



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

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
совместно со Школой молодых ученых**

19–20 мая 2026 г.

Иваново, Россия

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

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

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
совместно со Школой молодых ученых**

Россия, Иваново, 19–20 мая 2026 г.

Иваново
Издательство «Ивановский государственный университет»
2026

УДК 532.783
ББК 22.371.23.5
Ж69

Жидкие кристаллы и «умные» наноматериалы (XII Чистяковские чтения) : сборник тезисов докладов Всероссийской научной конференции с международным участием совместно со Школой молодых ученых, Россия, Иваново, 19–20 мая 2026 г. – Иваново : Иван. гос. ун-т, 2026. – 100 с.

ISBN 978-5-7807-1527-6

В сборник включены тезисы докладов участников Всероссийской научной конференции с международным участием «Жидкие кристаллы и “умные” наноматериалы» (XII Чистяковские чтения), проводившейся в Ивановском государственном университете в г. Иваново 19–20 мая 2026 года. Материалы конференции посвящены работам в области получения, исследования и практического использования жидких кристаллов и наноматериалов.

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

Ответственные за выпуск:

д-р хим. наук, проф. **Н.В. Усольцева**
канд. физ.-мат. наук **А.И. Смирнова**
канд. техн. наук **П.В. Королёв**

ISBN 978-5-7807-1527-6

© ФГБОУ ВО «Ивановский
государственный университет», 2026

ПРЕДИСЛОВИЕ

19–20 мая 2026 г. состоялись XII Чистяковские чтения, посвященные 25-летию российского журнала «Жидкие кристаллы и их практическое использование» и 50-летию создания первой в СССР Проблемной лаборатории жидких кристаллов, преемником которой является Научно-исследовательский институт наноматериалов (НИИН) ИвГУ.

С именем проф. И.Г. Чистякова связано возрождение изучения жидких кристаллов в нашей стране в послевоенный период. Следует четко представлять, что в период после Великой Отечественной войны изучение и применение жидких кристаллов в СССР находилось практически на нулевом уровне. Благодаря научной и огромной организационной работе И.Г. Чистякова наша страна встретила «жидкокристаллический бум», возникший в 60-х – начале 70-х гг. и перевооруживший всю мировую электронику, уже имея фундаментальные книги, обзоры и значительный опыт практического применения жидких кристаллов. И.Г. Чистяков издал первую в СССР монографию по жидким кристаллам (1966 г.), провел четыре международных конференции по жидким кристаллам в Иванове, защитил кандидатскую и докторскую диссертации по этому направлению. Научная школа проф. И.Г. Чистякова насчитывает 8 докторов и 25 кандидатов наук.

И.Г. Чистяков создал две научные лаборатории по изучению жидких кристаллов: на базе Ивановского педагогического института (Иваново, 1964 г.) и в Институте кристаллографии АН СССР (Москва, 1970 г.). В 1976 г. лаборатория в Иванове была преобразована решением коллегии Госкомитета СМ СССР по науке и технике и приказом МВ и ССО РСФСР в Проблемную лабораторию жидких кристаллов (ПЛЖК), чье 50-летие мы отмечаем.

Расширение научной тематики позволило преобразовать ПЛЖК в Научно-исследовательский институт наноматериалов (2008 г.). В связи с междисциплинарностью научного направления по жидким кристаллам был создан межвузовский научно-образовательный консорциум «Жидкие кристаллы», в который вошли все основные вузы Иванова и Институт химии растворов РАН.

С опорой на авторитет Ивановской школы ученых-жидкокристаллыщиков в 2001 г. сотрудниками ПЛЖК во главе с проф. Н.В. Усольцевой был образован единственный на постсоветском пространстве журнал «Жидкие кристаллы и их практическое использование». Основной миссией журнала является создание форума для специалистов по обмену научными достижениями и информацией о крупных мероприятиях в области жидких кристаллов. В настоящее время журнал входит в международные и российские базы данных (WoS, Scopus, РИНЦ, список ВАК, Белый список).

При открытии конференции от имени ректора с приветственным словом к участникам обратилась первый проректор ИвГУ О.В. Кузьмина. Она также вручила сотрудникам НИИН и членам редакционной коллегии журнала благодарственные письма ректора в связи с юбилейными датами.

В адрес конференции поступили приветственные послания от академика РАН, проф. А.Р. Хохлова и члена-корреспондента РАН, проф. В.П. Шibaева – сотрудникам НИИН и составу редакционной коллегии в связи с 25-летием успешной работы журнала.

В ходе работы конференции были представлены 14 пленарных, 26 секционных и 22 стендовых доклада ведущих, а также молодых ученых из Москвы, Иванова, Казани, Новосибирска, Нижнего Новгорода, Санкт-Петербурга, Саратова, Самары и других городов России. Были представлены доклады зарубежных ученых из Беларуси, Армении, Таджикистана и Гонконга.

Во время выступлений прозвучали благодарности и поздравления с добрыми пожеланиями от докладчиков в адрес ивановцев в связи с юбилейными датами. При подведении итогов конференции выступили председатель Российского жидкокристаллического общества «Содружество» д-р физ.-мат. наук А.В. Емельяненко (МГУ), д-р техн. наук Г.М. Жаркова (Новосибирск), д-р физ.-мат. наук Е.С. Пикина (Черноголовка, Москва) и ряд других участников.

Председатель оргкомитета конференции проф. Н.В. Усольцева особенно подчеркнула огромный вклад в развитие исследований различных направлений науки о жидких кристаллах

проф. И.Г. Чистякова и его соратников: проф. Л.М. Блинова, проф. С.А. Пикина, проф. В.А. Усольцевой, доц. Г.Г. Майдаченко, чл.-кор. РАН В.П. Шибаета, академика РАН А.Р. Хохлова, проф. А.С. Сонины, первого председателя жидкокристаллического общества «Содружество» проф. В.В. Титова и многих других. Она отметила, что на плечах этих гигантов базируется все развитие науки о жидких кристаллах на постсоветском пространстве и призвала молодежь развивать это направление исследования.

Публикации об И.Г. Чистякове

1. Жукова Л.Н. К 85-летию проф. И.Г. Чистякова // *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2014, **14**(4), 109–110.
2. История органической химии в университетах России / под ред. Е.К. Белоглазкиной, И.П. Белецкой, В.Г. Ненайденко. М.: Техносфера, 2018. 732 с. (Гл. 7: Койфман О.И., Стужин П.А., Шапошников Г.П., Кустова Т.П., Клюев М.В., Усольцева Н.В., Сырбу С.А. История органической химии в Иванове, разд. 7.3.2: НИИ наноматериалов ИвГУ, с. 421–434.) (ISBN 978-5-94836-536-7).
3. Усольцева Н.В. Профессор И.Г. Чистяков – выдающийся ученый, организатор и популяризатор науки о жидких кристаллах // *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2019, **19**(2), 6–14. DOI: 10.18083/LCAppl.2019.2.6.
4. Усольцева Н.В. К 95-летию профессора Игоря Григорьевича Чистякова (1929–1982) // *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2024, **24**(3), 6–13. DOI: 10.18083/LCAppl.2024.3.6.

*Председатель оргкомитета конференции
д-р хим. наук, проф. Н.В. УСОЛЬЦЕВА*

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИЕ ИНДУКТОРЫ СПИРАЛИ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Хиральные нематические фазы, индуцированные хиральными допантами, обладают рядом преимуществ по сравнению со спиральными ЖК, образованными производными холестерина или синтетическими хиральными нематиками. В докладе обсуждаются закономерности индукции спиральных мезофаз под действием макрогетероциклических соединений (МГЦС) и их комплексов.

