3.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ashutosh B., Ankur J., Kumar N.R., Sonia G., Niharika S., Vivek D., Pramod S. Synthesis, Characterization and Antimicrobial Activity of Azol Substituted Derivatives. *International Journal of Pharmaceutical Sciences and Drug Research*. **2009**, 1(3), 207–210.
- [2] Пат. CN 103880777 A, CO7D 285/135 (2006.01). Способ получения диамина бистиадиазола / Инь Давэй, Лиу Бей Бей, Лиу Ютин, Ванг Джин Юй, Ник Ян; заявитель: Университет науки и технологии Шэньси. – №201410081741.1; заявл. 06.03.2014; опублик. 25.06.2014.
- [3] Butina Yu.V., Danilova E.A., Kudayarova T.V. Synthesis and Properties of AABAAB-Type Macroheterocyclic Compounds with Fragments of 1,2,4- and 1,3,4-Thiadiazole. *Macroheterocycles*. **2016**, 9(2), 206–210.
- [4] Авраменко Л.Н., Бутина Ю.В. Синтез бис(5-амино-1,3,4-тиадиазол-2-ил)бутана. *Сборник тезисов Всероссийской школы-конференции «Фундаментальные науки специалисту нового века»*, Иваново, **2017**. С. 155.

ИЗУЧЕНИЕ ЭКСТРАКООРДИНАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ЛИГАНДОВ ПОРФИРИНАТАМИ ЦИНКА И КОБАЛЬТА В РАСТВОРЕ

Родина С.С., Петрова М.В., Агеева Т.А., Койфман О.И.

*Институт макрогетероциклических соединений
Ивановского государственного химико-технологического университета,
e-mail: karljukmaria@rambler.ru*

Особый интерес для придания функциональных свойств полимерным материалам представляют порфирины и их металлокомплексы [1]. Исследование возможности координационной иммобилизации порфиринов металлов на полимеры-носители имеет важное значение в связи с тем, что металлопорфирины – это известные высокоэффективные катализаторы многих окислительно-восстановительных процессов, осуществляющие свои функции посредством экстраординации малых молекул, вовлеченных в эти процессы.

Целью работы явилось изучение процесса взаимодействия мезо-тетрафенилпорфирината цинка (ZnTPP) и тетра-(*n*-метоксифенил)порфирина кобальта (CoTnMPP) с поли-4-винилпиридином (P4VP) и сополимерами 4-винилпиридина со стиролом, выступающими в роли полимера-носителя. Методами ЭСП и флуоресцентной спектроскопии был исследован процесс координации ZnTPP и CoTnMPP с полимерными лигандами в растворе.

Установлено, что реакция комплексообразования полимерного лиганда с тетра-(*n*-метоксифенил)порфиринатом кобальта и мезо-тетрафенилпорфиринатом цинка в зависимости от соотношения компонентов полимерного экстракомплекса и концентрации полимера может происходить как по внутримолекулярному, так и по межмолекулярному механизму. Скорость взаимодействия порфирината металла с полимерными лигандами и константа устойчивости экстракомплекса увеличиваются с увеличением количества пиридинных фрагментов в сополимере. При малых концентрациях полимера в растворе процесс образования экстракомплексов металлопорфиринов происходит в течение нескольких дней.

Показано, что, реакция образования экстракомплексов металлопорфиринов в диметилформамиде протекает через стадию замещения диметилформамида (ДМФА) на полимерный лиганд. Используемый в качестве основной среды неполярный растворитель (хлороформ) очень слабо сольватирует молекулу металлопорфирина, поэтому процесс замещения молекулы растворителя экстралигандом происходит быстрее, чем при использовании полярного растворителя (ДМФА). Присутствие диметилформамида смещает равновесие реакции экстраординации в сторону исходного металлопорфирина.

Полученные координационносвязанные полимеры охарактеризованы UV-Vis и спектрами флуоресценции, рассчитаны квантовые выходы флуоресценции экстракомплексов мезо-тетрафенилпорфирината цинка с поли-4-винилпиридином в дихлорметане и хлороформе. Методом спектрофотометрического титрования оценены константы устойчивости экстракомплексов тетра-(*n*-метоксифенил)порфирината кобальта с полимерными лигандами и показано, что устойчивость полимерных экстракомплексов зависит от состава сополимеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-03-00986).

ЛИТЕРАТУРА

[1] Койфман О.И., Агеева Т.А. Порфиринполимеры. Синтез, свойства, применение. М.: ЛЕНАНД, 2019, 304 с.

ХАРАКТЕР ДЕЗАКТИВАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ РЕАКЦИЙ ЖИДКОФАЗНОЙ ГИДРОГЕНИЗАЦИИ $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ АНИОННЫМИ ЯДАМИ

Смирнов Д.В., Прозоров Д.А., Афинеевский А.В., Мельников А.А.

Время функционирования катализатора лежит в пределах от долей секунд до нескольких лет. Скорость и характер дезактивации катализатора на основе металлов и их оксидов определяет выбор параметров проведения процесса, типа химического реактора, а также методик лабораторных испытаний. На протекание химического процесса значительное воздействие оказывают процессы массо- и теплопереноса, наличие побочных реакций. Кроме того, экспериментально установлено влияние адсорбционной и каталитической деформации на структуру и механические свойства различных адсорбентов и катализаторов. Потеря каталитической активности может происходить из-за изменения структуры поверхности и объема гранулы катализатора, а также при взаимодействии с каталитическими ядами.

Целью настоящей работы было установления характера процесса дезактивации адсорбционных центров поверхности никелевых катализаторов реакций жидкофазной гидрогенизации нанесенных на подложку в виде $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, отвечающих за адсорбцию индивидуальных форм водорода.

В качестве растворителя использовали воду. Модельным соединением содержащим кратную углеродную связь был выбран диэтиловый эфир малеиновой кислоты. Кинетические исследования реакции жидкофазной гидрогенизации проводили статическим методом в нестационарных условиях в герметичном жидкостном реакторе, обеспечивающим интенсивное перемешивание реакционной массы, при атмосферном давлении водорода в системе.

Синтез нанесённых катализаторов, используемых в работе, имел следующие стадии: подготовка носителя, пропитка его водным раствором нитрата никеля, сушка катализатора и восстановление оксидов никеля в токе водорода при температуре $273+450\text{K}$. Активность катализатора оценивалась по скоростям гидрирования модельного соединения при степенях превращения менее 0,2. Контролируемую дезактивацию активных центров катализатора проводили добавлением в объёмную фазу строго определенных количеств 0.05 М раствора сульфида натрия, рН которого соответствовал водородному показателю реакционной среды.

Анализ процесса селективности дезактивации катализатора по методике Бартоломью []. Согласно полученным данным, можно утверждать, что в зависимости от количества нанесенного металла характер дезактивации поверхности катализатора может меняться от селективного до антиселективного, то есть сульфид-ион уменьшает содержание наиболее реакционно-способных форм водорода приводя к смещению адсорбционных равновесий на поверхности, при этом не оказывая значительного влияния на структурно-механические свойства катализатора.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР. Тема № FZZW-2020-0010. Теоретическая часть согласована с планом работ Научного совета РАН по физической химии на 2020 (№ 20-03-460-28).

5,15-ДИ-{4'-[4»-(2»'-КАРБОКСИ-2»'-АМИНОЭТИЛ)-ФЕНИЛЕНОКСИ]-ТЕТРАМЕТИЛЕНОКСИФЕНИЛ}-10,20-ДИ-(4'-N-МЕТИЛПИРИДИЛ)-ПОРФИРИН ДИТОЗИЛАТ, НАЦЕЛЕННЫЙ НА СВЯЗЫВАНИЕ СУБЪЕДИНИЦ S-БЕЛКА SARS-COV-2

Сырбу С.А., Киселев А.Н., Юрина Е.С., Губарев Ю.А., Гусейнов С.С.

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, г.Иваново, Россия
e-mail: yurina_elena77@mail.ru

Ежегодно в мире появляются новые вирусные инфекции, обладающие различной вирулицидностью. В 2019 г появился высоко контагиозный вирус SARS – CoV – 2. Он, как и его предшественник коронавирус тяжелого острого респираторного синдрома (SARS – CoV) используют рецептор человека ACE2 для проникновения вируса в клетки хозяина используя при этом шиповидные белковые отростки на поверхности вириона. Этот шиповидный отросток является гомотримером и включают два функциональных элемента: S1-субъединицу, ответственную за связывание с рецептором клетки-хозяина, и S2-субъединицу, отвечающую за слияние клеточных мембран [1]. S1-субъединица содержит RBD сайт, который в S-белке является наиболее вариабельной частью генома коронавируса и отвечает за связывание человеческого рецептора ACE2. Другой важный участок шиповидного отростка – многоосновной сайт расщепления, который расположен на стыке субъединиц S1 и S2, его расщепление необходимо для слияния мембран вириона и клетки хозяина [2]. Поэтому в качестве мишени нами был выбран именно S-белок шиповидного отростка. Ключевая идея заключалась в том, чтобы сконструировать соединение, способное связывать S1 и S2 субъединицы, тем самым препятствуя расщеплению белка и ингибируя слияние мембран т.е. блокируя проникновение вируса в клетку. В результате исследования методами биоинформатики было установлено, что в качестве такого соединения может выступать порфирин – (рис.), способный сшивать две субъединицы белка с энергией 9,1 ккал/моль.

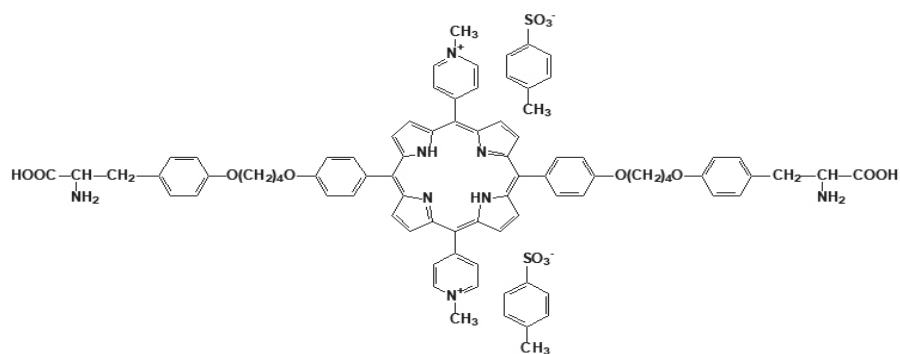


Рис. 5,15-ди-{4'-[4»-(2»'-карбоксии-2»'-аминоэтил)-фениленокси]-тетраметиленоксифенил}-10,20-ди-(4'-п-метилпиридил)-порфирин дитозилат.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №20-04-60067).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Wan Y. et al. Receptor recognition by the novel coronavirus from Wuhan: an analysis based on decade-long structural studies of SARS coronavirus. *Journal of virology*. **2020**, 94(7), 1–9.
- [2] Hoffmann M. et al. SARS-CoV-2 cell entry depends on ACE2 and TMPRSS2 and is blocked by a clinically proven protease inhibitor. *Cell*. **2020**, 18, 271–280.

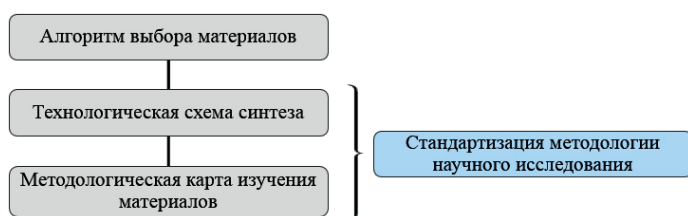
МЕТОДОЛОГИЯ НАУЧНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ФАЗОПЕРЕХОДНЫХ СРЕДНТЕМПЕРАТУРНЫХ ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСОВЕ КРИСТАЛЛОГИДРАТОВ ДЛЯ ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Тестов Д.С.¹, Моржухин А.М.¹, Головкин И.А.¹, Моржухина С.В.¹

¹*Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия
e-mail: dima13-1994@yandex.ru*

На сегодняшний день проблемой внедрения фазопереходных теплоаккумулирующих материалов (ФТАМ) в системы отопления и горячего водоснабжения остается ряд недостатков, таких как переохлаждение, инконгруэнтное плавление, фазовая сегрегация и низкая теплопроводность. При этом имеющиеся недостатки успешно минимизируются в отдельных авторских работах, однако все еще не разработан комплексный методологический подход к исследованию материалов, начиная от алгоритма выбора и заканчивая успешной валидацией разработанной технологии [1], поэтому до сих пор не создано оптимальных ФТАМ для целей отопления [2].

Данная работа посвящена созданию и обоснованию методологии методов и условий исследования. Предлагаемый подход призван стандартизировать методологию научного исследования в данной области и продвинуть перспективы технологии аккумулирования тепла, имеющие большие перспективы [3], за счет комплексного исследования материалов на основе кристаллогидратов, от стадии качественного и количественного определения до сравнительного анализа измеренных или рассчитанных параметров в рамках различных методов исследования.



Благодаря стандартизации методологии научного исследования авторами систематизирована работа по изучению ФТАМ для конкретных прикладных задач. Строгое соблюдение шагов, выделенных в рамках данного подхода, позволит на конечной стадии говорить о достоверности изученных параметров и готовности данной технологии к внедрению.

