



ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

20-24 сентября 2021 г.
Иваново, Россия

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021

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

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

**VI МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ПО ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

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

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Российская академия наук
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Ивановский государственный химико-технологический университет**

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021:

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

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

**VI Международная научная конференция по
химии и химической технологии**

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

**20–24 сентября 2021
г. Иваново**

ОБОБЩЕНИЕ УРАВНЕНИЯ КЛАПЕЙРОНА-КЛАУЗИУСА ДЛЯ НАНОСИСТЕМЫ

Магомедов М.Н.

Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Объединенного Института
Высоких Температур РАН, Махачкала, Россия
mahmag4@mail.ru

Известно, что состояние двух нано-фаз с равным числом атомов N определяется значением свободной энергии Гиббса: $G(P, T, \Sigma)$, которая зависит от давления (P), температуры (T) и площади поверхности (Σ) нано-фазы. Равновесие двух нано-фаз при фазовом переходе первого рода (ФП1) выполняется при соблюдении условий: механического ($P_s = P_l$), термического ($T_s = T_l$) и химического ($G_s = G_l$) равновесия. Исходя из этого, для наклона линии ФП1 в T - P -координатах нами получено выражение:

$$\frac{dT_m}{dP} = \frac{\Delta v}{\Delta s} \left[1 - \frac{\Delta z_f}{\Delta v} \right], \quad \text{где} \quad z_f = -P_{sf} \left(\frac{dv}{dP} \right)_T = P_{sf} \frac{v}{B_T}. \quad (1)$$

Здесь $\Delta x = x_l - x_s$ – изменение функции x при ФП1, $s = -[\partial(G/N)/\partial T]_{P,\Sigma}$ и $v = [\partial(G/N)/\partial P]_{T,\Sigma}$ – удельные (на атом) значения энтропии и объема, P_{sf} – поверхностное давление для нанофазы, $B_T = -(\partial P/\partial \ln \Sigma^{3/2})_T = -(\partial P/\partial \ln v)_T$ – модуль упругости.

Как было показано в [1], функция P_{sf} для твердой фазы много меньше, чем для жидкой, т.е. значение Δz_f всегда положительное: $\Delta z_f = z_f(l) - z_f(s) \cong z_f(l) = P_{ls}(l) v_l/B_T(l) > 0$, где $P_{ls}(l)$ – давление Лапласа для жидкой нанофазы. Так как $P_{ls}(l) v_l = (2/3)\sigma_l \Sigma_l / N \sim 1/N^{1/3}$, где $\sigma_l = (\partial G_l/\partial \Sigma_l)_{T,P}$ – удельная (на единицу площади) поверхностная энергия жидкой нанофазы. Тогда (1) можно представить в виде:

$$T_m'(P) = \frac{dT_m}{dP} = \frac{\Delta v}{\Delta s} \left[1 + \frac{v_l C_\Sigma}{\Delta v N^{1/3}} \right], \quad \text{где} \quad C_\Sigma = \frac{2\sigma_l(\Sigma/N^{2/3})}{3B_T(l)v_l} > 0. \quad (2)$$

В случае ФП1 кристалл-жидкость (К-Ж) изменение удельной энтропии всегда положительно: $\Delta s = s_l - s_s > 0$, но для изменения удельного объема возможны два варианта:

1. Для нормально плавящихся веществ выполняется: $\Delta v = v_l - v_s > 0$. Тогда функция $T_m'(P)$ будет увеличиваться при переходе от макро- к наносистеме.

2. Для веществ плавящихся аномально выполняется: $\Delta v = v_l - v_s < 0$. В этом случае функция $T_m'(P)$ будет уменьшаться при переходе от макро- к наносистеме.