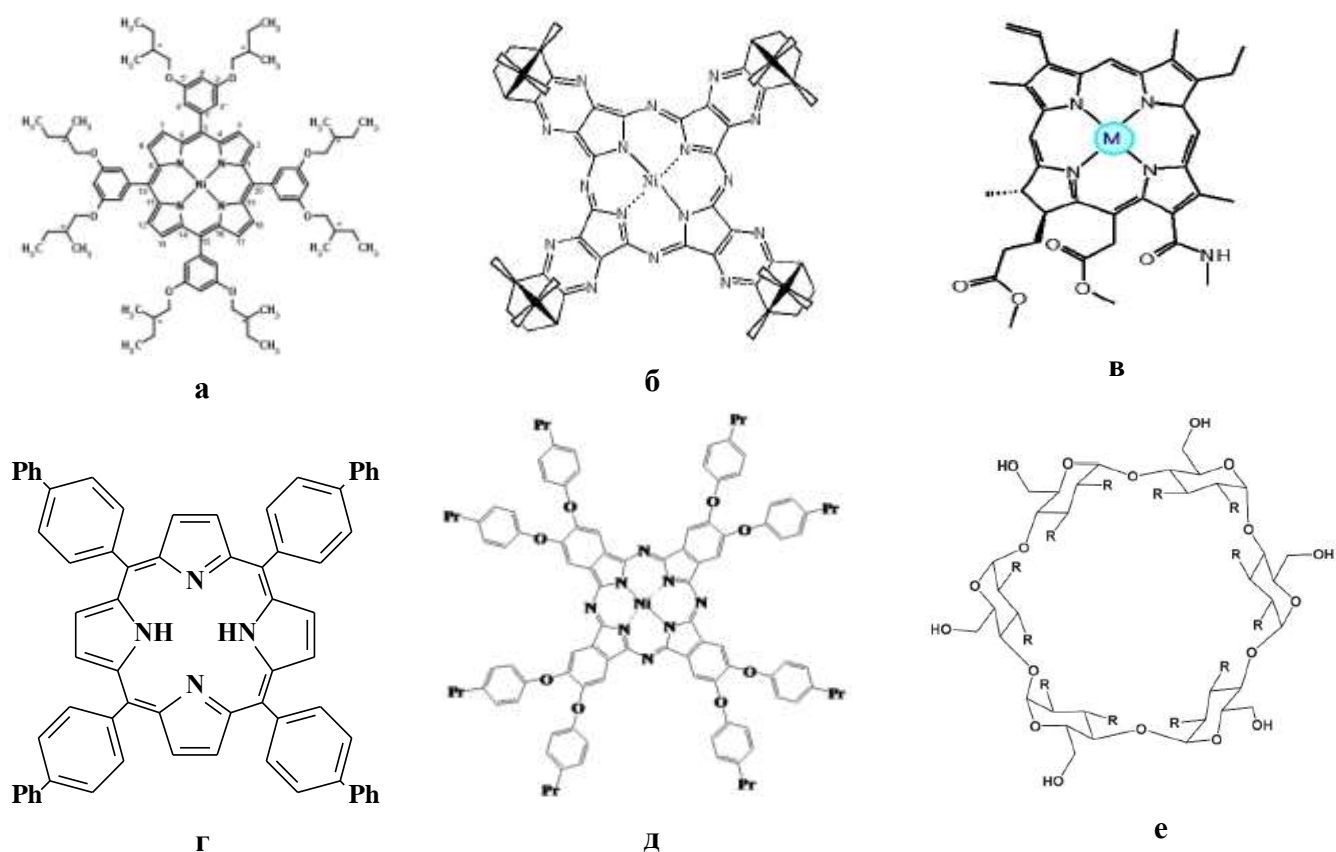


Рисунок 1 – Структуры допантов, используемых для индукции спиральных мезофаз

Основное внимание уделено особенностям формирования спирали в нематиках под действием, порфиринов, гемипорфиразинов, фталоцианинов, тетрапиразинопорфиразинов, хлоринов и их металлокомплексов, а также ацилированных циклодекстринов. Рассматривается влияние структуры макроциклических допантов на термическую стабильность мезофаз, эффективность индукции НТР (helical twisting power), параметр порядка и диэлектрическую проницаемость.

Показано, что эффективная индукция спирали может происходить под действием МГЦС, обладающих как конфигурационной (Рис. 1а,б,в,е), так и конформационной (Рис. 1г,д) хиральностью. В процессах переноса хиральности с допанта на нематический ЖК существенную роль играют супрамолекулярные эффекты. Совокупность квантово-химических и экспериментальных методов (электронная спектроскопия поглощения и кругового дихроизма, ЯМР, диэлькометрия и др.) позволила выявить специфические механизмы переноса хиральности, такие как аксиальная координация, инклюзия.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (грант FZZW-2026-0003).

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

РОЛЬ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ АНИЗОТРОПНЫХ ВЕЩЕСТВ И УПОРЯДОЧЕННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В СОЗДАНИИ НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ И УСТРОЙСТВ

Молекулярный дизайн, управление процессами самоорганизации являются важнейшими задачами при создании материалов с заданными физико-химическими свойствами и разработке разнообразных устройств на их основе [1]. Мы предлагаем при разработке новых материалов и устройств учитывать фактор (роль) анизотропии; обуславливающий образование комплементарных структур. Фундаментальный фактор анизотропии в дополнение к градиентным полям (внешний фактор), определяющим силы притяжения и отталкивания ее элементов, структурированным поверхностям и фрагментам (внутренний фактор) будет способствовать созданию наведенной анизотропии, самоорганизации и упорядочиванию системы. Для получения новых веществ, имеющих стержнеобразную форму молекул и характеризующихся их ориентационной упорядоченностью, целесообразно использовать полифункциональные анизотропные соединения [2], для которых присуща региоселективность протекания реакций.

Электрохимическое анодирование неорганических материалов позволяет создавать упорядоченные структурированные поверхности: наносетчатые пленки алюминия, кремния, оксидов In_2O_3 и SnO_2 (ITO), поры которых могут иметь различные диаметр, глубину и поверхностный рельеф. Указанные структурированные пленки с различным диаметром пор могут быть использованы для получения однородной гомеотропной ориентации молекул анизотропных соединений и жидких кристаллов. Используя данные плёнки как упорядоченные структуры, ориентирующие поверхности, можно создавать качественно новые устройства с уникальными свойствами, совершенствовать и улучшать параметры жидкокристаллических устройств отображения информации. По сравнению с традиционными методами создания ориентирующих покрытий (фотоориентанты, упорядоченные олигомеры и полимерные материалы), электрохимическое анодирование является более простым и экономичным методом.

Анизотропные свойства и хорошее упорядочение молекул природных полимеров расширяет возможности практического применения оригинальных высокоупорядоченных композитов путем включения биополимеров в синтетическую полимерную матрицу. Ожидается, что использование синтетических и природных полимеров в качестве функциональных составляющих и компонентов современных энергетических систем [3], дисплеев и устройств отображения информации приведет к новой парадигме развития инновационных материалов.

Комбинация функционализированных анизотропных материалов, плёнок и поверхностей, характеризующихся упорядоченной рельефной структурой (внутренний фактор) наряду с градиентными полями (внешний фактор), открывают новые перспективы и возможности создания различных устройств, сенсоров, энергетических систем с улучшенными параметрами.

Предлагаемый нами подход отличается оригинальностью, является креативным, имеет целый ряд отличительных достоинств в сравнении с известными методами получения аналогичных соединений и структур, с успехом может быть использован для разработки новых материалов и устройств с широким спектром практического использования.

[1] В.С. Безбородов, Химия жидкокристаллических материалов. Минск: БГТУ, 2017, 277 с.

[2] V.S. Bezborodov, S.G. Mikhalyonok, N.M. Kuz'menok, V.I. Lapanik, G.M. Sasnouski, *Liq. Cryst.*, 2015, **42**(5), 1124-1138. DOI: 10.1080/02678292.2015.1025870

[3] J. Uchida, B. Soberats, M. Gupta, T. Kato, *Adv. Mater.*, 2022, **34**(23), Art. № 2109063. DOI: 10.1002/adma.202109063

Н.В. БАЛЕНКО, С.Н. ПАВЛОВ, В.П. ШИБАЕВ
Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

СТИМУЛ-ЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ПОЛИМЕР-ДИСПЕРГИРОВАННЫЕ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИЕ ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ

Разработка стимул-чувствительных материалов, способных обратимо изменять физико-химические свойства под действием внешних воздействий, является одной из актуальных задач современного материаловедения. Особый интерес представляют полимер-диспергированные жидкие кристаллы, сочетающие уникальные оптические свойства низкомолекулярных жидких кристаллов с механической прочностью и эластичностью полимерной матрицы.

В данной работе разработан и реализован простой и универсальный подход к созданию эластичных полимер-диспергированных композитов на основе холестерических жидких кристаллов. Холестерические смеси на основе производных холестерина диспергированы в виде микронных капель в прозрачных эластомерах (полиуретан, силикон и пластифицированный поливиниловый спирт). Показано, что тип полимерной матрицы определяет морфологию композитов, ориентацию ХЖК-молекул на границе капель и характер механо-оптического отклика. Матрицы, обеспечивающие планарную ориентацию, формируют ярко окрашенные плёнки с выраженным селективным отражением света (СОС), а композиты с гомеотропной ориентацией сильно рассеивают свет, но приобретают селективное отражение при деформации [1].

Одноосное растяжение эластичных плёнок приводит к значительному механо-оптическому эффекту: наблюдается сдвиг пика СОС в коротковолновую область спектра, сопровождающийся яркими изменениями цвета. Установлено, что амплитуда сдвига пика зависит от скорости деформации, физико-механических свойств полимерных матриц и вязкости холестериков в каплях. Механизм отклика связан с механическим сжатием ХЖК-капель перпендикулярно направлению растяжения и уменьшением шага холестерической спирали с последующей релаксацией к первоначальным значениям после снятия нагрузки или фиксации деформации [1].

Введение хиральных фотохромных допантов в состав ХЖК-смесей позволило получить многофункциональные композиты, обладающие одновременно механо- и фотохромными свойствами. УФ-облучение даёт возможность дистанционно настраивать исходное положение пика СОС, а последующая механическая деформация вызывает дополнительный сдвиг пика. Разработан способ записи информации, в том числе скрытых (латентных) изображений, которые проявляются только под действием механического воздействия [2]. Аналогично, композиты на основе термохромных ХЖК-смесей обладают термо- и механо-чувствительностью, где контролируемое термостатирование также позволяет предварительно настраивать положение пика СОС [3].

Продемонстрирована возможность совместного введения нескольких ХЖК-смесей в единую полимерную матрицу, что позволяет проводить корректное сравнение их механо-оптического отклика и открывает перспективы для создания многоцветных механохромных материалов.

Таким образом, в ходе работы создан новый класс стимул-чувствительных полимер-диспергированных холестерических композитов, сочетающих простоту получения, высокие механические характеристики и выраженный обратимо управляемый оптический отклик на механическую деформацию, световое и тепловое воздействие. Полученные материалы перспективны для создания оптических сенсоров деформации, индикаторов напряжения и температуры, «умных» покрытий, устройств защиты от подделок и т.д.

[1] N. Balenko, V. Shibaev, A. Bobrovsky, *Polymer*, 2023, **281**, 126119. DOI: 10.1016/j.polymer.2023.126119

[2] N. Balenko, V. Shibaev, A. Bobrovsky, *J. Mol. Liq.*, 2024, **401**, 124637. DOI: 10.1016/j.molliq.2024.124637

[3] В. П. Шибаяев, С. Н. Павлов, Н. В. Баленко, *Докл. РАН. Химия, науки о материалах*. 2025, **523**, 29–41. DOI: 10.7868/S3034511125040047

Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ, А.А. КНЯЗЕВ, А.Н. БЕЗРУКОВ, А.И. ГАЛЕЕВА, К.А. РОМАНОВА
Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

ПОЛУЧЕНИЕ И АКТУАЛЬНЫЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИБРИДНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В последние годы на кафедре физической и коллоидной химии КНИТУ получили развитие несколько направлений в области ЖК сред как активных матриц в области создания мультифункциональных материалов.