Описанный подход применен при изучении ФТАМ на основе кристаллогидратов магния, кальция, цинка, а также материалов на их основе и сведены к минимуму вышеописанные недостатки. Это позволяет выйти на конечную стадию исследования материалов в объемах теплового аккумулятора, чтобы оценить работоспособность и эффективность разработанной методологии.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Khan M.M.A., Saidur R., Al-Sulaiman F.A. A review for phase change materials (PCMs) in solar absorption refrigeration systems // *Renewable & Sustainable Energy Reviews*. **2017**. Т. 76. С. 105–137. DOI: 10.1016/j.rser.2017.03.070.
- [2] Nkwetta D.N., Haghghat F. Thermal energy storage with phase change material A state-of-the art review // *Sustainable Cities and Society*. **2014**. Т. 10. С. 87–100. DOI: 10.1016/j.scs.2013.05.007
- [3] Sarbu I., Sebarchievici C. A Comprehensive Review of Thermal Energy Storage // *Sustainability*. **2018**. Т. 10, № 1. С. 32. DOI: 10.3390/su1001019

КОМПЛЕКСЫ ВКЛЮЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПОЛИФЕНОЛОВ С ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ В ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Усачева Т.Р.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: oxt@isuct.ru*

Научный подбор оптимальных условий для солюбилизации фенолов и полифенолов, представляющих интерес для пищевой и фармацевтической индустрии, является актуальной задачей. Растворимость многих лекарственных и биологически активных соединений на основе фенольных кислот и флавоноидов в воде затруднительна, что препятствует их биодоступности и в результате снижает эффективность их применения. В присутствии циклодекстринов растворимость фенольных кислот и флавоноидов, а также их устойчивость к гидролизу, термо- и окислительной деструкции повышается в результате образования комплексов включения типа “хозяин – гость”. Предлагается оптимизировать уникальные свойства циклодекстринов как солюбилизаторов гидрофобных органических молекул за счет целенаправленного использования растворителя и рН при проведении процессов солюбилизации. Замена воды, как традиционной среды для проведения инклюзионного комплексообразования с участием циклодекстринов, на водно-органический растворитель позволит изменить сольватное состояние реагентов и целенаправленно регулировать устойчивость комплексов и энергетику реакций их образования. Этот подход развивает понимание роли растворителя не только как среды, но и как участника химических взаимодействий [1].

В связи с этим в данной работе исследованы взаимодействия бензойной кислоты, модельных полифенолов (кверцетин, куркумин, рутин) с β -циклодекстрином, гидроксипропил- β -циклодекстрином и γ -циклодекстрином в водно-этанольных и водно-диметилсульфоксидных растворителях, получены комплексы включения в кристаллическом состоянии и изучено сольватное состояние и термодинамическое поведение биологически активных молекул и их комплексов включения с циклодекстринами.

Комплекс инструментальных методов (изотермическая калориметрия титрования, дифференциальная сканирующая калориметрия; ИК, УФ, ЯМР спектроскопия; метод межфазного распределения, сканирующая электронная микроскопия) и методов вычислительной химии позволили получить взаимно дополняющие результаты. На их основе могут быть разработаны рекомендации для создания оптимальных условий образования инклюзионных комплексов циклодекстринов с производными фенолов и полифенолов с заданными термодинамическими параметрами.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и ВАНТ (грант №19-53-54004) и в рамках Государственного задания на выполнение НИР (тема №FZZW-2020-0009).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Крестов Г.А., Афанасьев В.Н., Агафонов А.В. и др. Комплексообразование в неводных растворах (Проблемы химии растворов). М.: Наука, 1989. 256 с.

АНАЛИЗ ЭМПИРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛЯРНОСТИ РАСТВОРИТЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХЕМОИНФОРМАЦИОННОГО ПОДХОДА

Фащевский К.А., Телегин Ф.Ю., Марфин Ю.С.

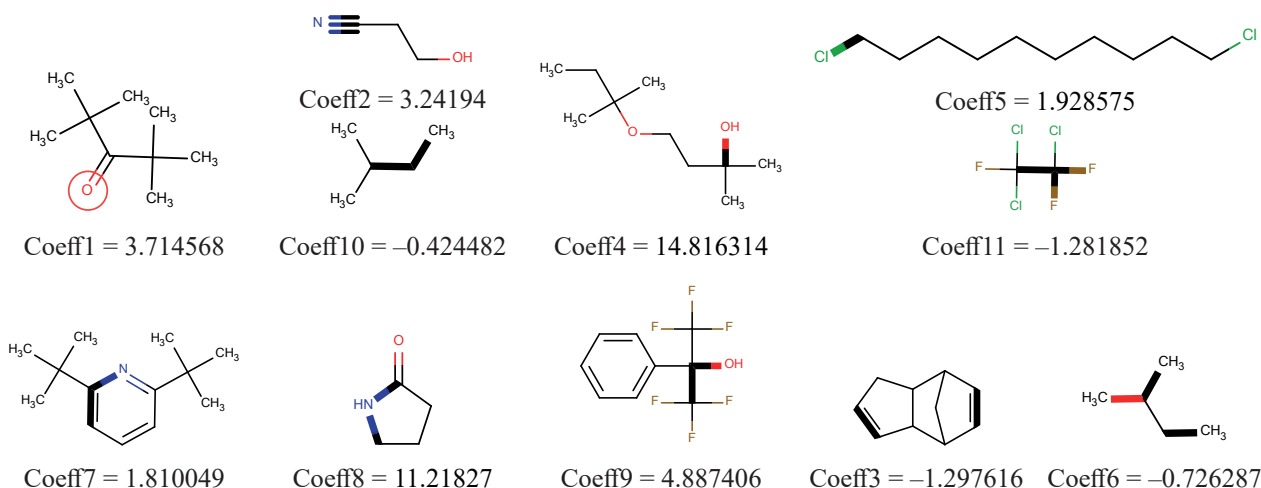
*Ивановский государственный химико-технологический университет, г. Иваново, Россия.
e-mail: felix.telegin@gmail.com*

Сольватохромный эффект используется для изучения фотофизических свойств красителей. Бордипириины (BODIPY), нашедшие широкое практическое применение как прогрессивный класс высокоэффективных флуорофоров, представляют большой интерес для развития теоретических и методологических основ сольватохромии.

Целью настоящей работы является создание хемоинформационных моделей различных шкал полярности растворителей и применение результатов исследования к анализу влияния растворителей на спектральные характеристики поглощения и флуоресценции большого семейства бордипиринов.

В работе использовался метод фрагментов, предложенный в исследованиях И.И. Баскина [1]. В качестве базы данных для анализа различных моделей использовались табулированные физико-химические данные для 270 чистых растворителей [2]. При построении моделей брались в расчет фрагменты, включающие линейные цепочки длиной до 15 атомов, циклы и ветви различной конфигурации.

Сравнительный анализ уравнений Липперта-Матаги, Кавски, Бахшиева, параметра Рейхардта ET(30) и параметров Каталана, представляющих собой теоретические и эмпирические модели сольватохромного эффекта, показал, что параметр ET(30) может быть описан наиболее точно. Коэффициенты регрессии, представленные ниже, указывают на величину положительного и отрицательного вкладов соответствующих фрагментов в величину параметра ET(30). Разработанная модель использовалась при анализе спектрального поведения созданной коллекции BODIPY в широком наборе растворителей.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант No. 2019 RScF-19-73-10107)

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Artemenko N.V., Baskin I.I., Palyulin V.A., Zefirov N.S. *Russian Chemical Bulletin* **2003**, 52, 20–29.
 [2] Cerón-Carrasco J.P., Jacquemin D., Laurence C., Planchat A., Reichardt C., Sraïdi K. *J. Phys. Org. Chem.* **2014**, 27, 512–518.

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ МАГНЕЗИОХРОМИТА

Филатова Н.В., Косенко Н.Ф., Хренов Д.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

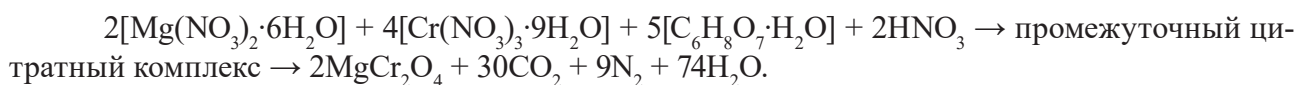
e-mail: zyanata@mail.ru

Магнезиохромит MgCr_2O_4 – единственное соединение в системе $\text{MgO} - \text{Cr}_2\text{O}_3$, привлекающее к себе большое внимание из-за уникальных физико-химических свойств и технологических возможностей. Эта шпинель находит применение в составе огнеупоров, высокотемпературной керамики, полупроводников, магнитных и электрических материалов, датчиков влажности, катализаторов и фотокатализаторов, пигментов и др. В последние годы начались активные разработки по получению нанокерамики и нанокомпозитов с участием MgCr_2O_4 .

Хромит магния синтезируют различными способами: твердофазной реакцией, соосаждением, золь-гель методом, горением, гидротермальным способом, зонной плавкой, разложением карбоксилатных прекурсоров и др.

В данной работе охарактеризована результативность синтеза MgCr_2O_4 одним из методов «мокрой» химии – горением ксерогеля.

Растворы нитратов магния $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и хрома $\text{Cr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ смешивали в молярном соотношении 1:2, которое соответствует составу шпинели. Затем добавляли концентрированный раствор лимонной кислоты $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$, выбранной в качестве восстановителя (топлива) в количестве, соответствующем стехиометрии реакции:



Раствор нагреванием переводили в состояние геля, а затем ксерогеля. Последний поджигали. Наряду с указанными в реакции газообразными веществами (углекислый газ, азот, пары воды), наблюдалось выделение бурых оксидов азота. Оценка температуры горения показала, что ее величина для ксерогеля, содержащего магнезиальный и хромитовый компоненты, заметно ниже, чем для хромита цинка: 370–380 °С вместо 420–430 °С соответственно.

По аналогии с ранее опубликованной работой [1], в которой для синтеза MgCr_2O_4 использовали 1,3-пропандиол, нами также было обнаружено промежуточное соединение хрома (VI). Об этом свидетельствовала полоса поглощения на ИК-спектре $\sim 950 \text{ см}^{-1}$, характерная для колебаний $\text{Cr(VI)} - \text{O}$. После отжига продукта при температурах 500–1000 °С эта полоса исчезала; в области ниже 1000 см^{-1} обнаруживались лишь полосы поглощения $\sim 620 - 640 \text{ см}^{-1}$ и $\sim 495 - 510 \text{ см}^{-1}$, соответствующие колебаниям $\text{Cr(III)} - \text{O}$ и $\text{Mg} - \text{O}$ в тетраэдрической и октаэдрической координации соответственно.

Продукт непосредственно после горения был практически рентгеноаморфным, однако уже при 500 °С проявлялась определенная упорядоченность кристаллической решетки. После отжига при 800–900 °С шпинель представляла собой микродисперсный, хорошо закристаллизованный продукт.

По данным энергодисперсионного анализа состав синтезированного вещества соответствовал магнезиохромиту MgCr_2O_4 .

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Stefanescu M., Barbu M., Vlase T., Barvinschi P., Barbu-Tudoran L., Stoia M. Novel low temperature synthesis method for nanocrystalline zinc and magnesium chromites. *Thermochimica Acta*. **2013**, 526, 130–136.

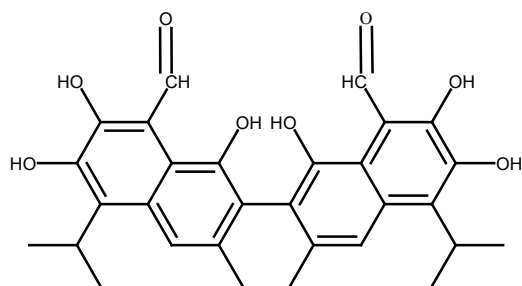
ПОЛУЧЕНИЕ, ХАРАКТЕРИСТИКА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПОДКЛАССА МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ СТРУКТУР В ИЗВЛЕЧЕНИИ ГОССИПОЛА ИЗ ХЛОПКОВОГО МАСЛА

Фуфаева В.А.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: victoriafufaeva@gmail.com

Создание и характеристика функционально универсальных материалов является перспективным направлением, как в фундаментальных, так и прикладных исследованиях. Относительно недавно такой класс соединений был получен и охарактеризован как металл-органические каркасные структуры (MOFs). Подкласс MOF, а именно цеолитоподобные имидазольные каркасы (ZIFs) отличаются высоким объемом пор, удельной поверхностью, что определяет их как эффективные материалы в каталитических и адсорбционных процессах. Примечательно то, что существует возможность получения ZIF структур в мягких условиях [1].

В работе определены характеристики и оптимальные условия получения ZIF-структур из солей переходных металлов ($\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ и $\text{Co}(\text{Cl})_2$) и 4,5-дифенил-1H-имидазола в качестве лиганда. Показано, что добавление NH_4OH способствует получению высокодисперсных порошков, а введение структурирующих агентов в ходе синтеза приводит к агрегации образующихся частиц каркаса и их укрупнению. Также отмечено отсутствие какой-либо зависимости морфологии частиц от молярного соотношения лиганд/металл для данного каркаса. При этом наибольший выход целевого продукта зафиксирован при соотношении лиганд/металл равном 4.



