



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**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОМИГРАЦИИ ЖИДКИХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ВКЛЮЧЕНИЙ В КРИСТАЛЛЕ В СТАЦИОНАРНЫХ ТЕПЛОВЫХ УСЛОВИЯХ

Гармашов С.И.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
garmashov@sfedu.ru

Жидкие включения, заключенные в кристалле, представляют интерес для изучения межфазных процессов, их механизма и кинетики, анизотропии удельной межфазной энергии, ряда других физико-химических параметров. Для корректного анализа экспериментальных данных о поведении жидких включений при различных внешних воздействиях (неоднородный нагрев кристалла, колебания температуры, и т.д.) возникает необходимость в математической модели, которая бы максимально полно и точно учитывала процессы, протекающие в жидкой фазе и на межфазных границах.

Одно из явлений, связанных с жидкими включениями в кристалле, состоит в возможности их движения под действием градиента температуры [1-11] и впервые упоминается в работах известного советского минералога Г.Г. Леммлейна [1], а позднее в многочисленных патентах У.Г. Пфанна [2], предложившего использовать это явление для локального легирования кристаллов и создания полупроводниковых приборов. Теоретическое описание миграции жидких включений в неоднородно нагретом кристалле (или кратко – термомиграции [4]) с различными допущениями было выполнено в работах [3-11].

В настоящем докладе представлена модель частного случая термомиграции, в которой форма включения считается цилиндрической, тепловые условия строго стационарны, учтены анизотропия межфазной энергии, межфазной кинетики, различные механизмы межфазных процессов.

С помощью разработанных модели и компьютерных программ, использующих разные подходы к решению задачи моделирования, получены новые результаты и проведено их сравнение с ранее опубликованными данными, в частности, о характере зависимости скорости термомиграции цилиндрических включений и формы их сечения от площади этого сечения, вида и степени анизотропии межфазной энергии, механизмов межфазных процессов. На основе результатов моделирования предлагаются методики определения параметров задачи из анализа экспериментальных данных по термомиграции.

- 1 Г.Г. Леммлейн. Докл. АН СССР, 1952, **85**, 325-328.
- 2 W.G. Pfann. *J. Metals*, 1955, 961-964.
- 3 W.A. Tiller. *J. Appl. Phys.*, 1963, **34**, 2757-2762.
- 4 H.E. Cline, T.R. Anthony. *J. Appl. Phys.*, 1977, **48**, 5096-5104.
- 5 Я.Е. Гегузин, М.А. Кривоглаз. *Движение макроскопических включений в твёрдых телах*. М.: Металлургия, 1971.
- 6 В.Н. Лозовский, Л.С. Лунин, В.П. Попов. *Зонная перекристаллизация градиентом температуры полупроводниковых материалов*. М.: Металлургия, 1987.
- 7 V.Yu. Gershanov, S.I. Garmashov. *J. Cryst. Growth*, 2009, **311**, 2722-2730.
- 8 S.I. Garmashov, V.Yu. Gershanov. *J. Cryst. Growth*, 2009, **311**, 413-419.
- 9 В.Ю. Гершанов, С.И. Гармашов. *Журн. техн. физ.*, 2015, **85**, 61-65.
- 10 С.И. Гармашов. *Кристаллография*, 2018, **63**, 827-831.
- 11 С.И. Гармашов. *Физика твёрдого тела*, 2019, **61**, 2303-2306.

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТНОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НЕМАТИКА ДЛЯ КОТОРОГО ПОЛИМЕР ЗАДАЕТ КОНИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Фейзер К.А.¹, Крахалев М.Н.^{1,2}, Зырянов В.Я.¹

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

²*Институт инженерной физики и радиоэлектроники, Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*
krisfeyzer@gmail.com

Капсулированные полимером жидкокристаллические (КПЖК) пленки на сегодняшний день являются перспективными материалами в связи с их широкими возможностями применения в электрооптических устройствах, таких как умные окна, оптические датчики, гибкие устройства отображения информации и пр. [1]. Оптические свойства КПЖК пленок зависят от ориентационной структуры поля директора, формирующейся в каплях жидких кристаллов (ЖК), изменяя которую можно управлять характеристиками всей КПЖК пленки. Например, прикладывая электрическое поле можно регулировать

ее светопропускание. Актуальной задачей, на сегодняшний день, является уменьшение управляющих полей с одновременным достижением высоких значений контрастного отношения.