Получены мезогенные координационные соединения лантаноидов(III), обладающие высокоэффективной люминесценцией и рядом технологических преимуществ по сравнению с коммерческими аналогами: фото- и термостабильность, хорошая смешиваемость с полимерами, низкая температура кристаллизации, аморфность и способность образовывать пленки. На основе гибридов комплексов Ln(III) и квантовых точек созданы высокоточные микротермосенсоры для электроники и биомедицины [1]. Исследования жидких кристаллов и люминесцентных наночастиц в микроканалах позволило предложить новые подходы к синтезу и управлению свойствами люминесцентных материалов для решения задач синтеза и химико-биологического анализа в одном микрочипе. Разработаны основы создания микротехнологических устройств с интегрированной анизотропной люминесцентной матрицей для задач микротоннажной химии и биоанализа [2,3].

При моделировании структурных, жидкокристаллических (ЖК) и фотофизических свойств комплексов лантаноидов(III) (Ln(III)), включающих различные центральные ионы Ln(III) выявлены взаимосвязи между строением, структурой и свойствами молекул, включая геометрические характеристики, параметры надмолекулярной организации, координационных полиэдров и фазовых жидкокристаллических переходов. Сравнение результатов моделирования, полученных с помощью различных подходов с доступными экспериментальными данными показало, что модели машинного обучения и графовые нейронные сети позволяют проводить оценку структуры ЖК комплексов Ln(III) с точностью *ab initio* методов. По результатам расчётов молекулярной геометрии и строения мезофаз вычислены параметры анизотропии геометрии, которые является ключевым фактором, определяющим образование ЖК мезофаз [4].

Лиотропные жидкокристаллические системы (ЛЖК) перспективны как матрицы для контролируемого высвобождения и повышения биодоступности лекарственных средств в фармацевтике и биотехнологиях. Разработка функциональных наноархитектур, включающих ионы лантаноидов, углеродные и квантовые точки, является актуальной задачей материаловедения для создания наноматериалов с улучшенными люминесцентными и магнитно-релаксационными характеристиками. Введение парамагнитных квантовых точек в системы на основе ПАВ расширяет диапазон существования мезофазы и позволяет варьировать температурный диапазон существования надмолекулярно-организованных структур на основе ПАВ в водно-деканольных средах. Предложенные биосовместимые системы демонстрируют большой потенциал, как средства трансдермальной доставки биоактивных субстанций [5].

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 от 12.01.2026 (FZSG-2026-0003).

- [1] A.A. Knyazev, R.M. Ziyatdinova, A.S. Krupin, Yu.G. Galyametdinov, *J. Alloys Compd.*, 2024, **996**, 174793.
- [2] A. Bezrukov, A. Galeeva, A. Krupin, Y. Galyametdinov, *Int. J. Mol. Sci.*, 2024, **25**(10), 5520.
- [3] A. Bezrukov, A. Galeeva, A. Krupin, Y. Galyametdinov, *Nanomaterials*, 2025, **15**(21), 1682.
- [4] К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2022, **22**(4), 6-15. DOI: 10.18083/LCAppl.2022.4.6
- [5] К.А. Глинов, А.С. Маилов, Я.В. Веремейчик, А.И. Галеева, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2024, **24**(3), 14-24. DOI:10.18083/LCAppl.2024.3.14

Н.В. КАМАНИНА^{1,2,3}, С.В. ЛИХОМАНОВА^{1,3,4}, Л.О. ФЕДОРОВА^{2,3}, А.С. ТОЙККА³, П.В. КУЖАКОВ³¹АО «НПО ГОИ им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, Россия²Санкт-Петербургский Электротехнический Университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия³НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Санкт-Петербург-Гатчина, Россия⁴Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, Россия

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕССА НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЯ НА БАЗОВЫЕ СВОЙСТВА ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ ПОЛЯРИЗАТОРОВ СВЕТА, КАК КЛЮЧЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ЖК-ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ

Среди ключевых элементов оптико-электронных приборов, особенно модуляторов света на основе жидкокристаллической (ЖК) мезофазы, немаловажную функциональную роль играют поляризаторы электромагнитного излучения, функционирующие в видимом и ближнем ИК-диапазоне. Среди неорганических объемных поляризаторов зачастую применяются призмы Глана и Николя, имеющие высокую поляризующую способность, высокую прозрачность для параллельной световой компоненты на рабочих длинах волн, стабильны в работе и обладают хорошими механическими параметрами, что важно при установке таковых объемных поляризаторов в лазерные схемы с большой плотностью воздействующей энергии излучения. Однако, в силу больших габаритов, невозможно осуществить миниатюризацию и приемлемый дизайн оптико-электронных систем, требуется развитие и применение тонкопленочных органических поляризаторов (ТОП) света. Естественно, что создание таких ТОП связано с тщательным выбором матрицы, материал которой позволяет использовать наноструктурирование для модификации поляризующей способности, механических и рефрактивных свойств. Известно, что наиболее часто используется поливиниловый спирт (ПВС) с разной молекулярной массой. Так, американский ПВС из каталога Aldrich имеет молекулярную массу ~85000-100000 а.е., ПВС российского производства марки 40/2 обладают молекулярной массой ~300000 а.е., китайский аналог ПВС марки 17-99 близок по своим характеристикам к ПВС 40/2. Выбор материала матрицы с большим молекулярным весом позволяет осуществлять растяжение пленок с большей кратностью, что приводит к росту пропускания параллельной световой компоненты ТОП, оставляя малое пропускание ортогональной составляющей.

В настоящей работе для разработки ТОП использовался ПВС марок 40/2 и 17-99. В качестве модификаторов спектральных, механических и рефрактивных свойств применялись как углеродные, так и неуглеродные наночастицы. Часть полученных результатов по соотношению пропускания параллельной T_{\parallel} и ортогональной T_{\perp} световых компонент при разной степени растяжения пленок (3,5 раза – long и ~1,7 раза – short), разном типе сенсбилизаторов (фуллерен C_{70} , углеродные нанотрубки CNT, оксид графена GO, шунгит Sh), разной концентрации сенсбилизатора (вес.% - wt.%) представлена на Рис. 1. Видно, что поляризующая способность ТОП с фуллереном C_{70} толщиной 100 микрон максимална, находится на уровне 97-99%, что сравнимо с таковым параметром для объемных призм Глана. Обнадёживающие данные получены и для ПВС с природным шунгитом. Изучение рефрактивных параметров и проведенное квантово-химическое моделирование четко показало образование новых перспективных композиционных поляризационных систем.

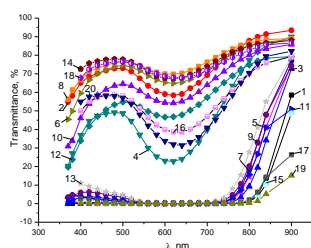


Рисунок 1 – Поляризационные компоненты ТОП:

- 1 - T_{\parallel} pure PVA, long; 2 - T_{\perp} pure PVA, long;
- 3 - T_{\parallel} pure PVA, short; 4 - T_{\perp} pure PVA, short;
- 5 - T_{\perp} PVA+0,05wt.%GO, short; 6 - T_{\parallel} PVA+0,05wt.%GO, short;
- 7 - T_{\perp} PVA+0,1wt.%GO, short; 8 - T_{\parallel} PVA+0,1wt.%GO, short;
- 9 - T_{\perp} PVA+0,15wt.%GO, short; 10 - T_{\parallel} PVA+0,15wt.%GO, short;
- 11 - T_{\perp} PVA+0,3wt.%GO, short; 12 - T_{\parallel} PVA+0,3wt.%GO, short;
- 13 - T_{\perp} PVA+0,1wt.% C_{70} , short; 14 - T_{\parallel} PVA+0,1wt.% C_{70} , short;
- 15 - T_{\perp} PVA+0,1wt.%CNT, short; 16 - T_{\parallel} PVA+0,1wt.%CNT, short;
- 17 - T_{\perp} PVA+0,1wt.%Sh, long; 18 - T_{\parallel} PVA+0,1wt.%Sh, long;
- 19 - T_{\perp} PVA+0,1wt.%Sh, short; 20 - T_{\parallel} PVA+0,1wt.%Sh, short

С.В. САВИЛОВ, Е.М. БЕНЬКО, Н.А. МАМЛЕЕВА, Н.Н. КУЗНЕЦОВА
Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

СОВРЕМЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ КОМПОНЕНТОВ ИЗ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО СЫРЬЯ

На фоне растущих потребностей российской промышленности в отечественной компонентной базе химия такого возобновляемого природного полимера как целлюлоза, а также её производных, открывает широкие перспективы для получения целого спектра веществ и материалов. Среди них – эфиры целлюлозы, масштабно применяемые в строительстве и пищевой индустрии, микро и нанокристаллическая целлюлоза для пищевой промышленности и фармацевтики, химические волокна различного типа, продукты термической обработки. Все они пригодны, в том числе, для получения и компонентов электродных масс и смесевых электролитов для новых типов устройств хранения энергии. Переработка возобновляемого сырья является актуальной и востребованной, соответствуя принципам зеленой химии. В докладе представлены результаты исследований и первичной технологической апробации в области переработки природного и вторичного сырья с выделением коммерчески востребованных продуктов – микро- и нанокристаллической целлюлозы, лигнина, простых эфиров целлюлозы, токопроводящей сажи, пористых углеродных материалов, аморфного диоксида кремния. Продемонстрированы варианты использования получаемых карбонизованных продуктов в составе электродных масс варьируемой пористости суперконденсаторов, а также литий- и натрий-ионных батарей. Оставшиеся компоненты апробированы в гель-полимерных электролитных системах, что позволяет существенно увеличить безопасность устройств, расширить температурный интервал их использования и диапазон рабочих напряжений при эксплуатации. Отмечаются преимущества рассматриваемых материалов для развития отечественной компонентной базы для проектов малотоннажной химии.