Известно, что пищевое хлопковое масло, получаемое как прессованием, так и экстракцией содержит специфические пигменты группы госсипола, обладающие высокой реакционной способностью и токсичностью, и в связи с этим хлопковое масло подвергают обязательной рафинации [2]. При этом выведение «свободного» нативного госсипола в основном происходит на стадии нейтрализации СЖК масла, за счет чего происходит перерасход щелочи. Образующийся госсиполат натрия, уходит в soapсток, что в ряде случаев нежелательно и недопустимо.

Альдегидные группы госсипола, находящиеся в 8,8'-положении, реагируют с аммиаком и аминокислотами, анилином, аминокислотами. Поэтому в работе проведено извлечение госсипола из хлопкового масла посредством Ni-ZIF порошка, обработанного в 20 %-м растворе карбамида. Извлечение госсипола проводилось до нейтрализации после гидратации масла. Показана эффективность использования обработанного Ni-ZIF порошка уже при концентрации 0,4 %, что много меньше, чем при использовании бентонитовых глин (1–6 %). Приемлемые показатели кислотного числа достигнуты после щелочной рафинации 10 %-м раствором NaOH (концентрация в 3 раза ниже).

ЛИТЕРАТУРА:

- [1] Chen B., Yang Z., Zhu Y., Xia Y. Zeolitic imidazolate framework materials: Recent progress in synthesis and applications, *J. Mater. Chem. A*. **2014**, 2, 16811–16831.
- [2] Маркман А.Л., Ржехин В.П. Госсипол и его производные. М.: Пищевая промышленность. **1965**. 244 с.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИ-2-ГИДРОКСИПРОПИЛАКРИЛАТА В РАСТВОРЕ РЯДА РАСТВОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Харламова П.С., Николаева О.И., Агеева Т.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: olgunja1975@mail.ru*

В настоящее время перспективы использования полимеров в различных отраслях неограниченны. Большое внимание уделяется синтезу разных сополимеров, имеющих в своём составе функциональные группы, доступные для модификации и для дальнейшего взаимодействия с активными группами различных макрогетероциклических соединений, таких как порфирины и их металлокомплексы. Большой интерес представляет поиск новых водорастворимых полимеров-носителей в связи с перспективами их использования в различных областях медицины.

Интересными полимерами являются полимеры производных акриловой и метакриловой кислот или так называемые полиакрилаты, представляющие собой обширный и разнообразный класс полимеризационных полимеров. Полиакрилаты являются физиологически безвредными, обладают хорошей растворимостью, применяются во многих областях химической промышленности. Выделяется по своему строению и свойствам 2-гидроксипропилакрилат (ГПА). Данный полимер в основном получают методами радикальной полимеризации. ГПА имеет две активные группы – двойную связь и гидроксильную группу. Гидроксильная группа не только улучшает растворимость полимера в воде, но и позволяет легко реагировать с амино-, карбокси- и другими функциональными группами иммобилизуемого на полимер макрогетероциклического соединения.

В настоящей работе проводилась полимеризация ГПА в растворе ряда растворителей, таких как тетрагидрофуран, ацетон, диметилформамид, толуол, бутиловый спирт. Изучено влияние типа и концентрации инициатора в реакционной системе, температуры и продолжительности ведения процесса полимеризации на степень конверсии мономера, выход, и на молекулярно-массовые характеристики полимера, растворимость. Идентификацию полученного полигидроксипропилакрилата и исследование его структуры и свойств осуществляли с привлечением данных ИК-спектров соединений, зарегистрированных на приборе ИК-фурье спектрофотометре Avatar 360 FT-IR ESP в области $3500\text{--}400\text{ см}^{-1}$, элементного, химического и вязкозиметрического методов анализа и методом матричной-активированной лазерной десорбции/ионизации (MALDI). Сопоставление полученных данных позволило определить оптимальные условия синтеза ПГПА в мягких условиях. Молекулярная масса полимера лежит в пределах 100 тыс.

Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «ИГХТУ».

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №18-03-00986.

ШПИНЕЛЬОБРАЗУЮЩИЕ СВЯЗКИ

Храмогин В.В., Косенко Н.Ф., Филатова Н.В.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

e-mail: hramogin98@inbox.ru

Большая группа керамических материалов состоит из шпинелей – двойных оксидов состава $M^{II}M^{III}_2O_4$, где M^{II} и M^{III} – катионы двух- и трехвалентных металлов соответственно. Шпинели и шпинелеподобные оксиды давно привлекают пристальное внимание исследователей и практиков благодаря их уникальным физико-химическим свойствам (высокие температуры плавления, химическая стойкость и др.). Данные материалы находят широкое применение как огнеупоры, высокотемпературная керамика, катализаторы и т.п. Однако шпинели интересны не только сами по себе (так называемые «bulk materials»), но и в качестве модифицирующих добавок в составе композиционных материалов. В процессе получения композитов, как правило, используют то или иное связующее вещество, объединяющее частицы (дисперсные, волокнистые и т.п.) в единый прочный монолит. При смешении связки и наполнителя / наполнителя добиваются равномерного распределения всех компонентов по объему.

По аналогии с ранее разработанным [1] муллитобразующим связующим, нами предложены шпинельобразующие связки (ШОС), которые в процессе высокотемпературной обработки формируют фазу шпинели. Рассмотрены два варианта ШОС, в которых шпинели образуются:

- из смешанных фосфатных связок, например магнийалюмофосфатной ($\rightarrow MgAl_2O_4$), цинкалюмофосфатной ($\rightarrow ZnAl_2O_4$) и т.п. [2];
- из смешанных микрогетерогенных гидроксидных суспензий типа $Zn(OH)_2 + Al(OH)_3$ ($\rightarrow ZnAl_2O_4$), $Mg(OH)_2 + Cr(OH)_3$ ($\rightarrow MgCr_2O_4$) и др.

Фосфатные связки могут объединять дисперсную фазу при низких температурах, т.е. до начала спекания, поскольку являются неорганическими клеями [3]. Смешанные связки готовили растворением оксидов / гидроксидов соответствующих металлов в ортофосфорной кислоте при нагревании.

Второй вид связок получали соосаждением гидроксидов из растворов солей металлов (в частности, нитратов). Они в обычных условиях не обладают вяжущими (клеящими) свойствами, поэтому требуют в ходе приготовления композиционного материала дополнительного компонента (лигносульфонатов технических, поливинилового спирта, полиакриловой кислоты), исполняющего роль временной связки. Последняя выгорает при относительно низких температурах (350–600 °С). В дальнейшем (при спекании) эта связка замешается керамической, состоящей из шпинели.

Образование шпинелей при обжиге заготовок композитов надежно установлено рентгенофазным анализом. Следует при этом отметить, что формирование шпинельных фаз в рассмотренных системах происходит с большей скоростью по сравнению с классическим керамическим синтезом и при более низких температурах.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Косенко Н.Ф., Филатова Н.В., Пимков Ю.В. Муллитобразующее связующее и его физико-химический анализ. *Огнеупоры и техническая керамика*. 2015, №11–12, 11–16.
- [2] Kosenko N.F., Filatova N.V., Glazkov M.A. Brucite-based magnesium phosphate bonding agent, its analysis and application for periclase sintering. *Известия вузов. Химия и химическая технология*. 2019, 62, 119–124.
- [3] Сычев М.М. Неорганические клеи. 2 издание, перераб. и доп. Л., Химия, 1986. 152 с.

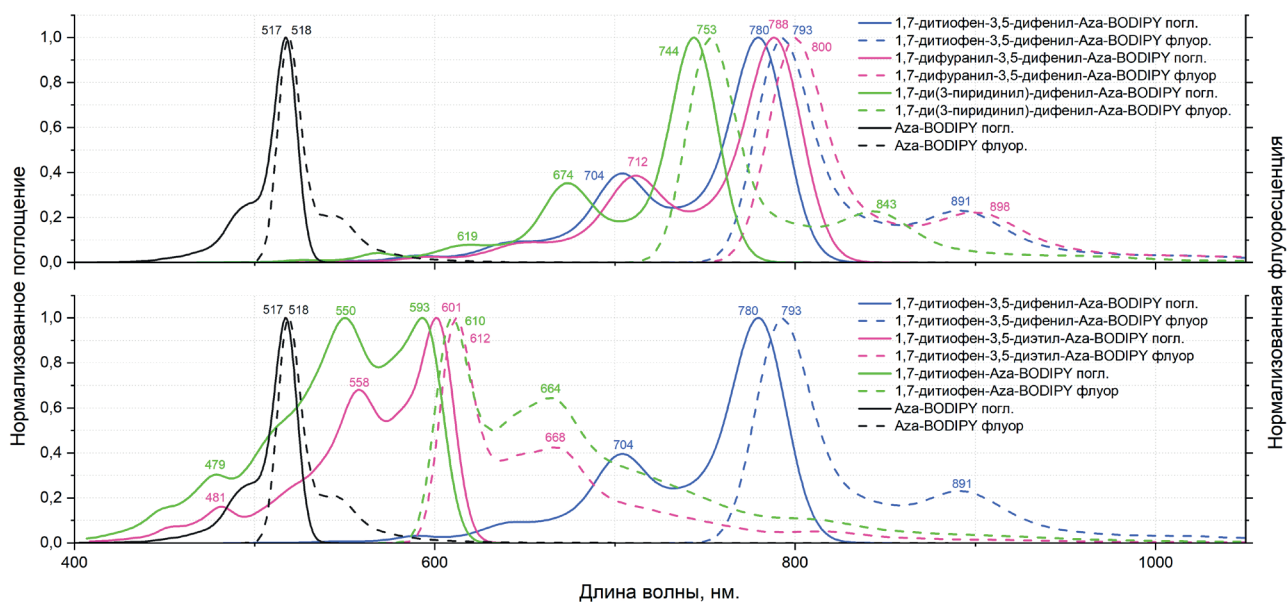
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И ВИБРАЦИОННО-РАЗРЕШЁННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ AZA-BODIPY

Шагурин А.Ю.¹, Погонин А.Е.¹, Марфин Ю.С.¹

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: Shagurin.A.Y@gmail.com

Комплексы аза-дипиррина с бором, также известные как aza-BODIPY, представляют собой стремительно развивающуюся семью флуорофоров. Aza-BODIPY производные имеют узкие полосы поглощения и испускания, высокую хемо- и термостабильность, высокие квантовые выходы флуоресценции. Благодаря обширной π -электронной системе дипиррина, спектральные свойства данных комплексов могут быть эффективно «подстроены» для различных технологических решений. На их основе разрабатываются флуоресцентные биологические маркеры и компоненты солнечных ячеек [1].

Методами квантовой химии и компьютерного моделирования были исследованы спектральные характеристики ряда aza-BODIPY производных с фенильными, гетероциклическими и алифатическими заместителями. Получено теоретическое описание вибрационно-разрешённых спектров данных соединений. Показано, что наличие гетероциклических заместителей в 1,3,5,7-положениях является необходимым фактором для получения соединений, поглощающих/излучающих в ближней ИК-области. Наличие алифатических заместителей уменьшает интенсивность основного пика поглощения, в этой связи фуранильные производные aza-BODIPY являются наиболее подходящими кандидатами, на основе которых можно получать полезные материалы для медицины/фотовольтаики.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант №19-73-10107).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mueller T., Gresser R., Leo K., Riede M. Organic solar cells based on a novel infrared absorbing aza-bodipy dye. Sol.Energy Mater. Sol. Cells. **2012**, 99, 176–181.

СТРОЕНИЕ ПОЛИМЕТАЛЛКРЕМНИЕВЫХ НАНОКОМПЛЕКСОВ И ИХ ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Шапкин Н.П., Хальченко И.Г., Баланов М.И.

*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия
e-mail: npshapkin@gmail.com*

Методом обмена были получены полифенилсилоксаны, содержащие в основной цепи никель, кобальт, цинк, хром, железо и алюминий. Данные рентгенофазового анализа позволили рассчитать размер и объем областей когерентного рассеяния (ОКР), а также сечение полимерных цепей. Данные ЯМР ^{29}Si показали наличие в структуре фрагментов T_2 и T_3 . На основании данных ЯМР ^{27}Al и РЭС показано, что реализуется тетраэдрическое (66 %) и октаэдрическое окружение атома металла в основной цепи. На основании полученных данных была представлена пространственная слоистая структура фенилсилоксанов, содержащих трехвалентные металлы. Электронная микроскопия наноконплексов показала наличие сферических частиц, размер которых изменяется для хрома, железа, алюминия. Используя данные низкотемпературной адсорбции азота, было сделано предположение, что удельная поверхность заполняется слоем плотно упакованных сферических частиц, а толщина такого слоя, в свою очередь, определяется удельным поляризующим потенциалом, который рассчитывается отношением поляризующего потенциала к объему пустот между областями когерентного рассеяния. Аналогичная зависимость наблюдается между толщиной слоя и удельным поляризующим потенциалом, рассчитанным, как отношение поляризующего потенциала к объему «ловушки» позитрония. Показано, что наблюдается прямая зависимость между толщиной слоя сферических частиц и удельным поляризующим потенциалом. Высказано предположение о фрактальной структуре сферических частиц.