Так как при $P = 0$ для обоих случаев выполняется [2]: $T_m(\infty) > T_m(N)$, то для обоих случаев при определенном давлении (P_0) зависимости $T_m(P)$ для макро- и нано-систем пересекаются. Легко понять, что в этой точке размерная зависимость для температуры ФП1 К-Ж исчезает. В области низких давлений ($P < P_0$) при изобарном уменьшении размера наносистемы величина $T_m^* = T_m(N)/T_m(\infty)$ уменьшается: $T_m^* < 1$, а в области $P > P_0$ функция T_m^* при изобарном уменьшении N возрастает: $T_m^* > 1$.

Легко видеть, что (1) и (2) обобщают уравнение Клапейрона-Клаузиуса (УКК) на случай наносистем с равным числом атомов N и ограниченной поверхностью Гиббса с площадями Σ_s и Σ_l . Выражения (1) и (2) переходят в УКК при $\Sigma/N \rightarrow 0$, т.е. при $N \rightarrow \infty$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках гранта № 18-29-11013_мк.

1. М.Н. Магомедов. *Росс. Нанотехнологии*, 2014, **9**, 5-6, 63-72. DOI: 10.1134/S1995078014030100

2. М.Н. Магомедов. *Письма в ЖТФ*, 2016, **42**, 14, 94-102. DOI: 10.1134/S1063785016070245

ЭЛЕКТРИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ СТРУКТУРЫ ХИРАЛЬНОГО НЕМАТИКА С ПЛАНАРНО-КОНИЧЕСКИМ СЦЕПЛЕНИЕМ

Краханев М.Н.^{1,2}, Прищепа О.О.¹, Сутормин В.С.^{1,2}, Бикбаев Р.Г.^{1,2}, Тимофеев И.В.^{1,2}, Зырянов В.Я.¹

¹Институт физики им. Л. В. Киренского, Федеральный исследовательский центр "Красноярский
научный центр Сибирского отделения РАН", Красноярск, Россия

²Институт инженерной физики и радиоэлектроники, Сибирский федеральный университет,
Красноярск, Россия

kmm@iph.krasn.ru

Хиральные нематики (холестерики) способны к формированию богатого разнообразия ориентационных структур, которые определяют их уникальные топологические и оптические свойства, а также особенности отклика на внешние воздействия [1]. Формирующиеся структуры зависят от граничных условий, задаваемых на подложках. На сегодня изучены структуры с планарными, гомеотропными и гибридными гомеотропно-планарными граничными условиями. Недавно нами были начаты исследования слоев холестерика с планарно-коническими граничными условиями [2].

В данной работе представлены результаты исследования отклика на электрическое поле структур холестерика, формирующихся при планарно-коническом сцеплении.

В исходном состоянии реализуется закрученная конфигурация с линейными дефектами в виде петли (рисунок 1) или пары линейных поверхностных дефектов, расположенных на подложке с коническим сцеплением [3]. Петлеобразный дефект содержит пару точечных особенностей, на которых ориентация директора изменяется на 180° . Электрическое поле, направленное перпендикулярно слою холестерика, изменяет как полярный, так и азимутальный угол директора на границе с коническим сцеплением. В результате происходит стягивание и схлопывание петли дефекта, или трансформация линейного дефекта на подложке с коническим сцеплением в линейный дефект нового типа, расположенный вблизи подложки с планарным сцеплением.

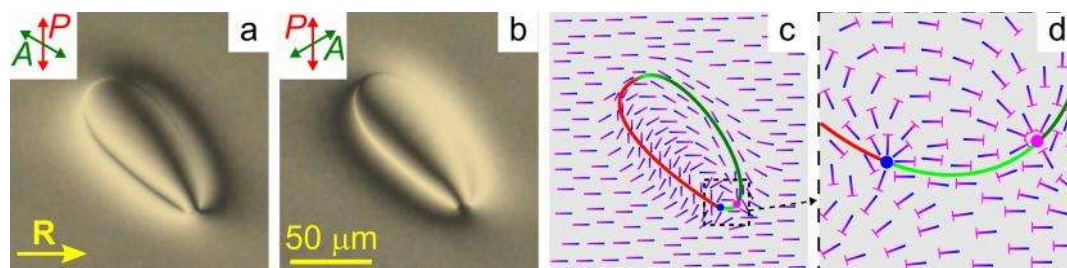


Рисунок 1 – Фотографии петли дефекта, сделанные для ориентации анализатора (A) -30° (a) и $+30^\circ$ (b) по отношению к направлению натирки R . Распределение директора на подложке с коническим сцеплением вблизи петли (c) и пары точечных особенностей (d).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №18-72-10036).