УДК 532.5, 532.6

С.В. ПАСЕЧНИК, С.С. ХАРЛАМОВ, А.А. КОНОВАЛОВА

Проблемная лаборатория молекулярной акустики, РТУ МИРЭА, Москва, Россия

ПОЛЯ И ПОВЕРХНОСТИ В РЕОЛОГИИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Представлены результаты экспериментальных и теоретических исследований реологического поведения жидкокристаллических слоев, ориентированных поверхностями, а также магнитным и электрическим полями. В экспериментах были реализованы режимы осциллирующего потока Пуазейля и затухающего капиллярного течения при различных технологиях обработки внутренних поверхностей капилляров, обеспечивающих заданный тип поверхностной (планарной, гомеотропной и гибридной) ориентации. Приведены экспериментальные данные, позволяющие определить анизотропные вязкостные параметры на основе исследований затухающих сдвиговых течений, ориентированных поверхностями жидких кристаллов.

Анализируются результаты оптических исследований поведения жидкокристаллических слоёв в осциллирующих потоках Пуазейля при наличии поверхностей и электромагнитных полей, с точки зрения возможности разработки устройств оптофлюидики и сенсорики.

Данная работа была поддержана Министерством образования и науки РФ (грант № FSSFZ-2026-0007).

Е.Г. ГЛУХОВСКОЙ¹, Т.Я. КАРАТЫШОВА¹, Н.В. УСОЛЬЦЕВА², А.И. СМИРНОВА²,
Д.В. ТКАЧЕВ¹

¹Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

²Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДОВ ФОРМИРОВАНИЯ СЛОЁВ АМФИФИЛЬНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ГРАНИЦАХ РАЗДЕЛА

Метод формирования слоёв на границах раздела газ-жидкость, развитый Ирвингом Ленгмюром и Кэтрин Блоджетт в начале 20 века, имеет богатую интересную историю. В процессе развития теоретических подходов и технических средств изучения материалов этот метод также интенсивно развивался и совершенствовался. В последнее время он постепенно трансформируется из чисто научного метода исследования систем с пониженной размерностью и объектов, имеющих наноразмерные толщины, в метод с большой перспективой реализации в прикладных областях. Сейчас открываются широкие возможности его совмещения с традиционными, хорошо известными технологическими методами микро и наноэлектроники (в частности, с планарной технологией получения полупроводниковых структур, методами нанофотоники и квантовой электроники), с методами аналитической химии, химии катализа и др.

Различные аспекты физики и химии поверхности изучаются в основном специалистами, работающими на стыках различных наук – коллоидной и физической химии, физики конденсированного состояния, нанотехнологами и материаловедами. Наиболее базовые достижения и нововведения фиксируются такими известными организациями, как IUPAC и IUPAP, и публикуются в специальных выпусках журналов и справочниках.

Однако, несмотря на значительный прогресс в науке о поверхности есть много нерешённых вопросов. Решение некоторых из них требует привлечение математических методов. В частности, наиболее очевидным является привлечение методов теории упругости, в рамках которой возможно будет объединить описание существенно отличающихся состояний – различных фаз истинного монослоя (когда он находится в разреженном состоянии двумерного газа или в конденсированных состояниях – жидком, в виде 2D-кристалла) с состоянием коллапса (когда происходит довольно сильная трансформация слоя, сопровождающаяся зарождением в однородном квази-2D-слое сложных 3D-объектов). Сейчас такие процессы, определяемые как коллапс, считаются малоинформативными. Однако с помощью математики (например, с привлечением теории упругости) можно будет развить новые методики, которые позволили бы получить дополнительную информацию при таких переходах. Вполне закономерным следствием этого будет развитие существующих и появление новой технической инструментальной базы для изучения монослоев.

Как показывает анализ публикационной активности по вопросам, связанным с ЛБ тематикой, интерес к данной области знаний динамично растёт. Основные причины этого – стремительное расширение номенклатуры веществ, обладающих новыми свойствами, и усложнение объекта исследования. Помимо этого, постоянно совершенствуется и становится более доступным новое сложное исследовательское и технологическое оборудование. Всё это приводит к углублению понимания процессов, протекающих на поверхности жидкости, развитию новых подходов, к расширению возможностей метода Ленгмюра.

Представленный материал сопровождается примерами, демонстрирующими наиболее передовые научные и прикладные достижения в развитии данного метода.

Работа поддержана грантом Минобрнауки РФ FZZM-2026-0004.

ФРАКТАЛЫ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ НЕМАТИКАХ

Особый интерес представляет возникновение фракталов [1] в каплях сегнетоэлектрических нематиков под воздействием переменного электрического поля. Показано, что специфическая вогнутая форма фрактальных ветвей обусловлена избытком флексоэлектрической поляризации [2,3] на границе раздела ЖК/воздух. Приложение переменного напряжения вызывает электросмачивание вдоль краев электродов.

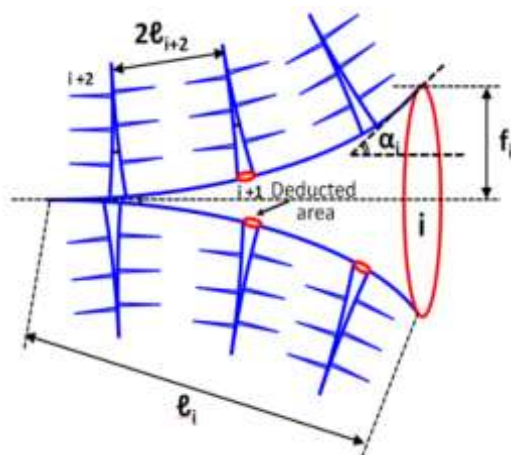


Рисунок 1

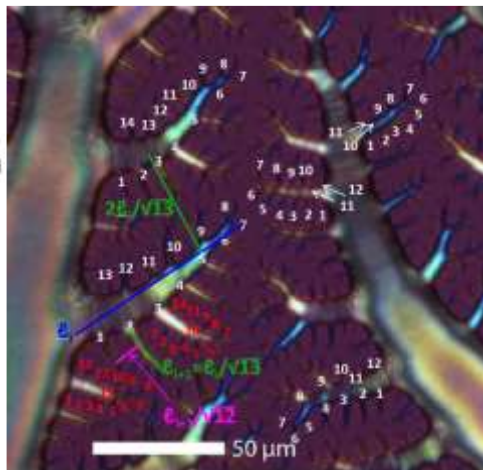


Рисунок 2

Рассматривается модель фрактала (Рис. 1). Найдена размерность фрактала $D \approx 5/3 \approx 1.67$. Если определить отношение углов раскрытия клина на последовательных ветвях $q \equiv \alpha_i + 1/\alpha_i$, то число ветвей $i+1$ на ветви i равно $n = 1/q^2$, что подтверждено экспериментально (Рис. 2). Значения q и n были найдены как функции приложенного напряжения путем минимизации свободной энергии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 25-23-01078, <https://rscf.ru/project/25-23-01078/>. Автор благодарит Программу развития МГУ за предоставление оборудования.

[1] M.T. Máthé, et al., *Sci. Rep.*, 2023, **13**, 6981.

[2] A.V. Emelyanenko, et al., *Phys. Rev. E*, 2024, **109**, 014701.

[3] F. Ye, et al., *Small*, 2026, **22**, e12407.

E.S. PIKINA^{1,2}, A.R. MURATOV², E.I. KATS¹, V.V. LEBEDEV^{1,3}¹Landau Institute for Theoretical Physics, RAS, Chernogolovka, Russia²Institute for Oil and Gas Research, RAS, Moscow, Russia³NRU Higher School of Economics, Moscow, Russia

PATTERN FORMATION IN NONLINEAR DYNAMICS OF NEMATIC LIQUID CRYSTALS ABOVE THE FLEXOELECTRIC INSTABILITY THRESHOLD

Let remember that for many decades, the various types of electro-hydrodynamic instabilities in liquid crystals have been studied all over the world. A significant amount of experimental data has been collected, however, the theoretical interpretations of the results typically rely on linear analysis. It is for this reason we investigate the nonlinear stage of the flexoelectric instability in nematics, focusing on liquid crystals with a negative anisotropy in their dielectric permittivity and electrical conductivity. We base our analysis on a comprehensive set of nonlinear electro-hydrodynamic equations for these nematics influenced by an external alternating electric field. The equations predict an instability that is driven by the flexoelectric effect. In order to examine the peculiarities of this phenomenon, we use a model that was proposed in our previous publications, [1,2], which allows us to perform numerical simulation of nonlinear dynamics. We examine patterns that are formed above the instability threshold. Through numerical simulations, we have identified static and dynamic patterns that occur over a timescale that is much longer than the period of the external electric field. The static patterns are one-dimensional structures and dynamic patterns are standing or traveling one-dimensional waves. The type of the realized pattern depends on the material and experimentally controlled parameters. In the frame of two-dimensional numerical simulations of the complete system of nonlinear equations of nematics in the external alternating electric field [1] we found that the traveling waves are unstable with respect to two dimensional perturbations of the fields. On the contrary, the standing waves remain stable under small two-dimensional perturbations. Let stress that the conclusions are based on the results of the simulations for a certain set of parameters. It is possible the corrections for other parameters sets.

We present a Ginzburg-Landau-like phenomenology that applies near the instability threshold. This approach allows us to rationalize our numerical findings with a few parameters.

The presentation is supported by the Russian Science Foundation (Grant No. 23-72-30006).