Было проведено исследование строения полиметаллофенилсилоксанов, содержащих магний, кобальт, никель, цинк, с помощью методов позитронно-аннигиляционной спектроскопии, РФА, РФЭС. Используя данные РФА, были рассчитаны площади сечения полимерных молекул по методу Миллера-Бойера и объемы когерентного рассеяния. Число элементарных звеньев в объеме ОКР для магния, кобальта и полифенилсилоксана равно десяти, для никеля и цинка – двенадцати, что, по-видимому, связано с более высокой плотностью для никельсилоксана и большим объемом ОКР для цинкисилоксана. Значения T_3 и T_2 в ЯМР ^{29}Si для полифенилсилоксана совпадают с данными для полиникель-, поликобальтфенилсилоксанов и заметно отличаются для полицинкфенилсилоксана. Увеличение количества T_1 - и T_2 -фрагментов для цинка связано с увеличением процента октаэдрических полиэдров этих ионов, а для никеля и кобальта – в большей степени с тетраэдрическим строением данных ионов. Исследование полицинкфенилсилоксана с помощью рентгеноэлектронной спектроскопии показало наличие двух сортов атомов цинка, в которых содержание атомов цинка с $2p^{3/2}$ равно 64.3 %, а с $2p^{3/2}$ – 35.7 %. Это отвечает содержанию тетраэдрического окружения T_1 и T_2 атомов кремния в спектре ЯМР ^{29}Si .

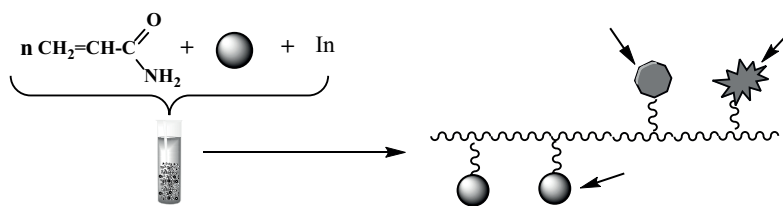
Определены триботехнические свойства тонкопленочных покрытий, полученных в результате трибомодификации стали 40Х металлсилоксанами, а также композитами на основе вермикулита и каолинита плакированными полифенилсилоксаном. Сравнительные триботехнические испытания позволили установить, что металлсилоксаны позволяют получить тонкопленочное покрытие на стали, обеспечивающее высокие триботехнические характеристики сопряжения «вал + покрытие-вкладыш».

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ИНИЦИАТОРОВ В СИНТЕЗЕ ПОРФИРИНПОЛИМЕРОВ В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОГО НАГРЕВА И МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Шилов И.В., Печникова Н.Л., Агеева Т.А.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
e-mail: Schilovivan.2013@yandex.ru*

Использование инициаторов различной природы в реакции радикальной сополимеризации позволяет получать порфиринопolyмеры (ПП), отличающиеся по составу и свойствам. В результате сополимеризации традиционных виниловых мономеров с винилсодержащими порфиринами получают ПП, имеющие в боковой цепи фрагменты тетрапиррольных макрогетероциклических соединений. В зависимости от типа выбранного инициатора реакции радикальной сополимеризации: пероксидов или персульфатов – структура порфиринового мономера может частично изменяться до хлориновой и бактериохлориновой. Поэтому в конечном итоге макромолекула ПП в боковой цепи наряду с порфириновыми фрагментами может содержать измененные фрагменты макрогетероциклов.



На основе акриламида (АА) и порфириновых мономеров, отличающихся количеством активных групп на периферии молекулы, нами были получены различные ПП. Реакцию проводили в инертной среде, используя в качестве растворителя 1,4-диоксан. Синтез проводили в различных условиях нагрева реакционной массы. Использование термического нагрева или микроволнового излучения (МВИ), позволило получить ПП с разным содержанием порфирина в составе сополимера. Установлено, что чем больше порфиринового мономера по отношению к АА при загрузке исходных компонентов, тем выше его содержание в продуктах реакции. Кроме этого, при использовании МВИ образуются ПП с большим содержанием порфирина в составе сополимера, чем в условиях термического нагревания при одинаковых загрузках исходных реагентов. Однако при термических условиях реакции во всех случаях получались ПП с большей молекулярной массой. Применение порфириновых мономеров различной функциональности в синтезе ПП позволило получить линейные и разветвлённые структуры сополимеров. Значительное увеличение количества порфирина в реакционной массе приводило к образованию сшивок в продуктах реакции и уменьшению их растворимости в водных растворах.

Все рассмотренные факторы влияют на процесс синтеза, выход сополимеров, вид и структуру ПП. Таким образом, для получения ПП, обладающих заданными свойствами, необходимо учитывать не только условия протекания реакции радикальной сополимеризации, но и природу выбранных инициаторов, а также функциональность порфириновых мономеров. Благодаря полученным данным была усовершенствована методика синтеза водорастворимых ПП, позволяющая целенаправленно получать порфиринсодержащие сополимеры различного состава.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №18-03-00986).

MOLECULAR DOCKING OF PYRIDOXAL 5'-PHOSPHATE ISONIAZID HYDRAZONE WITH DNA AND PROTEINS

Abyar F.¹, Zare R.², Gamov G.³

¹*Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Ardakan University,
P.O. Box 184, Ardakan, Iran.*

²*Sarir Chemical industrial company, Yazd, Iran*

³*Ivanovo State University of Chemistry and Technology
e-mail: f.abayar@ardakan.ac.ir*

Thioredoxin reductase is the only enzyme known to catalyze the reduction of thioredoxin, a class of small redox proteins contributing to many important biological processes, including redox signaling. Since the activity of this enzyme is essential for cell growth and survival, and this enzyme is upregulated in several types of cancer, including malignant mesothelioma, it is a good target for anti-tumor therapy.

In this work, the molecular docking calculations were carried out to find the appropriate site for the interaction of pyridoxal 5'-phosphate isoniazid hydrazone with targets taken from protein data bank (PDB, RCSB website). For instance, Ganguly et al have been newly reported a crystal structure of human DNA (PDB ID: 5zld) with sequenced ((5'-D(*CP*GP*CP*GP*AP*AP*AP*T-P*TP*TP*CP*GP*CP*G)-3'))₂ [1]. Crystal structure of the human thioredoxin reductase-thioredoxin (TrxR1) [2] with PDB entry of 3QFA, and thioredoxin-2 enzyme (TrxR2) with PDB ID 4O32 [3] were taken with the resolution of 2.2 and 2.19 Å, respectively. TrxR is a homodimeric flavoprotein crucially involved in the regulation of cellular redox homeostasis, growth, and differentiation. Its importance in various diseases makes TrxR a highly interesting drug target. Therefore, investigations on their active sites play an important role in drug designing and TrxR activity inhibition.

Auto Dock Vina (version 1.1.2) was used to dock the ligand against DNA and HSA protein [4]. To find the appropriate binding site for the interaction of the ligand with DNA and BSA, the blind docking (BD) process was used [4]. The BD is used for the detection of the possible binding sites by scanning the entire surface of the target (DNA and HSA) and finding a location with the highest binding affinity. Grid box was set 104*90*72 Å³ along the x, y, and z axes with 0.375 Å grid spacing, and exhaustiveness of 8 and a maximum number of binding modes of 9 were defined for the program. Finally, a binding site with the lowest free binding energy (ΔG_b), -8.3 kcal/mol, was found for the interaction of the ligand with DNA. Moreover, the bases of DNA having the dominant interactions with the ligand in the interaction region were determined. The dominant interactions between the ligand and residues in the active site are hydrophobic. For the docking study of HSA with the Ligand, a larger grid box was set to 126*126*126 Å of 0.375 Å³ the x, y, and z directions, respectively. The best value of ΔG_b of the ligand to the HSA was found to be -8.1 kcal/mol.

The study was carried out with the financial support of RFBR (project 19-33-90160).

LITERATURE

- [1] <http://www.rcsb.org/structure/5ZLD>
- [2] Fritz-Wolf K., Kehr S., Stumpf M. et al. Crystal structure of the human thioredoxin reductase-thioredoxin complex. *Nat. Commun.* **2011**, 2, 383.
- [3] Peng M., Cascio D., Egea P.F. Crystal structure and solution characterization of the thioredoxin-2 from Plasmodium falciparum, a constituent of an essential parasitic protein export complex. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **2015**, 456, 403–409.
- [4] Trott O., Olson A.J. *J. Comput. Chem.*, **2010**, 31, 455–461.

A THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (DDT, 666) ON GRAPHITIC CARBON NITRIDE (G-C₃N₄) BY MEANS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH

Be P.T.^{1,2}, Ha N.T.T.¹, Ha N.N.¹

¹Hanoi National University of Education, Hanoi, Vietnam

²Tay Nguyen University, Daklak, Vietnam

e-mail: hann@hnue.edu.vn

Adsorption of dichlorodiphenyltrichloroethane (DDT) and 1,2,3,4,5,6-hexachloro cyclohexane (666) on graphitic carbon nitride (g-C₃N₄) was investigated by using GFN-xTB (Geometry, Frequency, Noncovalent, eXtended Tight Binding) method. GFN-xTB belongs to the density functional tight-binding method, but its extremely high accuracy is proven for various systems [1,2]. The generalized born model augmented with the hydrophobic solvent accessible surface area was performed to study the effect of solvents (water, benzene) on the adsorption process. The adsorption energy was calculated. The significant changes in geometrical parameters and atomic partial charges on atoms were calculated and analyzed. The bond orders were estimated via Mayer method.

The most favorable adsorption configurations of DDT and 666 on g-C₃N₄ were determined. The adsorption energies were calculated to be -244.1 and -223.1 kJ mol⁻¹ for DDT and 666, respectively. The obtained results have been showed that there has been no significant charge transfer from g-C₃N₄ to the substrate. The minimal distance from the substrates to the g-C₃N₄ surface is larger than the sum of the atomic radius. The bond order between the atoms of DDT and 666 with the atoms of g-C₃N₄ is small. Therefore, the adsorption process of DDT and 666 on g-C₃N₄ is considered as physisorption which is mainly governed by van de Waals interactions.

In the presence of solvents, the adsorption energy was found to be increased. In addition, it has been showed that in aqueous solutions, the adsorption ability g-C₃N₄ for DDT and 666 is better than in benzene.

LITERATURE

- [1] Grimme S., Bannwarth C., Shushkov P. A Robust and Accurate Tight-Binding Quantum Chemical Method for Structures, Vibrational Frequencies, and Noncovalent Interactions of Large Molecular Systems Parametrized for All spd-Block Elements (Z = 1–86). *J. Chem. Theory Comput.*, **2017**, *13*, 1989–2009.
- [2] Bannwarth C., Ehlert S. and Grimme S. GFN2-xTB-An Accurate and Broadly Parametrized Self-Consistent Tight-Binding Quantum Chemical Method With Multipole Electrostatics and Density-Dependent Dispersion Contributions. *J. Chem. Theory Comput.*, **2019**, *15*, 1652–1671.

PHASE SOLUBILITY AND THERMOANALYTICAL STUDIES OF THE INCLUSION COMPLEX FORMATION BETWEEN CURCUMIN AND HYDROXYPROPYL- β -CYCLODEXTRIN IN HYDROALCOHOLIC SOLUTIONS

Kabirov D.N.¹, Usacheva T.R.¹, Silvestri T.², Niccoli M.², Mayol L.², Biondi M.², Giancola C.²

¹*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russian Federation
e-mail: oxt@isuct.ru*

²*University of Naples Federico II, Naples, Italy
e-mail: mabiondi@unina.it*

Many recent reports on curcumin, a polyphenol from *Curcuma longa* Linn, provide mounting evidence on the pharmacological activity of this natural product. Curcumin (CURC) is endowed with numerous pharmacological activities, including antiinflammatory, neuro-/cardioprotective, antioxidant, antimicrobial and anticancer. However, the pharmaceutical use of this molecule is hampered due to its poor solubility in the aqueous media and stability in vivo.

Solubility and stability of CURC can be improved by the complexation with cyclodextrins (CDs), which are cyclic oligosaccharides with a hydrophilic outer surface and a lipophilic cavity [1].

Thus, in this work the formation of the inclusion complex of CURC with hydroxypropyl- β -cyclodextrin (HP β CD) at pH=5.0 and pH=7.4 in hydroalcoholic solution with 20 % v/v EtOH at physiological and acidic pH was investigated. Instrumental research methods such as isothermal titration calorimetry, differential scanning calorimetry and phase solubility were used. The stability constant of the inclusion complex formation CURC-HP β CD was obtained by the method of phase solubility ($\log K_c = 3.23$ at pH=7.4 and $\log K_c = 3.36$ at pH=5.0). DSC measurements were performed on the recovered precipitate from phase solubility experiments to verify the formation of the inclusion complex. Solutions have been lyophilized and the resulting solid mass scanned from 20 to 220 °C at 10 °C/min. Results of the thermal analyses of CURC, HP β CD, and CURC-HP β CD showed that the peak associated to CURC melting at 183 °C was not evidenced, therefore confirming the formation of the inclusion complex.