В данной работе рассмотрен электрооптический отклик КПЖК пленок с коническими граничными условиями. В таких пленках формируются капли ЖК с аксиал-биполярной конфигурацией, которые под действием электрического поля стремятся сориентироваться биполярной осью вдоль приложенного поля [2]. Были исследованы образцы с различной толщиной КПЖК пленок (рис. 1). Вид зависимости коэффициента светопропускания образцов от приложенного напряжения имеет S-образную форму. При этом для всех исследованных образцов характерны малые управляющие напряжения (менее 20 В), при которых достигаются большие коэффициенты светопропускания ячеек во включённом состоянии (более 84%) и большие значения контрастного отношения CR , равные 812 и 4235 для образцов пленки толщиной 20 мкм и 30 мкм.

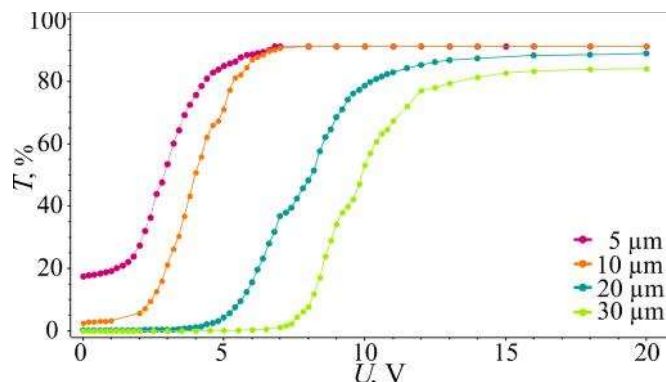


Рисунок 1. Зависимость светопропускания T образцов от приложенного напряжения U для КПЖК пленок толщиной $d = 5$ мкм, 10 мкм, 20 мкм и 30 мкм.

1. P.S. Drzaic. *Journal of Applied Physics*, 1986, **60**, 2142–2148.
2. V.Yu. Rudyak et al. *Physical Review E*, 2017, **96**, 052701.

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫХ СВОЙСТВ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ПРОТИВОГРИБКОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Дрозд К.В., Манин А.Н., Бойцов Д.Е.

Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия
ksdrozd@yandex.ru

Азолы представляют собой обширную группу противогрибковых средств, которые предназначены для местного и системного применения для лечения грибковых инфекций, вызванных чувствительными к ним грибами. Все азолы имеют сходный принцип действия и обладают широким спектром противогрибковой активности. Тем не менее, применение противогрибковых препаратов данного класса ограничено их крайне низкой растворимостью в водных средах и рядом серьезных побочных эффектов. На сегодняшний день, для повышения растворимости лекарственных веществ используют различные подходы, одним из которых является получение многокомпонентных кристаллов: сокристаллов или солей. В настоящей работе для исследования влияния сокристаллизации/солеобразования на растворимость были выбраны два противогрибковых соединения: климбазол и тиоконазол (Рисунок 1). Для скрининга новых многокомпонентных кристаллов исследуемых соединений было использовано десять дикарбоновых кислот.

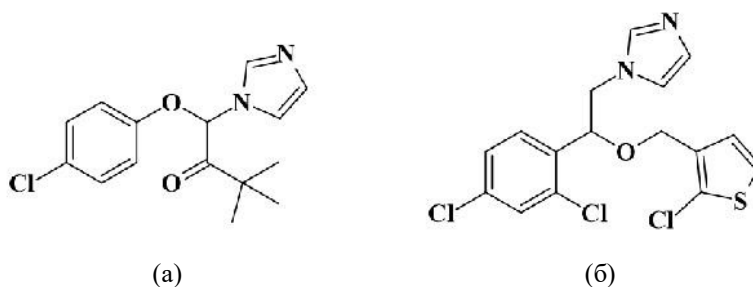


Рисунок 1. Структурные формулы противогрибковых соединений: (а) климбазол, (б) тиоконазол. В результате проделанных экспериментов по кристаллизации с использованием различных растворителей были впервые получены монокристаллы и расшифрованы их кристаллические структуры

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