[1] E.S. Pikina, A.R. Muratov, E.I. Kats, V.V. Lebedev, *ZhETF*, 2023, **164**, 129-142. DOI: 10.31857/S004445102307012X

[2] E.S. Pikina, A.R. Muratov, E.I. Kats, V.V. Lebedev, *Phys. Rev. E*, 2024, **110**, 024701-1-024701-20. DOI: 10.1103/PhysRevE.110.024701

V.G. CHIGRINOV^{1,2,3,4}

¹Hong Kong University of Science and Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong

²Nanjing Jingcui Optical Technology Co., LTD, Nanjing, China

³Yaroslav-the-Wise Novgorod State University, Verlikiy Novgorod, Russia

⁴Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, Russia

PHOTOALIGNED AZODYE NANOLAYERS: NEW TRENDS FOR LIQUID CRYSTAL DEVICES

Photoalignment and photopatterning has been proposed and studied for a long time [1]. Light is responsible for the delivery of energy as well as phase and polarization information to materials systems. It was shown that photoalignment liquid crystals by azodye nanolayers could provide high quality alignment of molecules in a liquid crystal (LC) cell. Over the past years, a lot of improvements and variations of the photoalignment and photopatterning technology has been made for photonics applications. In particular, the application of this technology to active optical elements in optical signal processing and communications is currently a hot topic in photonics research [2]. Sensors of external electric field, pressure and water and air velocity based on liquid crystal photonics devices can be very helpful for the indicators of the climate change.

We will demonstrate a physical model of photoalignment and photopatterning based on rotational diffusion in solid azodye nanolayers. We will also highlight the new applications of photoalignment and photopatterning in display and photonics such as: (i) fast high resolution LC display devices, such as field sequential color ferroelectric LCD; (ii) LC sensors; (iii) LC lenses; (iv) LC E-paper devices, including electrically and optically rewritable LC E-paper; (v) photo induced semiconductor quantum rods alignment for new LC display applications; (vi) 100% polarizers based on photoalignment; (vii) LC smart windows based on photopatterned diffraction structures; (viii) LC antenna elements with a voltage controllable frequency.

[1] V.G. Chigrinov, V.M. Kozenkov, H.S. Kwok, Photoalignment of liquid crystalline materials, Wiley, 2008.

[2] V.G. Chigrinov, Liquid Crystal Photonics, Nova Science Publishers, 2015.

СЕКЦИОННЫЕ ДОКЛАДЫ

Р.Ф. БАКЕЕВА¹, Р.И. НАЗАРОВА¹, Э.М. КОСАЧЕВА², С.Ю. ГАРМОНОВ¹¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия²Казанский кооперативный институт (филиал) автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования центрального союза Российской Федерации «Российский университет кооперации», Казань, Россия

ПОЛИМЕР КОЛЛОИДНАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ *n*-ДЕЦИЛПИРИДИНИЙ ХЛОРИДА И ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА ДЛЯ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФУАЗИДИНА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТАХ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ОТКЛИКА И ПЛАНОВ БОКСА-БЕНКЕНА

Контроль качества нитрофуранов обеспечивает эффективность и безопасность лекарственных препаратов на их основе. Как правило, нитрофураны трудно растворимы в воде и для их анализа используют среды, содержащие токсичные органические растворители. Актуальным трендом повышения экологичности и эффективности фармацевтического анализа является использование мицеллярных сред. При этом весьма интересным представляется применение систем ПАВ – полимер, в которых солюбилизационный эффект мицелл дополняется возможностью образования комплексов, как внутри-, так и межмолекулярных. Фуразидин, одно из производных нитрофуранов, активен в отношении грамположительных кокков: *Staphylococcus spp.*, *Streptococcus spp.*; грамотрицательных палочек: *Escherichia coli*, *Salmonella spp.*, *Shigella spp.*, *Klebsiella spp.* и применяется для лечения острого цистита, уретрита, пиелонефрита и т.д. Нами показана возможность применения системы полиэтиленимин, PEI + *n*-децилпиридиний хлорид (nDPC) + HCl + H₂O для количественного определения фуразидина спектрофотометрическим методом с использованием методологии поверхности отклика, MRS и трехуровневых планов Бокса-Бенкена, ВВР (Рис. 1).

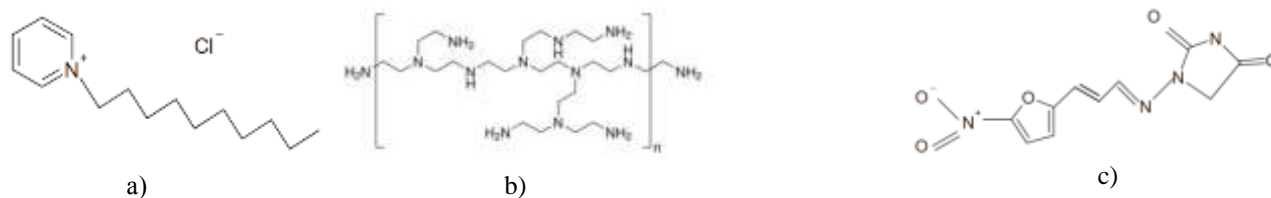


Рисунок 1 – Структурные формулы *n*-децилпиридиний хлорида (а), полиэтиленимина (б), фуразидина (с)

Целевой функцией выбрана интенсивность полосы поглощения, ПП при 395 нм, A_{395} . В качестве независимых переменных (факторов) использованы: концентрация PEI, C_{PEI} , X_1 ; концентрация *n*-децилпиридиний хлорида, C_{nDPC} , X_2 и кислотность среды, pH. Составлен план ВВР, определена математическая модель:

$$Y = A_{395} = 0,950 - 0,105X_1 + 0,100 X_1 (X_2)^2 - 0,060 (X_1)^2 X_2 + 0,055000X_2 - 0,042 (X_2)^2 - 0,042(X_1)^2 - 0,020 X_2X_3 - 0,010 (X_2)^2 X_3 + 0,010 X_1X_2 - 0,005 X_3 - 0,002 (X_3)^2,$$

где 0,950 является свободным членом; значения с индексом X_n – регрессионный коэффициент линейных (главных) факторных эффектов; X_n^2 – регрессионный коэффициент квадратичных (нелинейных) факторных эффектов; значения с индексом X_nX_m – регрессионный коэффициент эффектов взаимодействия $X_1 - C_{PEI}$; $X_2 - C_{nDPC}$, $X_3 - pH$, R^2 0,999.

Установлена оптимальная аналитическая композиция: $C_{PEI} = 0,02$ моль/л, $C_{nDPC} = 0,01$ моль/л, pH 2, которая использована для спектрофотометрического определения фуразидина в лекарственных препаратах на основе градуировочной зависимости: $A_{395} = (0,019 \pm 0,035) + (9,312 \pm 0,048) C_{FZ}$ (мг/мл), R^2 0,992. Коэффициент молярного поглощения: $\epsilon = (24602 \pm 1610)$ л·моль⁻¹·см⁻¹, R^2 0,992 имеет достаточно высокое значение для обеспечения хорошей чувствительности определений. Разработанный подход использован для селективного анализа готовых лекарственных средств.

С.Д. БУГАКОВ^{1,2}, Я.И. ДЕРИКОВ¹, О.Н. КАРПОВ¹, А.А. ЕЖОВ^{1,2}, Р.В. ТАЛЬРОЗЕ

¹Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

ФОТОИНДУЦИРОВАННОЕ УПРАВЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В НЕМАТИЧЕСКОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ

Все больший интерес вызывают подходы к управлению пространственной организацией наночастиц (НЧ) в жидкокристаллических (ЖК) матрицах, поскольку они открывают путь к созданию функциональных структур с заданной геометрией и локальными оптическими свойствами. Одним из перспективных методов управления перехода ЖК в изотропную фазу является использование fotocувствительных компонентов, таких как азохромофоров (АХ), которые при облучении светом меняют свою конформацию из транс- в цис-, что приводит к нарушению ориентационного порядка ЖК и переводу в изотропное состояние.

В качестве ЖК матрицы использована смесь, состоящая из пяти различных компонентов, преимущественно из цианобифенильных молекул, с температурой изотропизации 64,7 °С. Для фотоиндуцированного управления переходом ЖК матрицы при температуре ниже температуры изотропизации в качестве добавки использовались два азохромофора 4-(4-изоцианофенил)дiazенил)фенил 4-(гексилокси)бензоат (АХ-1) и октил 5-((4-цианофенил)дiazенил)-2-(октилокси)бензоат (АХ-2) различного строения. В случае добавления 10 мас. % АХ-1 происходит увеличение температуры изотропизации смеси до 82,6 °С, а случае АХ-2 – уменьшение до 59,2 °С. Данные изменения обусловлены разницей в строении молекул АХ и, как следствие, различным сродством с ЖК матрицей.

В работе проведён синтез полупроводниковых квантовых точек CdSe/ZnS (КТ) градиентного состава одностадийным высокотемпературным методом, со средним диаметром 5 нм. Непосредственно после синтеза КТ стабилизированы преимущественно олеиновой кислотой и не совместимы с ЖК матрицей. Для обеспечения равномерного распределения НЧ в изотропной фазе проводили замещение органического стабилизатора, на поверхности частиц терфенильными молекулами.

Для управления распределением НЧ в ЖК матрице с помощью облучения светом были сделаны смеси жидкокристаллической матрицы, содержащие 10 мас. % азохромофора и квантовые точки с концентрацией до 0,5 мас. %. Анализ полученных систем методом люминесцентной микроскопии показал, что при облучении ультрафиолетом ниже температуры изотропизации ($\Delta T = 10$ °С) происходит переход в изотропное состояние с равномерным распределением квантовых точек в зоне облучения. При прекращении УФ облучения происходит переход матрицы обратно в ЖК с вытеснением НЧ в отдельные агрегаты. При этом размеры агрегатов в зависимости от условий различны. При перемещении области облучения с определённой скоростью происходит накопление КТ в изотропной фазе, что позволяет перемещать НЧ. Таким образом удаётся перераспределять КТ в объёме за счет облучения светом.

Работа выполнена в рамках Госзадания ИИХС РАН.