Thermodynamic parameters ($\Delta_r H$, $\Delta_r G$, $T\Delta_r S$) of the inclusion complex formation CURC-HP β CD in 20 % v/v EtOH were calculated using the stability constant obtained by phase solubility method. The enthalpy of the formation reaction of the inclusion complex CURC-HP β CD was -4.67 kJ mol⁻¹ and -8.11 kJ mol⁻¹ respectively.

Taken all together, results clearly indicate that the formation of the CURC-HP β CD inclusion complex is strongly promoted at pH < pK_a and with prolonged stirring times (24 h). These results highlight the importance of the choice of the appropriate pH and mixing time on the formation of host-guest inclusion complex with CURC and HP β CD.

The study was carried out as a part of a State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education and the Russian Federation (project FZZW-2020-0009) and was funded by Ministry of Foreign Affairs and International Cooperation of Italy [grants in favor of foreign citizens not residing in Italy and Italian citizens living abroad, №946–22/10/2018]

LITERATURE

- [1] Yadav V.R. Sarasija Suresh, Kshama Devi, Seema Yadav. Effect of Cyclodextrin Complexation of Curcumin on its Solubility and Antiangiogenic and Anti-inflammatory Activity in Rat Colitis Model. *AAPS PharmSciTech.* **2009**, *10*, 752–762.

THERMOCHEMICAL ANALYSIS OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS OF L-CARNOSINE WITH ISONICOTINIC ACID IN AQUEOUS SOLUTIONS

Krutova O.N.¹, Usacheva T.R.¹, Niccoli M.², Giancola C.²

¹*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russia*
e-mail: oxt@isuct.ru

²*University of Naples Federico II, Naples, Italy*

In recent years, researchers' attention has been attracted by the interactions between proteins and pharmacologically active substances, which underlie the processes of their transfer in the human body, and are also important in the development of new biotechnologies for the production of innovative dosage forms. In our work, L-carnosine and isonicotinic acid were chosen as objects of study. A positive effect of carnosine and nicotinic acid, exhibiting antioxidant activity, was observed in the treatment of severe eye cataracts [1].

The heats of mixing aqueous solutions of L-carnosine with aqueous solutions of isonicotinic acid were determined on a TAM III microcalorimetric titration system equipped with a 20 ml titration cell. Experimentally was obtained for the heat of mixing of aqueous solution of L-carnosine (initial concentration of a solution of 0.09215 mol/kg) in an aqueous solution of isonicotinic acid (initial concentration of a solution of 0.002672 mol/kg). During the experiment, 15–20 titrant injections were carried out in a calorimetric cell containing a solution of isonicotinic acid. The thermal effect of dilution of L-carnosine in water was taken into account by an additional blank experiment.

The results of thermodynamic studies of liquid-phase systems containing amino acids and peptides make it possible to determine the nature and driving forces of the interaction between them. The experimental trend of the data does not reflect the functional form that characterizes the formation of a complex. The curve diverges and it is not possible to determine the values of the standard enthalpy and constant of binding. For this reason, we processed the data in order to derive the enthalpy coefficient of cross pair interaction, h_{xy} . The enthalpy change that occurs upon the dilution of a solution containing n solutes is related to the corresponding excess enthalpy and to the pairwise and higher-order coefficients as follows:

$$\Delta H_{dil}(\overline{m}^i \rightarrow \overline{m}^f) = H^E(\overline{m}^f) - \left(\frac{m_x^f}{m_x^i}\right) H^E(\overline{m}^i) = \sum_x \sum_y h_{xy} m_x^f m_y^f - \left(\frac{m_x^f}{m_x^i}\right) \sum_x \sum_y h_{xy} m_x^i m_y^i + \text{high terms}$$

By processing the data we found the value of the $h_{xy} = (-2,0 \pm 0.1) \cdot 10^6 \text{ J kg mol}^{-2}$. This value is very large and this suggests that the interaction is in the limit between non-specific interaction and binding.

The ITC measurements was carried out at the Institute of Thermodynamics and Kinetics of Chemical Processes of the ISUCT using the equipment of the Centre for Collective Use of ISUCT. The study was carried out as a part of a State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education and the Russian Federation (project FZZW-2020-0009), with financial support from the Russian Federal Property Fund and the Government of the Ivanovo Region (project № 18-43-370018)

LITERATURE

- [1] Abdelkadera H., Swinden J., Pierscionek B.K., Alany R.G. Analytical and physicochemical characterisation of the senile cataract drug dipeptide β -alanyl-L-histidine (carnosine) // *J. Pharm. Biomed. Analysis*. **2015**, 114, 241–246.

ELUCIDATING THE EFFECT OF METAL SUBSTITUTION IN RUTHENIUM PYROCHLORES ON THE LATTICE OXYGEN BINDING AND WATER OXIDATION ACTIVITY

Kuznetsov D.A.,¹ Naeem M.A.,¹ Kumar P.V.,² Abdala P.M.,¹ Fedorov A.,¹ Müller C.R.¹

¹ETH Zürich, Zürich, Switzerland

² University of New South Wales, Sydney, Australia
e-mail: denisk@ethz.ch

Ruthenium pyrochlore family, i.e. oxides of composition $A_2Ru_2O_{7-\delta}$, are known as high performing catalysts for the oxygen evolution reaction (OER) in acidic environment.¹ In this work, we established a direct correlation between the OER activity of $Y_{1.8}M_{0.2}Ru_2O_{7-\delta}$ pyrochlores (M = Y, Fe, Co, Ni, Cu), the oxygen lability in the lattice and the formation enthalpy of the binary MO_x oxide, i.e. metals M forming less exothermic oxides feature weaker M–O bonds that correlates with a reduced surface oxygen binding in $Y_{1.8}M_{0.2}Ru_2O_{7-\delta}$ pyrochlores and enhanced OER activity. DFT studies captured changes in the electronic structure of the $Y_{1.8}M_{0.2}Ru_2O_{7-\delta}$ oxides triggered by M substitution and revealed the trends in the electronic band structure governing the OER performance of the $Y_{1.8}M_{0.2}Ru_2O_{7-\delta}$ catalysts. Specifically, an increase in the density of oxygen vacancy sites and the OER activity is attributed to the shift of the O $2p$ band center closer to the Fermi level. Our work introduces $Y_{1.8}Cu_{0.2}Ru_2O_{7-\delta}$ as a novel OER catalyst with enhanced OER activity and, more fundamentally, emphasizes the underexplored role that substituents can play in regulating the OER activity of complex oxides, i.e. by influencing the surface oxygen binding strength. Our results can serve as guidelines for the development of efficient OER catalysts as well as other applications that involve lattice oxygen sites.

LITERATURE

- [1] Kim J., Shih P.-C., Tsao K.-C., Pan Y.-T., Yin X., Sun C.J., Yang H. High-Performance Pyrochlore-Type Yttrium Ruthenate Electrocatalyst for Oxygen Evolution Reaction in Acidic Media. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 12076–12083.

IMPROVING THE QUALITY AND REPRODUCIBILITY OF DATA IN DRUG DISCOVERY

Markova N.V.

*Malvern Panalytical, Grovewood Rd, Malvern WR141XZ, UK
e-mail: natalia.markova@malvern.com*

Dynamic interactions involving biomolecules drive and regulate all biological processes, making interaction analysis a key area of academic and industrial research and development. A variety of biophysical techniques are used in this field, including Nuclear Magnetic Resonance (NMR), Isothermal Titration Calorimetry (ITC), biosensors (such as SPR and BLI) and fluorescence-based assays.

Over the years, clear trends in interaction and structural analyses have driven towards increased ease-of-use of advanced techniques, despite the increasing complexity of biomolecules and binding modes being studied.

While methodologies and technologies in interaction analysis continue to evolve, one fundamental prerequisite to the success remains constant: good control over the quality of samples and experimental conditions. Overlooking these requirements could result in poor performance of a biophysical technique, misleading and irreproducible results (such as poor Structure Activity Relationship), and lack of convergence with orthogonal and complementary data generated during a project.

Case study examples will be given to illustrate how early profiling of the stability and homogeneity of samples, along with data-driven optimization of assay conditions impact on the quality of interaction analysis and progress of drug discovery projects.

GENERATION OF ELECTRIC CHARGES DURING THE FORMATION OF NANOCRYSTALLINE COMPLEX OXIDES IN COMBUSTION REACTIONS: FUNDAMENTAL AND PRACTICAL ASPECTS

Ostroushko A.A.¹, Russkikh O.V.¹, Gagarin I.D.¹, Filonova E.A.¹, Vylkov A.I.^{1,2}, Belousov E.M.^{1,2}, Maksimchuk T.Yu.¹, Permiakova A.E.¹

¹*Ural Federal University, Ekaterinburg, Russia*

²*The Institute of High Temperature Electrochemistry of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russia*

e-mail: alexander.ostroushko@urfu.ru

The effect of thermochemical high-density charges generation was found when polymer-salt compositions containing transition metal ions that can change their oxidation degree were heated. The presence of charges accompanies the synthesis process of simple and complex oxides (*CO*) in the combustion reactions of the above-mentioned organo-inorganic compositions, as well as precursors containing metal nitrates and low-molecular organic components [1] such as glycine, glycerine, etc.

Earlier researches have shown that the main mechanism of charge formation in precursors is the occurrence and transport of charged gaseous particles into the environment, including ionized water(-), nitrogen oxides(+), and etc. A systematic study of the combustion processes of precursors for the synthesis of *CO* on the basis of lanthanum manganites with the perovskite type ABO_3 structure, including the substituted in sublattices A and B by Sr, Ag, alkali metals and nickel (as well as more complex compositions) was carried out. The combustion temperature, the composition of the gases formed during synthesis, the potential difference between the earth and the precursor, determined by the charge density were measured. Organic components were polymers (PVA, PVP, PAA, cellulose, PEG) as well as low-molecular compounds (glycine, glycerine, citric acid). Established regularities indicated that the intensity of charge generation is not directly related to the combustion temperature, but correlates with the peaks of gaseous substances release, and is usually maximal for undoped lanthanum manganite. The maximum temperature achieved during synthesis was typical for compositions with PEG, the minimum release of nitrogen oxides and the maximum charges were typical for PVA containing ones. An important applied aspect: at close sizes of *CO* nanoparticles, the sintering temperature of materials obtained under conditions of intensive charge generation was reduced by 250–300 °C due to the mutual repulsion of these particles, reducing the contact between them in powders, which leads to a significant increase in the achieved shrinkage of compacted samples, – it is possible to regulate of the key properties during the production of ceramic *CO*-compositions.

Varying composition of precursors fundamentally changed the picture. The synthesis of *CO* based on cerium dioxide CeO_2 , accompanied by generation of negative charges as opposed to positive charges typical for perovskite *CO* formation. It was supposed that the charge sign is determined by the tendency of the transition metal in *CO* structure to partially increase or decrease the base degree of oxidation: $Mn^{3+} \rightarrow Mn^{4+}$ or $Ce^{4+} \rightarrow Ce^{3+}$.

The research was supported by the RFBR grant 19-03-00230.

REFERENCES

1. Ostroushko A.A., Russkikh O.V., Gagarin I.D., Filonova E.A. Study of the charge generation in the synthesis of nanosized complex oxides in the combustion reactions of organo-inorganic precursors. *Phys. Chem. Aspects Study Clusters, Nanostruct., Nanomater.*, **2019**, 11, 215–222.

INCLUSION COMPLEX FORMATION OF B-CYCLODEXTRIN WITH SOME OF PHENOLIC COMPOUNDS

Pham T.L.¹, Usacheva T.R.²

¹*Institute for Tropical Technology, VAST, Vietnam*

²*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Russian Federation, Ivanovo*
e-mail: ptilan@itt.vast.vn, oxt@isuct.ru

Antioxidant activity, anti-inflammatory, preventive and therapeutic effects of cancer and cardiovascular protection are best known properties of phenolic compounds [1, 2]. The solubility of phenolic compounds in water is poor, which significantly decreases its bioavailability. The formation of inclusion complexes between insoluble drug and solubility enhancers such as β -cyclodextrin (β CD) is a one of way to increase the solubility of the bioactive molecules.

In this study, the complexes of β CD with BA as small hydrophobic guest and RU as larger molecule were obtained in the water-ethanol solvents, and structural and thermodynamic properties of complexation were determined by the combined methods. A solid-state inclusion complexes between phenolic compounds (BA or RU, guest) and β CD were prepared in 1:1 molar ratio under stirring and thermostatting. Fourier transform IR spectra were recorded on a Nicolet iS10 (Thermo Scientific-USA) spectrophotometer. The binding stability constant (K_s) of the complexes was calculated from the phase-solubility diagrams which were obtained according to the Higuchi and Connors method. Drugs, β CD and inclusion complexes were studied by a differential scanning calorimeter (DSC; DSC204F1 (NETZSCH-Germany)).