1. P. Oswald, & P. Pieranski. *Nematic and cholesteric liquid crystals: concepts and physical properties illustrated by experiments*, (Taylor & Francis, Boca Raton, 2005), pp. 618.
2. M.N. Krakhalev, et al. *Crystals*, 2019, **9**, 249.
3. M.N. Krakhalev, et al. *Scientific Reports*, 2020, **10**, 4907.

ВЛИЯНИЕ СОРАСТВОРИТЕЛЯ НА ПРОСТРАНСТВЕННУЮ СТРУКТУРУ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ЛИДОКАИНА ПРИ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ СОСТОЯНИЯ CO_2

Ходов И.А.¹, Белов К.В.¹, Дышин А.А.¹, Киселев М.Г.¹.

¹Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия

iakh@isc-ras.ru

Информация о пространственной структуре малых молекул имеет ключевое значение для понимания процессов зародышеобразования кристаллов различной полиморфной формы [1]. При этом влияние растворителя на данные процессы может оказать существенное влияние на конформационное поведение малых молекул лекарственных соединений.

Для понимания такого рода процессов мы выбрали местный анестетик и сердечный депрессант лидокаин, молекулы которого имеют в своей структуре характеристические группы для специфических взаимодействий.

Для выбранного соединения были определены пространственные структуры в ДМСО и сверхкритическом диоксиде углерода scCO_2 , а также в их смеси на основе двумерных экспериментов ядерного эффекта Оверхаузера NOESY.

Было показано существенное влияние растворителя на конформационное поведение лидокаина в scCO_2 и обсуждены причины их обуславливающие.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (№ 01201260481 и № 0120095082), Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-29-06008 и № 20-43-370011) и Советом по грантам Президента Российской Федерации (проект МК-662.2021.1.3). Эксперименты ЯМР были проведены на уникальной научной установке (<http://www.ckr-rf.ru/usu/503933/>) Г.А. Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук (ИХР РАН) (Россия).

1. I. Khodov, A. Dyshin, S. Efimov, D. Ivlev, M. Kiselev. *Journal of Molecular Liquids*, 2020, **309**, 113113.

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Доклады приглашенных лекторов</i> КЛАСТЕРА КОНФЕРЕНЦИЙ	5-10
<i>Тезисы докладов</i> XIV Международной научной конференции «Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах»	11-123
<i>Тезисы докладов</i> XI Международной научной конференции «Кинетика и механизм кристаллизации. Кристаллизация и материалы нового поколения»	124-252
<i>Тезисы докладов</i> VI Международной научной конференция по химии и химической технологии	253-338
<i>Тезисы докладов</i> XIII Всероссийской школы-конференции молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем» (Крестовские чтения)	339-394
Алфавитный указатель	395-405
Содержание	406
Рекламные материалы	

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021:

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

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

VI Международная научная конференция по химии и химической технологии

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

(Тезисы докладов)

Тезисы докладов опубликованы в авторской редакции

ISBN 978-5-904580-87-2

Подписано в печать 19.07.2021 г. Формат 60x84 1/8

Печать плоская. Печ. л. 52,0. Усл. печ. л. 48,4.

Заказ № 21301. Тираж 50 экз

Изд. Лиц. ЛР № 049975 от 29.06.1999

Отпечатано в АО «Ивановский издательский дом»

153000, г. Иваново, ул. Степанова, 5. Тел./факс: (4932) 30-32-37, 30-14-11

E-mail: 301411@rambler.ru