А.А. БУДАНОВА, И.В. НОВИКОВ, В.В. АЛЕКСАНДРИЙСКИЙ, В.А. БУРМИСТРОВ
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

ХИРАЛЬНАЯ ИНДУКЦИЯ СПИРАЛИ В СМЕСЯХ АЛКОКСИЦИАНОБИФЕНИЛОВ С НИКЕЛЕВЫМ КОМПЛЕКСОМ КАМФОРОЗАМЕЩЕННОГО ТЕТРАПИРАЗИНОПОРФИРАЗИНА

Индукция спирали в нематических жидких кристаллах может происходить вследствие процесса хирогенеза – самоорганизации изначально ахиральных соединений. Перспективным для использования является никелевый комплекс камфорозамещенного пиразинопорфирина Ni(-)TCPyzPz, обладающий конфигурационной хиральностью. Перенос хиральности с добавки на жидкий кристалл обсуждается с использованием квантово-химических расчетов и спектроскопии кругового дихроизма [1]. Возникающие супрамолекулярные эффекты подтверждают возможность использования данных систем при создании электрооптических устройств.

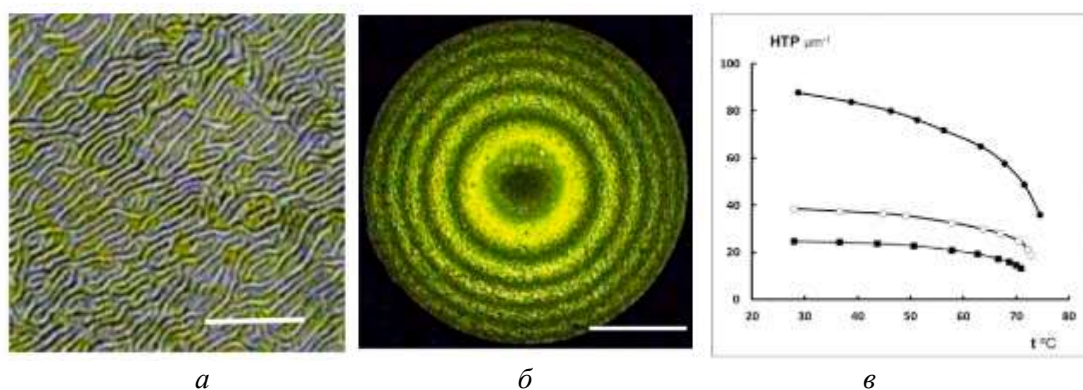


Рисунок 1 – а) Раствор Ni(-)TCPyzPz в СВ-2: текстура отпечатков пальцев 2,12 мас. % при 67,8 °С, б) интерференционные кольца Ньютона из 2,12 мас. % при 28,5 °С, в) температурные зависимости НТР (-●- 1,0 мас. %; -○- 2,1 мас. %; -■- 3,5 мас. %)

Методом термомикроскопии установлено образование текстуры отпечатков пальцев (Рис. 1а), что подтверждает наличие хиральной нематической фазы. По методу Гранджана-Кано получены кольца Ньютона (Рис. 1б), по которым рассчитаны шаг спирали и энергия скручивания НТР (Рис. 1в). Введение допанта дестабилизирует мезофазу и снижает температуры фазового перехода нематик – изотроп. Увеличение концентрации допанта приводит к снижению силы скручивания и объясняется образованием менее оптически активных ассоциатов.

В работе было выявлено влияние ассоциации макромолекул на хиральность в растворах Ni(-)TCPyzPz и CHCl₃ ($2,1 \times 10^{-4}$ моль/л, $g = -4,6 \times 10^{-5}$) и Ni(-)TCPyzPz и СВ-2 (0,38 мас. %, $g = 6,8 \times 10^{-3}$), что подтверждается расчетом g-фактора диссимметрии из спектров кругового дихроизма. Значение g-фактора диссимметрии в жидком кристалле в 147 раз больше, чем в слабополярном растворителе, что характеризует увеличение хиральности в анизотропной среде [1].

Работа выполнена в рамках гос. задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№FZZW-2026-0003).

[1] V.A. Burmistrov, I.V. Novikov, V.V. Aleksandriiskii, A.A. Budanova, A.S. Semeikin, *J. Mol. Liq.*, 2026, **445**, 129193. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.129193>

М.М. БУЗЬКО¹, Е.В. СУСЛОВА², Д.А. ШАШУРИН^{1,3}, О.С. МЕДВЕДЕВ¹

¹Медицинский научно-образовательный институт, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²Химический факультет МГУ, им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Институт экспериментальной кардиологии НИИЦК им. акад. Е.И. Чазова, Москва, Россия

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ Pd/SiO₂ ДЛЯ БИМЕДИЦИНСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Молекулярный водород используют в качестве терапевтического средства, обладающего противовоспалительными и антиоксидантными свойствами [1]. Наиболее распространенным способом применения водорода при респираторных заболеваниях являются ингаляции смесью 2-4 % водорода с воздухом. Ограничением водородной ингаляционной терапии является быстрое выведение H₂ из организма. Одним из решений представленной задачи является создание препаратов, обеспечивающих постепенное высвобождение водорода в нижних дыхательных путях без проникновения в системный кровоток.

В настоящей работе предложено получать гидриды Pd в составе композитных наночастиц Pd/SiO₂, учитывая, что SiO₂ является биосовместимым материалом. Композиты Pd/SiO₂ получали двумя методами – пропиткой SiO₂ раствором PdCl₂ и совместным соосаждением SiO₂ и Pd²⁺ из тетраэтоксисилана и раствора PdCl₂ с последующим восстановлением Pd в токе H₂ и пассивацией смесью воздуха в N₂. Мезопористый SiO₂ получали из эмульсий [2] или методом Штобера [3]. Полученные SiO₂ и композиты Pd/SiO₂ охарактеризованы методами просвечивающей, сканирующей электронной микроскопии, ИК-, рентгено-фотоэлектронной спектроскопии. Количество водорода и кинетику его десорбции из структур Pd/SiO₂ оценивали по каталитическому восстановлению метиленового синего [4].

Предложенная каталитическая стратегия, вероятно, откроет новые возможности для лечения воспалительных респираторных заболеваний.

Работа поддержана Российским научным фондом, проект 22-15-00072-П.

[1] D. Zajac, M. Jampolska, P. Wojciechowski, *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, **26**(9), 4116. DOI: 10.3390/ijms26094116

[2] K. Althumayri, A. Guesmi, et al., *ACS Omega*, 2023, **8**(15), 14144-14159. DOI: 10.1021/acsomega.3c00829

[3] В.М. Масалов, Н.С. Сухина, Г.А. Емельченко, *Физика тв. тела*, 2011, **53**(6), 1072-1076.

[4] N.S. Alkayal, M. Ibrahim, N. Tashkandi, M.M. Alotaibi, *Materials*, 2023, **16**(17), 5887. DOI: 10.3390/ma16175887

Т.В. ВДОВЫЙ¹, Е.В. СУСЛОВА¹, Д.А. ШАШУРИН^{2,3}, Г.А. ШЕЛКОВ^{1,4}

¹Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

²Медицинский научно-образовательный институт МГУ им. М.В. Ломоносова

³Институт экспериментальной кардиологии НМИЦК им. акад. Е.И. Чазова

⁴Объединенный институт ядерных исследований

РАЗРАБОТКА НОВЫХ ЙОДСОДЕРЖАЩИХ КОНТРАСТНЫХ АГЕНТОВ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ

Йодсодержащие молекулы – эффективные контрастные агенты (КА) для метода компьютерной томографии (КТ). Известно, что метиленовый синий (МС) селективно накапливается в клетках меланомы и используется для диагностики при поражении лимфатических узлов и кожных покровов. Для использования МС для диагностики костной меланомы необходимо вводить в состав МС тяжелые атомы йода, которые обеспечат молекуле МС необходимые рентгено-контрастные свойства для последующего детектирования методом КТ. Цель представленной работы – получение йодированного МС и оценка минимальной детектируемой концентрации методом КТ.

Для синтеза йодированного МС опробованы два подхода, заключающиеся в 1) реакции МС со смесью KIO_3 / KI в кислой среде; 2) механохимической активации смеси МС с I_2 и $AgNO_3$ в присутствии протонных кислот. Второй способ может рассматриваться как более перспективный, учитывая больший выход целевого продукта.

Рентгено-контрастные характеристики йодированного МС определяли с помощью фантомных исследований. Для этого готовили серию растворов йодированного МС и определяли коэффициенты поглощения рентгеновского излучения. Минимально определяемая концентрация йода составила 3 мг/мл.

Работа поддержана Российским научным фондом, проект 22-15-00072-П.

А.Н. ГЛУШКО¹, А.М. БЕССАРАБОВ², Е.А. ХОЛОДОВА³, Е.М. ПРИОРОВА³

¹НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ, Москва, Россия

²АО Научный центр «Малотоннажная химия», Москва, Россия

³ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева»

СИСТЕМНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ПРОТИВООБЛЕДЕНИТЕЛЬНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ДЛЯ АВИАЦИИ

При системном подходе к оценке противобледенительных жидкостей (ПОЖ) они рассматриваются как объект управления качеством в системе обеспечения безопасного взлёта и эксплуатации воздушного судна [1]. Понятие «качество ПОЖ» включает совокупность эксплуатационных, экономических и экологических характеристик, формируемых на различных этапах жизненного цикла продукции. Особое внимание среди этих характеристик уделяется анализу температуры кристаллизации, так как данный параметр является критическим для эксплуатации ПОЖ в условиях аэродромов. Для повышения эффективности оценки качества ПОЖ на основе концепции CALS (Continuous Acquisition and Life cycle Support) [2] была разработана автоматизированная система.

Информационная архитектура CALS-системы по показателю «температура кристаллизации» структурируется на 5 уровнях иерархии. На 1-м уровне приведены основные фирмы–производители противобледенительных жидкостей: «Kilfrost Ltd.»: Великобритания; «Clariant AG»: Швейцария; «ТЕХНОФОРМ»: Россия; «РХЗ НОРДИКС»: Россия; «СИМЕКС-ХИМ»: Россия; «ХимАвангард»: Россия. Данный уровень формирует базовую структуру для последующего сравнительного анализа продукции различных производителей. На 2-м уровне иерархии приведены основные ПОЖ, выпускаемые указанными предприятиями. На 3-м уровне иерархии приведены основные показатели качества противобледенительных жидкостей: «Вязкость»; «Температура кристаллизации»; «Пенообразование»; «Водородный показатель»; «Поверхностное натяжение». На 4-м уровне иерархии приведены методы анализа показателя «температура кристаллизации»: метод Баумана–Фрома; метод Жукова; рефрактометрический метод; криоскопический метод. На 5-м уровне иерархии приведены аналитические приборы, реализующие рефрактометрические методы анализа: «HI96831: Hanna Instruments, Германия»; «Master-BR: Atago Co., Ltd., Япония»; «PAL-91S: Atago Co., Ltd., Япония».