Differential scanning calorimetry studies revealed that the inclusion complexes were obtained with 1:1 stoichiometric ratio for both BA- β CD and RU- β CD complexes. In the case of β CD, DSC curve showed the endothermic peak with the onset temperature of 84 °C was revealed. At this temperature endothermic effect belongs to the release of water molecules from the inner cavity of β CD. A wide temperature range (109–187 °C) corresponding to dehydration of RU with a melting point of 174.8 °C is observed on the thermogram of RU. The melting point of β CD in complex with RU is shifted compared to free β CD (111 °C), but the peak intensity is significantly decreased. The melting temperature of the RU in the complex is changed to the region of lower temperature and corresponds to 139 °C, its intensity also decreases significantly. BA sample presents onset temperatures for melting and boiling of 118 °C and 242 °C, respectively. The endothermic peak in DSC trace of complex BA- β CD ($T_{onset} = 45$ °C) related to the water loss and more important, therefore indicating the presence of a fraction of β CD which does not interact with the guest molecule. The complete disappearance of the BA endothermic peak was observed for complex instead. This phenomenon can be assumed as proof of interactions between the components of the respective binary systems. These data can be considered as indicative of “guest”-molecules amorphization and inclusion complex formation.

The solubilities of BA and RU in the presence of β CD were linearly increased in the solution of increasing amount of the macrocycle. The obtained yields of both complexes were improved using mixtures of water and ethanol. Its maximum values are observed during the first addition of ethanol to water in the range 0.05–0.10 mol.fr. The stability constants of the (BA- β CD) and (RU- β CD) complexes in water were found to be $\lg K = 1.99$ and 2.75 , respectively.

Acknowledgements. *This work was funded by Vietnam National Foundation for Science and Technology Development (NAFOSTED) under the grant number 104.06-2017.329, by RFBR and VAST according to the research project №19-53-54004. The study was carried out as a part of a State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education and the Russian Federation (project FZZW-2020-0009)*

REFERENCES

- [1] Ohnishi E., Bannai H. *Antiviral Res.*, 1993, 22, 327.
- [2] Guardia T. et al. *Farmaco.* 2001, 59, 683.

BACTERICIDAL ACTIVITY OF CHITOSAN / SILVER BASED COMPOSITES SYNTHESIED BY PLASMA-SOLUTION METHOD

Titov V.A.¹, Naumova I.K.², Nikitin D.³, Losev N.V.¹, Košterin D.Yu.², Lipatova I.M.¹,
Khlyustova A.V.¹, Sirotkin N.A.¹, Choukourov A.³

¹G.A. Kreštov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia

²Ivanovo State Agricultural Academy, Ivanovo, Russia

³Charles University, Prague, Czech Republic

e-mail: daniilnikitin92@gmail.com

Chitosan is a linear polysaccharide, product of deacetylation of chitin, which is manufactured from the exoskeletons of the crustaceans. Due to its non-toxicity, biocompatibility and biodegradability chitosan was found to be useful for several applications including cosmetology, agriculture and biomedicine. In particular, low molecular weight modification of chitosan shows the bacteriostatic effect against *Escherichia coli* [1]. Bactericidal efficiency of chitosan can be extended by the addition of antibacterial agent. Silver NPs (Ag NPs) are well-known by their strong antibacterial action against a variety of dangerous pathogens. The antibacterial effect of Ag NPs is typically related to the mechanisms of Ag⁺ ion release and reactive oxygen species formation in biological media. Nevertheless, the usage of free NPs is limited due to their possible uncontrolled release and interaction with the human organism. Therefore, they should be incorporated into the biocompatible matrix, such as chitosan.

Plasma-solution process is a green single-stage technique to produce the chitosan/Ag composites. An atmospheric pressure glow discharge was ignited between the graphite electrode and the surface of 1 % (w/v) chitosan solution with the addition of AgNO₃. The solution was utilized either as a cathode or an anode. The kinetic of Ag NPs formation was studied by means of UV-Vis spectroscopy. The NPs were of spherical shape and mean diameter around 20 nm that was determined by TEM. The composite foils were obtained by the casting of plasma treated solution on the glass substrates and subsequent drying. Distribution of NPs in the composite was detected by SEM equipped with EDX analysis. XPS and FTIR spectroscopies were utilized to characterize the chemical composition of chitosan/Ag composites. XRD analysis was applied to determine that the NPs contain in the composites both in metallic and oxide chemical states. The antibacterial efficiency of the composites was demonstrated against 3 pathogens: gram-negative *Escherichia coli*, gram-positive *Staphylococcus aureus* and gram-positive *Bacillus subtilis*.

Acknowledgments: The reported study was funded by RFBR, project number 20-02-00501 A.

LITERATURE

- [1] Zheng L.Y., Zhu J.F. Study on antimicrobial activity of chitosan with different molecular weights. *Carbohydrate Polymers*. **2003**, 54, 527–530.

MODELING THE BEHAVIOR OF A NANOCLUSTER $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$ IN THE BLOOD AND ITS INTERACTION WITH THE DOXORUBICIN

Tonkushina M.O., Gagarin I.D., Belozerova K.A., Ostroushko A.A.

*Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin, Ekaterinburg, Russia
e-mail: alexander.ostroushko@urfu.ru*

The spherical nanocluster polyoxometalate $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$ with Keplerate structure is promising for creating targeted drug delivery system [1] due to a number of properties [2]. The delayed destruction of the nanocluster in the blood will provide the time needed for the nanoparticle to reach the target and allow for the gradual release of the drug. Any nanoparticle entering the blood interacts with proteins, overgrowing a protein crown, which in turn affects its properties. Serum albumin is the main protein of human blood plasma. This transport protein has a great impact on the transport and pharmacokinetics of drugs. Studying the interaction with albumin in solution will help to understand the behavior of the nanocluster in the blood. Creating a nanoparticle based on the complex of the nanocluster with albumin will increase its biocompatibility.

We have previously shown that the nanocluster $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}$ forms a complex with ovalbumin, which increases its stability. A pH 7.4 phosphate buffer and bovine blood serum were selected as the medium for modeling the process of nanocluster destruction in blood. The serum was diluted with distilled water 16 times to provide the optical density measured on a spectrophotometer. The process of a pure nanocluster and its complex destruction in the selected media was described by the equation for the first-order reaction. The obtained rate constants of the nanocluster decomposition process are shown in the table:

Solution	Rate constants, hour ⁻¹
$\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ in buffer	$K_1=7,8$ $K_2=0,17$
$\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ -albumin in buffer	$K=0,16$
$\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ in bovine blood serum	$K_1=0,27$ $K_2=0,09$
$\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}$ -albumin bovine blood serum	$K=0,07$

Doxorubicin is one of the anthracycline antibiotics, a cytostatic drug used in the treatment of cancer. UV-Vis spectroscopy study of the complexation of a nanocluster with doxorubicin and albumin showed the ratio of components in the complex: doxorubicin/ $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}=12.5$; albumin/ $\{\text{Mo}_{72}\text{Fe}_{30}\}=0.6$. The investigation of solutions by fluorescence spectroscopy confirmed the obtained data.

Analysis of the fluorescence and UV-vis spectra suggests that the complexation of the nanocluster with doxorubicin occurs similarly to the complexation of doxorubicin with hydrated Fe^{3+} ions or iron-organic framework structures (MOF). Doxorubicin coordinate one or two metal ions at C(6)-O⁻ and C(11)-O⁻ replacing water molecules.

This work was performed in frames of State Task by the RF Ministry of Education and Science (project no. FEUZ-2020-0052)

ЛИТЕРАТУРА

- Ostroushko A.A., Gagarin I.D., Danilova I.G. The use of nanocluster polyoxometalates in the bioactive substance delivery systems Gette. *Nanosyst.: Phys., Chem., Mathem.* **2019**, 10(3), 318–349.
- Ostroushko A.A., Gagarin I.D., Grzhegorzhevskii K.V. et al. The physicochemical properties and influence on living organisms of nanocluster polyoxomolybdates as prospective bioinspired substances (based on materials from the plenary lecture) *J. Mol. Liq.* **2020**, 301, 110910.

IMPROVING PHOSPHATE ADSORPTION CAPACITY OF RED MUD BY ACID-THERMAL TREATMENT

Vu M.X.¹, Pham L.T.¹, Le M.H.T.², Nguyen D.T.¹

¹*Institute for Tropical Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam*

²*Institute for Technology of Radioactive and Rare Elements, Hanoi, Vietnam*

e-mail: vxminh@itt.vast.vn

Phosphate is an important component in the growth of algae and some other organisms in water, when phosphate concentrations exceed the permissible threshold causing eutrophication to increase the amount of biomass in the water, resulting in the disruption of the entire ecosystem. Therefore, phosphate content in domestic and industrial wastewater must be strictly controlled. Adsorption is considered one of the effective treatments for phosphate-contaminated water. Red mud has been interested in many scientists as a phosphate adsorbent [1–7]. To further improve the phosphate adsorption capacity of the red mud, heat treatment [2–4] and acid treatment [4–7] were often used. In this study, the red mud was treated in combination with an acid treatment and heat treatment to take advantage of the good properties of acid treatment and the heat treatment process for phosphate adsorption. Red mud was treated by acid 2M H₂SO₄ in the ratio of liquid/solid:2/1, then calcined at 700 °C. Phosphate adsorption results have shown markedly increased efficiencies. The adsorption capacity of the red mud combined treatment reached 27.8 mgP/g much higher than that of individual treatment (acid treatment of 15.4 mgP/g and heat treatment of 19.2 mgP/g).

LITERATURE

- [1] Ying Wang, Yange Yu, Haiyan Li, Chanchan Shen. Comparison study of phosphorus adsorption on different waste solids: Fly ash, red mud and ferric–alum water treatment residues. *Journal of Environmental Sciences*, **2016**, 50, 79 – 86.
- [2] Huang W., Wang S., Zhu Z., Li L., Yao X., Rudolph V., Haghseresht F. Phosphate removal from wastewater using red mud. *Journal of Hazardous Materials*. **2008**, 158 (1), 35–42.
- [3] Jui-Yen Lin, Minsoo Kim, Dan Li, Hyunook Kim, Chin-pao Huang. The removal of phosphate by thermally treated red mud from water: The effect of surface chemistry on phosphate immobilization. *Chemosphere*, **2020**, 247, 125867.
- [4] Shivkumar S. Prajapati, P. A. Mohamed Najar, and Vijay M. Tangde. Removal of Phosphate Using Red Mud: An Environmentally Hazardous Waste By-Product of Alumina Industry. *Advances in Physical Chemistry*, **2016**, 9ps.
- [5] Jie Ye, Xiangna Cong, Panyue Zhang, Erhard Hoffmann, Guangming Zeng, Yang Liu, Wei Fang, Yan Wu, Haibo Zhang. Interaction between phosphate and acid-activated neutralized red mud during adsorption process. *Applied Surface Science*, **2015**, 356, 128–134.
- [6] Andong Hu, Guoping Ren, Jiangang Che, Yulin Guo, Jie Ye*, Shungui Zhou. Phosphate recovery with granular acid-activated neutralized red mud: Fixed-bed column performance and breakthrough curve modeling. *Journal of environmental sciences*. **2020**, 90, 78–86.
- [7] Jie Ye, Xiangna Cong, Panyue Zhang, Erhard Hoffmann, Guangming Zeng, Yan Wu, Haibo Zhang, Wei Fan. Phosphate Adsorption onto Granular-Acid-Activated-Neutralized Red Mud: Parameter Optimization, Kinetics, Isotherms, and Mechanism Analysis. *Water Air Soil Pollut*, **2015**, 226: 306.

REMOVAL OF Ni(II) ON SEAWATER NEUTRALIZED RED MUD**Vu M.X.¹, Pham L.T.¹, Le M.H.T.², Nguyen D.T.¹**¹*Institute for Tropical Technology, Vietnam Academy of Science and Technology, Hanoi, Vietnam*²*Institute for Technology of Radioactive and Rare Elements, Hanoi, Vietnam**e-mail: vxminh@itt.vast.vn*

Red mud is the residue of aluminum refining from bauxite by Bayer technology, highly alkaline, small particle size, complex composition, a large amount of waste discharged into the environment,.... endangering the ecological environment and human health. Red mud is highly alkaline (pH ~ 11–13), so it must be neutralized before being discharged into the environment and reused research. There are many agents that neutralize red mud [1] such as the use of seawater, gypsum, acids, and microorganisms. In fact, seawater is often used to [2,3] as a neutralizing agent because of its high economic and environmental significance. In this paper red mud from Lam Dong Aluminum Co., Vietnam was neutralized by natural seawater at different liquid/solid ratios. The results showed that, at the liquid/solid ratio $\geq 2.5/1$, the pH value of the red mud decreased to ≤ 8.5 . Structural characteristics of red mud before and after neutralization were also analyzed by SEM, EDX, XRD, BET methods. Neutralized red mud (RMSW) was used as an adsorbent to remove Ni²⁺ ions in water. There have been some research authors using red mud as adsorbent Ni²⁺ [4–6], but there have been no articles using neutral red mud by seawater to treat Ni²⁺. The results showed that the adsorption of Ni²⁺ of neutralized red mud best at pH 7, the adsorption rate was quite rapid, reaching equilibrium after 120 minutes. Experimental adsorption data follow the Langmuir adsorption isotherm model and adsorption capacity of neutralized red mud by seawater RMSW (13.5 mg/g) better than raw red mud RMR (8.2 mg/g).