Рефрактометрический метод основан на зависимости показателя преломления раствора от концентрации гликоля. После калибровки шкалы по эталонным растворам измеряют показатель преломления, определяют концентрацию и по градуировочной зависимости - температуру кристаллизации. Для определения способности противобледенительных жидкостей сохранять текучесть при отрицательных температурах используется прибор HI96831 (Hanna Instruments). Результаты автоматически фиксируются и могут быть интегрированы в CALS-систему для анализа и формирования рекомендаций по выбору соответствующих ПОЖ.

Реализация CALS-систем, связанных с важнейшими показателями позволила структурировать процесс аналитического контроля, обеспечить сопоставимость результатов и повысить объективность оценки качества продукции различных производителей. Дальнейшее развитие предусматривает внедрение алгоритмов экспертного анализа, позволяющих оперативно корректировать технологию производства в случае выявления отставания показателей качества.

[1] О.С. Долгов, Б.Б. Сафоклов, *Качество и жизнь*, 2020, 3(27), 84-91. DOI: 10.34214/2312-5209-2020-27-3-84-91

[2] А.Н. Глушко, Е.Д. Зырянова, А.М. Бессарабов. Системный анализ и информационные технологии. Материалы дорожной химии: противогололедные реагенты, дорожные и гидрофобизирующие пропитки. – М.: Изд-во «Спутник+», 2025, 210 с.

Д.М. ГОЛУБЕВА, А.А. НАБАСОВ, Н.Е. ГАЛАНИН
Ивановский государственный химико-технологический университет

5,6-ДИФЕНОКСИ-1,3-БИС(ХИНОЛИН-2-ИЛМЕТИЛЕН)ИЗОИНДОЛИНА И ЕГО БОРДИФТОРИДНЫЙ КОМПЛЕКС. СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНО- ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА

Комплексы бора несимметричного строения значительно отличаются по своим фотофизическим характеристикам от классических BODIPY: от них можно ожидать больших Стоксовых сдвигов в связи с различием в структуре между основным и возбужденным состояниями. Наряду с этим, такие соединения могут обладать интенсивной флуоресценцией в твердом слое, что делает перспективным использование таких комплексов в тонкопленочной электронике [1-3]. Однако, синтезы этих соединений связаны с использованием дорогостоящих реагентов и зачастую многостадийны.

В настоящей работе взаимодействием 4,5-дифеноксифталимида с хиналидином синтезирован 5,6-дифенокси-1,3-бис(хинолин-2-илметилден)изоиндолин (**1**), а также получен бордифторидный комплекс (**2**) на его основе. Методика получения отличается своей технологичностью и не требует применения дорогостоящих соединений.

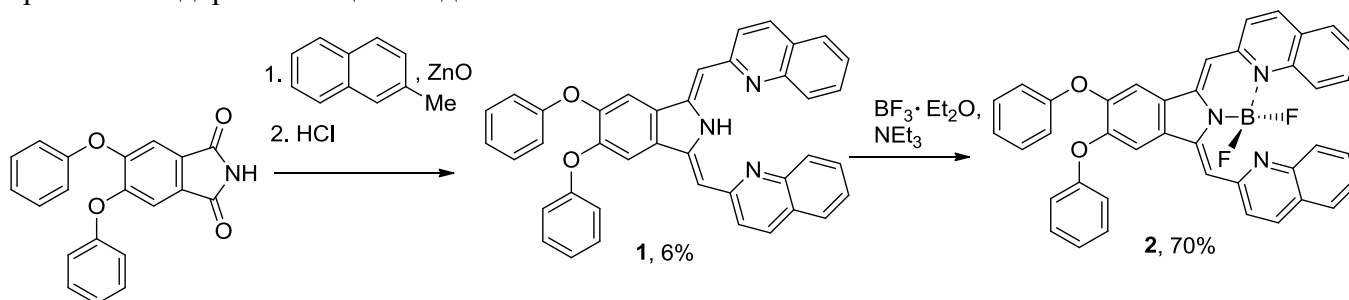


Рисунок 1 – Схема синтеза 5,6-дифенокси-1,3-бис(хинолин-2-илметилден)изоиндолина (**1**) и его бордифторидного комплекса (**2**)

Расширенные π -системы соединений **1** и **2** характеризуются поглощением в областях 513-480 нм и 554-515 нм соответственно. Спектр флуоресценции соединения **1** в дихлорметане содержит полосы при 560 и 526 нм. Стоксов сдвиг для него составляет 47 нм. Спектр флуоресценции комплекса **2** характеризуется полосами при 565 и 526 нм. Стоксов сдвиг, соответственно, уменьшается до 11 нм. Комплекс **2** отличается высоким значением квантового выхода флуоресценции измеренным относительно родамина 6G в качестве стандарта ($\Phi_F = 0.95$ в EtOH). Проанализировав спектры флуоресценции соединений **1** и **2**, измеренные в различных растворителях, можно заключить, что с ростом полярности растворителей наблюдается гипсохромный сдвиг полос эмиссии и уменьшение их интенсивности, таким образом, соединения обладают отрицательным сольватохромизмом.

Примечательно, что соединения **1** и **2** обладают флуоресценцией в твердом слое. Этот факт делает их перспективными образцами для дальнейших исследований в качестве материалов для изготовления OLED.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР (тема № FZZW-2024-0004).

[1] P. Bukowska, J. Piechowska, R. Loska, *Dyes Pigment.*, 2017, **137**, 312–321. DOI: 10.1016/j.dyepig.2016.11.009

[2] H. Liu, H. Lu, Z. Zhou, S. Shimizu, Z. Li, N. Kobayashi, Z. Shen, *Chem. Commun.*, 2015, **51**, 1713. DOI: 10.1039/C4CC06704E

[3] Y. Wu, H. Lu, S. Wang, Z. Li, Z. Shen. *J. Mater. Chem. C*, 2015, **3**, 12281-12289. DOI: 10.1039/c5tc03084f

Н.А. СПИРИДЕНКО¹, П.В. ДОЛГАНОВ^{1,2}, В.К. ДОЛГАНОВ¹¹Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия²Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва, Россия

НЕСТАБИЛЬНОСТЬ РЭЛЕЯ-ПЛАТО В ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Нестабильность Рэлея-Плато – хорошо известное явление в физике жидкостей [1,2]. Нестабильность связана с поверхностным натяжением и приводит к разрыву струй или тонких прослоек жидкости с образованием капель. Нами проведены исследования неустойчивости Рэлея-Плато в жидких кристаллах. Изучена неустойчивость прослоек жидкого кристалла в окружении изотропной жидкости и прослоек жидкости в окружении жидкого кристалла [3-5]. Исследования проведены с использованием высокоразрешающей оптической микроскопии и высокоскоростной регистрации (скорость съёмки до 1000 кадров в секунду). Наблюдения в поляризованном свете позволяют охарактеризовать структуру прослойки в процессе развития неустойчивости [3,4].

Обнаружено, что неустойчивость в жидких кристаллах имеет ряд особенностей по сравнению с изотропными жидкостями. Вызванный неустойчивостью разрыв прослоек изотропной жидкости в окружении нематического жидкого кристалла сопровождается образованием топологических дефектов на поверхности капель [5]. Образование топологических дефектов связано с требованиями теоремы Пуанкаре-Хопфа и граничными условиями для директора жидкого кристалла на межфазной границе нематик – изотропная жидкость. Изучена динамика утоньшения прослоек на этапе, предшествующем разрыву. Найдены условия возникновения неустойчивости и каскадного образования сателлитных капель в ячейках с различными граничными условиями. Исследованы особенности развития неустойчивости в холестериках в широком диапазоне шага холестерической спирали (0.4 – 4 мкм). В нематике и в холестерике с большим шагом спирали скорость утоньшения прослоек перед их разрывом близки. В холестерике с малым шагом спирали скорость оказывается в несколько раз меньше. Тенденция к образованию сателлитных капель при разрыве уменьшается с уменьшением шага спирали холестерика [6].

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

[1] J.P. Plateau, *Statique Expérimentale et Théoretique des Liquides Soumis aux Seules Forces Moléculaires*, Gautethier-Villars, Paris, 1873.

[2] W.S. Rayleigh, *Proc. London Math. Soc.*, 1878, **10**, 4–13.

[3] P.V. Dolganov, A.S. Zverev, K.D. Baklanova, V.K. Dolganov, *Phys. Rev. E*, 2021, **104**, 014702, DOI: 10.1103/PhysRevE.104.014702

[4] P.V. Dolganov, A.S. Zverev, K.D. Baklanova, V.K. Dolganov, *Soft Matter.*, 2022, **18**, 126-136. DOI: 10.1039/d1sm01334c

[5] П.В. Долганов, Н.А. Спириденко, В.К. Долганов, Е.И. Кац, К.Д. Бакланова, *Письма в ЖЭТФ*, 2023, **118**(2), 118-124. DOI: 10.31857/S1234567823140094

[6] P.V. Dolganov, K.D. Baklanova, *Liq. Cryst.*, 2024, **51**, 57-64. DOI: 10.1080/02678292.2023.2275291

П.В. ДОЛГАНОВ, Е.А. МАКСИМОВ, Н.А. СПИРИДЕНКО

Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия

МНОГОУРОВНЕВЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ. ФОРМИРОВАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ, ДВУМЕРНЫХ И ОДНОМЕРНЫХ УПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР ИЗ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ

Наиболее сложные в функциональном отношении материалы имеют многоуровневую структуру. Среди жидких кристаллов одним из примеров образования объектов с многоуровневым упорядочением является возникновение на первом этапе ориентационного упорядочения молекул, а на следующем этапе формирование более высокоуровневых объектов, например, смектических слоёв, на основе которых в дальнейшем происходит образование таких сложных структур как сегнетоэлектрические, антисегнетоэлектрические, сегнетиэлектрические фазы.