LITERATURE

- [1] Gräfe M., Power G., Klauber C. Bauxite residue issues: III. Alkalinity and associated chemistry. *Hydrometallurgy*, **2011**, 108, 60–79.
- [2] Menzies N.W., Fulton I. M., and Morrell W.J. Seawater Neutralization of Alkaline Bauxite Residue and Implications for Revegetation. *J. Environ. Qual.* **2004**, 33, 1877–1884.
- [3] Tuazona D., Cordera G.D. Life cycle assessment of seawater neutralised red mud for treatment of acid mine drainage. *Resources, Conservation and Recycling*. **2008**, 52, 1307–1314.
- [4] Pichinelli B.C., Silva M.S.G., Conceição F.T., Menegário A.A., Antunes M.L.P., Navarro G.R.B., Moruzzi R.B. Adsorption of Ni(II), Pb(II) and Zn(II) on Ca(NO₃)₂-Neutralised Red Mud. *Water Air Soil Pollut*, **2017**, 228, 24p.
- [5] Smiciklas I., Smiljanic S., Peric-Grujic A., Sljivic-Ivanovic M., Mitric M., Antonovic D. Effect of acid treatment on red mud properties with implications on Ni(II) sorption and stability. *Chemical Engineering Journal*, **2014**, 242, 27–35.
- [6] Smiciklas I., Smiljanic S., Peric-Grujic A., Sljivic-Ivanovic M., Antonovic D. The influence of citrate anion on Ni(II) removal by raw red mud from aluminum industry. *Chemical Engineering Journal*, **2013**, 214, 327–335.

BINDING OF VITAMIN B6-DERIVED HYDRAZONES TO BOVINE SERUM ALBUMIN

Zavalishin M.N.¹, Gamov G.A.¹, Sharnin V.A.¹, Usacheva T.R.¹, Arena G.², Sgarlata C.²

¹Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russia

²Department of Chemical Sciences, University of Catania, Catania, Italy

e-mail: ggamov@isuct.ru

Low molecular weight compounds binding to blood transport proteins is an important step to their delivery into living cells. For this reason, a study of newly synthesized compounds with potential biological activity often includes the investigation of their interaction with some model transport proteins (e.g. bovine or human serum albumin (BSA or HSA)).

3-Hydroxy-2-methyl-5-[(phosphonoxy)methyl]-4-pyridinecarboxaldehyde (pyridoxal 5'-phosphate, **PLP**) and 3-hydroxy-5-(hydroxymethyl)-2-methylisonicotinaldehyde (pyridoxal, **PL**) are the cofactors which exhibit a wide spectrum of enzymatic activity including, among others, decarboxylation, deamination as well as transamination processes. Hydrazones derived from **PL** or **PLP** also possess biological activities, i.e., they show anti-proliferative action, prevent copper-mediated ascorbate oxidation and have been suggested for the treatment of Wilson disease and thalassemia.

Therefore, the study of bovine serum albumin interaction with **PLP**-based hydrazones might be of interest in view of their beneficial/adverse effects.

Bovine serum albumin interaction with **PLP**-derived hydrazones was investigated by spectrofluorimetry and isothermal titration calorimetry (ITC). Examples of BSA corrected emission spectra are shown in the figures below.

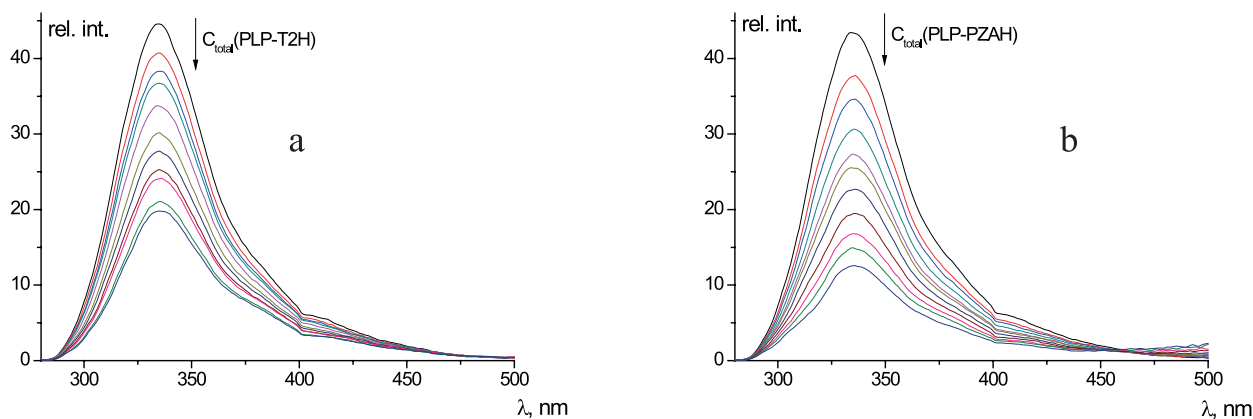


Figure. Corrected emission spectra of BSA in the presence of increasing amounts of PLP-thiophene-2-carbohydrazide (a) and PLP-pyrazinecarbohydrazide (b)

The binding constants calculated for different hydrazones as well as the light emission characteristics of the complexes BSA-hydrazones are discussed. IR spectra of free BSA and its mixture with hydrazones were also registered and used to evidence the changes in the secondary structure of protein induced by the ligands. The above systems were investigated in parallel by ITC to double check the species formed in solution and to obtain ΔH and ΔS values.

The study was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project FZZW-2020-0009, RFBR (project 19-33-90160) and a grant from the Council on Grants of the President of the Russian Federation (project 14.Z56.20.2026-MK).

СОДЕРЖАНИЕ

Азарапин Н.О., Бурханова Т.М., Моница Л.Н. ЭТАПЫ ОКИСЛЕНИЯ BaLaCuS₃.....	3
Алексеева О.В., Смирнова Д.Н., Носков А.В., Привезенцева К.Д. ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ГАЛЛУАЗИТ/МАГНЕТИТ	4
Алексеева О.В., Носков А.В., Привезенцева К.Д. ИССЛЕДОВАНИЕ СОРБЦИОННОЙ АКТИВНОСТИ КОМПОЗИТОВ ЭТИЛЦЕЛЛЮЛОЗА/ГАЛЛУАЗИТ ПО ОТНОШЕНИЮ К МЕТИЛЕНОВОМУ ГОЛУБОМУ	5
Батанов А.А., Румянцев Р.С., Сушкова К.А., Ильин А.А., Ильин А.П. ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ ОСАДИТЕЛЯ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И КАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА CuO/ZnO/Al₂O₃ КОПОЗИЦИЙ, ПРИМЕНЯЕМЫХ ДЛЯ СИНТЕЗА МЕТАНОЛА.....	6
Батракова А.А., Алопина Е.В., Агеева Т.А. СИНТЕЗ ПОРФИРИНПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ.....	7
Бикяшев Э.А., Кубрин С.П., Мараховский М.А., Барановская Л.В., Поподько Д.О. РОЛЬ ПРЕКУРСОРОВ В ФОРМИРОВАНИИ СТРУКТУРЫ СТАННАТОВ БАРИЯ (СТРОНЦИЯ): МАКРОСКОПИЧЕСКИЙ И ЛОКАЛЬНЫЙ УРОВЕНЬ	8
Бикяшев Э.А., Кубрин С.П., Попов А.В., Поподько Д.О., Барановская Л.В. СИНТЕЗ, СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФЕРРОСТАННАТОВ СТРОНЦИЯ	9
Бикяшев Э.А., Кубрин С.П., Тер-Оганесян Н.В., Попов А.В., Дудченко В.С. ВЛИЯНИЕ СОСТАВА, ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ СИНТЕЗА И ПОСТСИНТЕЗНОЙ ОБРАБОТКИ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ, ЛОКАЛЬНУЮ И МАГНИТНУЮ СТРУКТУРУ ФЕРРОСТАННАТОВ БАРИЯ.....	10
Бикяшев Э.А., Дармаева Н.Д. ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ (1-x-y)PMN-xLMN- урТ НА ИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ПОВЕДЕНИЕ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ.....	11
Водянова О.С., Банакова Е.А., Марфин Ю.С. СИНТЕЗ, СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ VOIPY С ТРОЙНОЙ СВЯЗЬЮ	12
Глазкова М.Е., Родина Ю.С., Агеева Т.А., Койфман О.И. ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ КООРДИНИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ОБРАЗОВАНИЕ ИЗОПОРФИРИНАТОВ ЦИНКА В РАСТВОРЕ	13
Гончаренко А.А., Тараканчикова Я.В., Трофимов М.А., Пельтек О.О., Лепик К.В., Муслимов А.Р. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ДОСТАВКИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ РЕДОКС-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КАПСУЛ.....	14

Гржегоржевский К.В., Туктакиева К.Э. КОВАЛЕНТНАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ПОЛИАЛЛИЛАМИНА МОЛЕКУЛАМИ РОДАМИНА-Б И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЕ СВЯЗЫВАНИЕ С КЕПЛЕРАТОМ Mo₁₃₂	15
Гришин И.С., Смирнов Н.Н. МЕХАНОХИМИЧЕСКАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ С ПОЛУЧЕНИЕМ КРЕМНИЙОКСИУГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ	16
Гуськов С.А., Кострова Е.А., Малясова А.С., Тихомирова Т.В., Александрыйский В.В. ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЙ МОНОМЕР НА ОСНОВЕ 4-[(Е)-(4'-ГИДРОКСИФЕНИЛ) ДИАЗЕНИЛ]ФТАЛОНИТРИЛА	17
Данилова Е.А., Юнникова Л.П., Суворова Ю.В., Исляйкин М.К. ТРОПИЛИРОВАННЫЕ АМИНЫ – ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ОБЪЕКТЫ С АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТЬЮ	18
Евдокимова А.В., Евдокимова О.Л. БАКТЕРИЦИДНЫЕ АГЕНТЫ НА ОСНОВЕ ГИБРИДНЫХ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ НАНОМАТЕРИАЛОВ С НАНОЧАСТИЦАМИ ОКСИДОВ МЕТАЛЛОВ	19
Койфман М.О., Мамардашвили Н.Ж. ВЛИЯНИЕ ГАЛОГЕНИРОВАНИЯ МАКРОЦИКЛА НА РЕЦЕПТОРНЫЕ СВОЙСТВА Zn(II)-ТЕТРАФЕНИЛПОРФИРИНОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К АМИНОКИСЛОТАМ	20
Койфман О.И., Юрина Е.С., Малясова А.С., Зданович С.А., Койфман М.О. ПОТЕНЦИАЛ ХЛОРИНА ДЛЯ ИНАКТИВАЦИИ SARS-COV-2	21
Куранова Н.Н., Кабиров Д.Н., Кашина О.В., Фам Тхи Лан, Усачева Т.Р. СОЛЬВАТАЦИЯ КВЕРЦЕТИНА В РАСТВОРИТЕЛЕ ВОДА–ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИД	22
Лебедева Н.Ш., Юрина Е.С., Губарев Ю.А., Лебедев М.А., Гусейнов С.С. АФФИННОСТЬ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА КРОВИ К СИНТЕТИЧЕСКИМ И ПРИРОДНЫМ ПОРФИРИНАМ	23
Лермонтова С.А., Шилягина Н.Ю., Костюк А.Б., Балалаева И.В., Клапшина Л.Г. ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АГЕНТЫ ТЕРАНОСТИКИ ОПУХОЛЕЙ НА ПЛАТФОРМЕ НОВЫХ (ЦИАНО-АРИЛ)ПОРФИРАЗИНОВЫХ ПИГМЕНТОВ С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ АРОМАТИЧЕСКИМИ ГРУППАМИ В ПЕРИФЕРИЙНОМ ОКРУЖЕНИИ МАКРОЦИКЛА	24
Мабаткадамзода К.С., Сафармамадов С.М., Рахматуллоев Б.К. ОКИСЛИТЕЛЬНО-ВОССТАНОВИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ ТИОПИРИНА И ЕГО КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ С ЖЕЛЕЗОМ (III)	25
Малясова А.С., Смирнова П.Н., Трунникова А.С., Пичужкин Е.С. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИРАЗИНОВ	26

Мельников А.А., Смирнов Д.В., Прозоров Д.А., Афинеевский А.В., Румянцев Р.Н. ОДНОСТАДИЙНЫЙ СИНТЕЗ КАТАЛИТИЧЕСКОГО ХЕМОСОРБЕНТА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИНКА.....	27
Морыганов А.П., Дымникова Н.С. РАЗРАБОТКА ИЗДЕЛИЙ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ЛЬНА И ЛЬНОНАНОКОМПОЗИТОВ	28
Муратов И.И., Гарипов Р.М., Ефремова А.А., Хасанов А.И. ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ОБРАБОТКИ ПЭТФ ПЛЕНОК НА АДГЕЗИЮ КРАСОЧНЫХ СЛОЕВ.....	29
Мясоедова В.В. ХИМИЯ ЭНЕРГОЕМКИХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕТИЧЕСКИХ ПОЛИМЕРОВ.....	30
Одинцова О.И., Усачева Т.Р., Петрова Л.С., Кабиров Д.Н. КАЛОРИМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ ДЛЯ ТЕКСТИЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ.....	31
Петухова Е.А., Суворова Ю.В. БИСТИАДИАЗОЛЫ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ.....	32
Родина С.С., Петрова М.В., Агеева Т.А., Койфман О.И. ИЗУЧЕНИЕ ЭКСТРАКООРДИНАЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ ЛИГАНДОВ ПОРФИРИНАТАМИ ЦИНКА И КОБАЛЬТА В РАСТВОРЕ.....	33
Смирнов Д.В., Прозоров Д.А., Афинеевский А.В., Мельников А.А. ХАРАКТЕР ДЕЗАКТИВАЦИИ КАТАЛИЗАТОРОВ РЕАКЦИЙ ЖИДКОФАЗНОЙ ГИДРОГЕНИЗАЦИИ Ni/Al_2O_3 АНИОННЫМИ ЯДАМИ	34
Сырбу С.А., Киселев А.Н., Юрина Е.С., Губарев Ю.А., Гусейнов С.С. 5,15-ДИ-{4'-[4»-(2»'-КАРБОКСИ-2»'-АМИНОЭТИЛ)-ФЕНИЛЕНОКСИ]- ТЕТРАМЕТИЛЕНОКСИФЕНИЛ}-10,20-ДИ-(4'-N-МЕТИЛПИРИДИЛ)-ПОРФИРИН ДИТОЗИЛАТ, НАЦЕЛЕННЫЙ НА СВЯЗЫВАНИЕ СУБЪЕДИНИЦ S-БЕЛКА SARS-COV-2	35
Тестов Д.С., Моржухин А.М., Головкин И.А., Моржухина С.В. МЕТОДОЛОГИЯ НАУЧНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ФАЗОПЕРЕХОДНЫХ СРЕДНТЕМПЕРАТУРНЫХ ТЕПЛОАККУМУЛИРУЮЩИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ КРИСТАЛЛОГИДРАТОВ ДЛЯ ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ.....	36
Усачева Т.Р. КОМПЛЕКСЫ ВКЛЮЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПОЛИФЕНОЛОВ С ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ В ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЯХ	37
Фашевский К.А., Телегин Ф.Ю., Марфин Ю.С. АНАЛИЗ ЭМПИРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛЯРНОСТИ РАСТВОРИТЕЛЕЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХЕМОИНФОРМАЦИОННОГО ПОДХОДА	38

Филатова Н.В., Косенко Н.Ф., Хренов Д.В. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ СИНТЕЗ МАГНЕЗИОХРОМИТА	39
Фуфаева В.А. ПОЛУЧЕНИЕ, ХАРАКТЕРИСТИКА И ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПОДКЛАССА МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСНЫХ СТРУКТУР В ИЗВЛЕЧЕНИИ ГОССИПОЛА ИЗ ХЛОПКОВОГО МАСЛА	40
Харламова П.С., Николаева О.И., Агеева Т.А. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИ-2-ГИДРОКСИПРОПИЛАКРИЛАТА В РАСТВОРЕ РЯДА РАСТВОРИТЕЛЕЙ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	41
Храмогин В.В., Косенко Н.Ф., Филатова Н.В. ШПИНЕЛЬОБРАЗУЮЩИЕ СВЯЗКИ.....	42
Шагурин А.Ю., Погонин А.Е., Марфин Ю.С. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И ВИБРАЦИОННО-РАЗРЕШЁННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ AZA-BOPIPY	43
Шапкин Н.П., Хальченко И.Г., Баланов М.И. СТРОЕНИЕ ПОЛИМЕТАЛЛКРЕМНИЕВЫХ НАНОКОМПЛЕКСОВ И ИХ ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ.....	44
Шилов И.В., Печникова Н.Л., Агеева Т.А. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ИНИЦИАТОРОВ В СИНТЕЗЕ ПОРФИРИНПОЛИМЕРОВ В УСЛОВИЯХ ТЕРМИЧЕСКОГО НАГРЕВА И МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	45
Abyar F., Zare R., Gamov G. MOLECULAR DOCKING OF PYRIDOXAL 5'-PHOSPHATE ISONIAZID HYDRAZONE WITH DNA AND PROTEINS	46
Be P.T., Ha N.T.T., Ha N.N. A THEORETICAL STUDY OF ADSORPTION OF PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (DDT, 666) ON GRAPHITIC CARBON NITRIDE (G-C₃N₄) BY MEANS OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH	47
Kabirov D.N., Usacheva T.R., Silvestri T., Niccoli M., Mayol L., Biondi M., Giancola C. PHASE SOLUBILITY AND THERMOANALYTICAL STUDIES OF THE INCLUSION COMPLEX FORMATION BETWEEN CURCUMIN AND HYDROXYPROPYL-β-CYCLODEXTRIN IN HYDROALCOHOLIC SOLUTIONS.....	48
Krutova O.N., Usacheva T.R., Niccoli M., Giancola C. THERMOCHEMICAL ANALYSIS OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS OF L-CARNOSINE WITH ISONICOTINIC ACID IN AQUEOUS SOLUTIONS	49
Kuznetsov D.A., Naeem M.A., Kumar P.V., Abdala P.M., Fedorov A., Müller C.R. ELUCIDATING THE EFFECT OF METAL SUBSTITUTION IN RUTHENIUM PYROCHLORES ON THE LATTICE OXYGEN BINDING AND WATER OXIDATION ACTIVITY.....	50
Markova N.V. IMPROVING THE QUALITY AND REPRODUCIBILITY OF DATA IN DRUG DISCOVERY	51

Ostroushko A.A., Russkikh O.V., Gagarin I.D., Filonova E.A., Vylkov A.I., Belousov E.M., Maksimchuk T.Yu., Permiakova A.E. GENERATION OF ELECTRIC CHARGES DURING THE FORMATION OF NANOCRYSTALLINE COMPLEX OXIDES IN COMBUSTION REACTIONS: FUNDAMENTAL AND PRACTICAL ASPECTS.....	52
Pham T.L., Usacheva T.R. INCLUSION COMPLEX FORMATION OF B-CYCLODEXTRIN WITH SOME OF PHENOLIC COMPOUNDS	53
Titov V.A., Naumova I.K., Nikitin D., Losev N.V., Kosterin D.Yu., Lipatova I.M., Khlyustova A.V., Sirotkin N.A., Choukourov A. BACTERICIDAL ACTIVITY OF CHITOSAN / SILVER BASED COMPOSITES SYNTHESIED BY PLASMA-SOLUTION METHOD	54
Tonkushina M.O., Gagarin I.D., Belozerova K.A., Ostroushko A.A. MODELING THE BEHAVIOR OF A NANOCLUSTER $\{Mo_{72}Fe_{30}\}$ IN THE BLOOD AND ITS INTERACTION WITH THE DOXORUBICIN.....	55
Vu M.X., Pham L.T., Le M.H.T., Nguyen D.T. IMPROVING PHOSPHATE ADSORPTION CAPACITY OF RED MUD BY ACID-THERMAL TREATMENT	56
Vu M.X., Pham L.T., Le M.H.T., Nguyen D.T. REMOVAL OF Ni(II) ON SEAWATER NEUTRALIZED RED MUD	57
Zavalishin M.N., Gamov G.A., Sharnin V.A., Usacheva T.R., Arena G., Sgarlata C. BINDING OF VITAMIN B6-DERIVED HYDRAZONES TO BOVINE SERUM ALBUMIN.....	58

АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Агеева Т.А. – 7, 13, 45, 33, 41
 Азарапин Н.О. – 3
 Александрыйский В.В. – 17
 Алексеева О.В. – 4
 Алексеева О.В. – 5
 Алопина Е.В. – 7
 Афинеевский А.В. – 27
 Афинеевский А.В. – 34
- Балалаева И.В. – 24
 Баланов М.И. – 44
 Банакова Е.А. – 12
 Барановская Л.В. – 8, 9
 Батанов А.А. – 6
 Батракова А.А. – 7
 Бикяшев Э.А. – 8, 9, 10, 11
 Бурханова Т.М. – 3
- Водянова О.С. – 12
- Гарипов Р.М. – 29
 Глазкова М.Е. – 13
 Головкин И.А. – 36
 Гончаренко А.А. – 14
 Гржегоржевский К.В. – 15
 Гришин И.С. – 16
 Губарев Ю.А. – 23, 35
 Гусейнов С.С. – 23, 35
 Гуськов С.А. – 17
- Данилова Е.А. – 18
 Дармаева Н.Д. – 11
 Дудченко В.С. – 10
 Дымникова Н.С. – 28
- Евдокимова А.В. – 19
 Евдокимова О.Л. – 19
 Ефремова А.А. – 29
- Зданович С.А. – 21
- Ильин А.А. – 6
 Ильин А.П. – 6
 Исляйкин М.К. – 18
- Кабиоров Д.Н. – 22, 31
- Кашина О.В. – 22
 Киселев А.Н. – 35
 Клапшина Л.Г., 24
 Койфман М.О. – 20, 21
 Койфман О.И. – 13, 21, 33
 Косенко Н.Ф. – 39, 42
 Кострова Е.А. – 17
 Костюк А.Б. – 24
 Кубрин С.П. – 8, 9, 10
 Куранова Н.Н. – 22
- Лебедев М.А. – 23
 Лебедева Н.Ш. – 23
 Лепик К.В. – 14
 Лермонтова С.А. – 24
- Мабаткадамзода К.С. – 25
 Малясова А.С. – 17, 21, 26
 Мамардашвили Н.Ж. – 20
 Мараховский М.А. – 8
 Марфин Ю.С. – 12, 38, 43
 Мельников А.А. – 27, 34
 Моница Л.Н. – 3
 Моржухин А.М. – 36
 Моржухина С.В., 36
 Морыганов А.П. – 28
 Муратов И.И. – 29
 Муслимов А.Р. – 14
 Мясоедова В.В. – 30
- Николаева О.И. – 41
 Носков А.В. – 4
 Носков А.В. – 5
- Одинцова О.И. – 31
- Пельтек О.О. – 14
 Петрова Л.С. – 31
 Петрова М.В. – 33
 Петухова Е.А. – 32
 Печникова Н.Л. – 45
 Пичужкин Е.С. – 26
 Погонин А.Е. – 43
 Попов А.В. – 9, 10
 Поподько Д.О. – 8, 9
 Привезенцева К.Д. – 4, 5
- Прозоров Д.А. – 27, 34
- Рахматуллоев Б.К. – 25
 Родина С.С. – 33
 Родина Ю.С. – 13
 Румянцев Р.Н. – 27
 Румянцев Р.С. – 6
- Сафармамадов С.М. – 25
 Смирнов Д.В. – 27, 34
 Смирнов Н.Н. – 16
 Смирнова Д.Н. – 4
 Смирнова П.Н. – 26
 Суворова Ю.В. – 18, 32
 Сушкова К.А. – 6
 Сырбу С.А. – 35
- Тараканчикова Я.В. – 14
 Телегин Ф.Ю. – 38
 Тер-Оганесян Н.В. – 10
 Тестов Д.С. – 36
 Тихомирова Т.В. – 17
 Трофимов М.А. – 14
 Трунникова А.С. – 26
 Туктакиева К.Э. – 15
- Усачева Т.Р. – 22, 31, 37
- Фам Тхи Лан – 22
 Фащевский К.А. – 38
 Филатова Н.В. – 39, 42
 Фуфаева В.А. – 40
- Хальченко И.Г. – 44
 Харламова П.С. – 41
 Хасанов А.И., 29
 Храмогин В.В. – 42
 Хренов Д.В., 39
- Шагурин А.Ю. – 43
 Шапкин Н.П. – 44
 Шилов И.В. – 45
 Шиягина Н.Ю. – 24
- Юнникова Л.П. – 18
 Юрина Е.С. – 21, 23, 35

AUTHOR INDEX

- Abdala P.M. – 50
Abyar F. – 46
Arena G. – 58
- Be P.T. – 47
Belousov E.M. – 52
Belozerova K.A. – 55
Biondi M. – 48
- Choukourov A. , 54
- Fedorov A. – 50
Filonova E.A. – 52
- Gagarin I.D. – 52, 55
- Gamov G.A. – 46, 58
- Giancola C. – 48, 49
- Ha N.N. – 47
Ha N.T.T. – 47
- Kabirov D.N. – 48
Khlyustova A.V. – 54
Kosterin D.Yu. – 54
Krutova O.N. – 49
Kumar P.V. – 50
Kuznetsov D.A. – 50
- Le M.H.T. – 56, 57
- Lipatova I.M. – 54
Losev N.V. – 54
- Maksimchuk T.Yu. – 52
Markova N.V. – 51
Mayol L. – 48
Müller C.R. , 50
- Naeem M.A. – 50
Naumova I.K. – 54
Nguyen D.T. – 56, 57
Niccoli M. – 48, 49
Nikitin D. – 54
- Ostroushko A.A. – 52, 55
- Permiakova A.E. , 52
Pham L.T. – 56, 57
Pham T.L. – 53
- Russkikh O.V. – 52
- Sgarlata C. – 58
Sharnin V.A. – 58
Silvestri T. – 48
Sirotkin N.A. – 54
- Titov V.A. – 54
Tonkushina M.O. – 55
- Usacheva T.R. – 48, 49, 53, 58
- Vu M.X. – 56, 57
Vylkov A.I. – 52
- Zare R. – 46
Zavalishin M.N. – 58