В докладе речь будет идти об образовании многоуровневого упорядочения из топологических дефектов. Доклад будет основан как на опубликованных работах, так и на недавно полученных результатах. Рассматриваются одномерные, двумерные и трехмерные структуры. Трехмерными структурами, образованными упорядоченными топологическими дефектами, являются кристаллические жидкости или Голубые фазы. Их исследования активно проводятся в нашей стране, начиная с пионерских теоретических работ Бразовского и Дмитриева [1], Белякова, Дмитриенко [2] и экспериментальных работ, в том числе выполненных в ИФТТ РАН [3,4]. Двумерное упорядочение топологических дефектов может приводить к образованию уникальной двумерной структуры, предсказанной теоретически [5] и обнаруженной нами экспериментально в полярных свободно подвешенных смектических плёнках [6]. Описываются полученные нами одномерные структуры цепочечного типа из точечных топологических дефектов [7]. Концевые эффекты были устранены замыканием цепочки в кольцо. Показано, что цепочки образованы чередующимися топологическими дефектами с топологическими зарядами +1 и -1. Изучено коллективное поведение дефектов, динамика изменения числа дефектов, связанная с аннигиляцией дефектов с топологическими зарядами противоположного знака. Наблюдаемая динамика кардинально отличается от исследовавшейся ранее экспериментально и теоретически динамики двумерных структур из частиц и античастиц [8].

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

[1] С.А. Бразовский, С.Г. Дмитриев, *ЖЭТФ*, 1975, **69**, 979.

[2] В.А. Беляков, В.Е. Дмитриенко, *УФН*, 1985, **146**(3), 369.

[3] В.А. Беляков, Е.И. Демихов, В.Е. Дмитриенко, В.К. Долганов, *ЖЭТФ*, 1985, **89**(6), 2035-2051.

[4] Е.И. Демихов, В.К. Долганов, С.П. Крылова, *Письма в ЖЭТФ*, 1985, **42**(1), 15-17.

[5] R.D. Kamien, J.V. Selinger, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2001, **13**(3), R1-R22. DOI: 10.1088/0953-8984/13/3/201

[6] P.V. Dolganov, N.S. Shuravin, Atsuo Fukuda, *Phys. Rev. E*, 2006, **93**(3), 032704. DOI: 10.1103/PhysRevE.93.032704

[7] P.V. Dolganov, N.A. Spiridenko, V.K. Dolganov, *Phys. Rev. E*, 2024, **110**(2), 024703. DOI: 10.1103/PhysRevE.110.024703

[8] R.A. Chowdhury, A.A.S. Green, C.S. Park, J.E. Maclennan, N.A. Clark, *Phys. Rev. E*, 2023, **107**(4), 044701. DOI: 10.1103/PhysRevE.114.044701

И.С. ГЕРЦЕЛЬ, Г.М. ЖАРКОВА

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОПИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ХОЛЕСТЕРИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ К МЕХАНИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В последнее время для измерения механической деформации активно развиваются методы, основанные на использовании механо-чувствительных холестерических жидких кристаллов (ХЖК), в частности, зависимости их оптических свойств от деформации. Практическое использование ХЖК в различных областях науки и техники сдерживается зависимостью их оптических свойств не только от деформации, но и от температуры. Поэтому разработка новых составов, не чувствительных к температуре, но чувствительных к механическому воздействию является актуальной. На основе эфиров холестерина разработаны составы (малочувствительные к температуре), исследованы их спектры отражения и измерены коэффициенты трения. Чувствительность ХЖК к деформации обусловлена особенностями их надмолекулярной структуры. Одним из путей глубокой модификации структуры ХЖК смесей является допирование их добавками как жидкокристаллического, так и немезоморфного характера [1,2]. Дополнительные требования к добавкам: они не должны кардинально изменять температурную чувствительность и спектр отражения исследуемой матрицы. Исследовано влияние следующих добавок: НЖК (ЖК-1289), холестерин, окисленные нанотрубки (ОУНТ), наночастицы Y_2O_3 . Степень влияния добавок на свойства разработанных составов оценивалась по изменению шага спирали ХЖК и величине коэффициента трения.

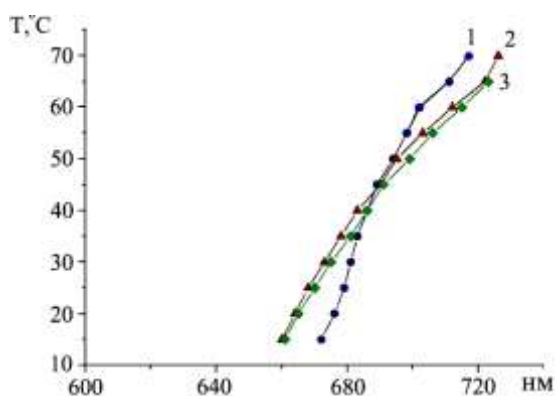


Рисунок 1 – Температурная зависимость длины волны селективного отражения смесями ХЖК: 1 – смесь А (нонаноат 50, валерат 50)хлорид 27; 2,3 – смесь А+10, 30, 40% ЖК-1289

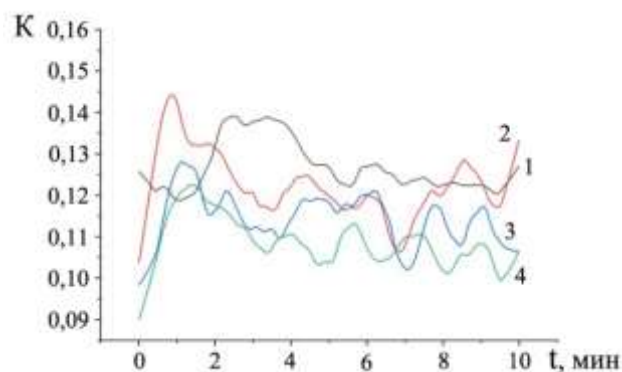


Рисунок 2 – Зависимость коэффициента трения смеси А от концентрации добавки ЖК-1289 и времени: 1 – смесь А; 2 – смесь А+10, 3 – 30, 4 – 40% ЖК-1289

Нематическая фаза характеризуется менее «жесткой» упорядоченностью молекул из-за отсутствия в ней молекулярной спирали. Это приводит к изменению вязкости смеси исследуемого состава, что вызывает снижение коэффициента трения (Рис. 1, 2). Добавка холестерина (1 вес. %) увеличивает температурную чувствительность смеси и вызывает ее быструю кристаллизацию. Внесение в смесь малых количеств (0,05-0,1 вес. %) разных наночастиц незначительно изменяют спектральные характеристики смеси, но увеличивает коэффициент трения, что требует дополнительных исследований межмолекулярных взаимодействий между молекулами добавок и молекулами ХЖК.

[1] М.В. Якемсева, И.В. Новиков, Н.В. Усольцева, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2010, **34**(4), 98-106.

[2] А.С. Сонин, Н.А. Чурочкина, А.В. Казначеев, А.В. Голованов, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2017, **17**(3), 5-28.

И.М. ЗОРИН, М.В. КАДНИКОВ, А.С. СЕНЬЧУКОВА, П.А. ФЕТИН
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

ПОЛИМЕРНЫЕ ПАВ ДЛЯ МИЦЕЛЛЯРНОГО КАТАЛИЗА

Способность к самоорганизации в растворах – одно из естественных свойств природных органических соединений, имеющее в живых системах определенные функции. Примером может служить «работа» желчных кислот в пищеварительной системе – они служат для повышения растворимости жиров и ускорения их ферментативного разложения. В технических системах это явление называется мицеллярный катализ. Его возможности – повышение скорости некоторых химических реакций за счет солюбилизации и локально концентрирования реагентов, повышение растворимости и реакционной способности малорастворимых веществ, в пределе – осуществление в воде химических реакций гидрофобных, нерастворимых веществ. В качестве мицеллярных катализаторов обычно используются низкомолекулярные мицеллообразующие ПАВ традиционного строения «голова-хвост», в том числе – «дизайнерские», то есть оптимизированные для конкретных химических реакций.

В данной работе мы покажем возможности высокомолекулярных амфифильных соединений в приложении к мицеллярному катализу [1]. Полимеры имеют ряд очевидных преимуществ – способность к мицеллообразованию на уровне одной молекулы (как у белков), то есть предельно низкие рабочие концентрации; легкость отделения катализатора от продукта (диализом), но и недостатки – например, сложность синтеза, полидисперсность, чувствительность к ионной силе раствора.

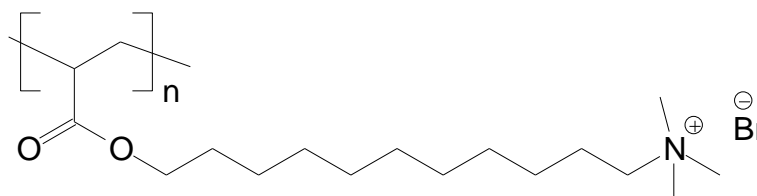


Рисунок 1 – Типичный представитель катионных амфифильных полиэлектролитов

Нами был синтезирован ряд полимерных ПАВ [2-4], как катионных, так и анионных, а также гибридных, с различной молекулярной массой, типом ионогенной группы и длиной гидрофобного хвоста. Некоторые из перечисленных вариаций обычны для логики исследования ПАВ, но также были предприняты попытки целенаправленного дизайна ПАВ с определенными каталитическими свойствами. Мы рассматривали несколько модельных реакций органических соединений – щелочной гидролиз сложных эфиров, Pd-катализируемая реакция Сузуки и др. Показано, что в зависимости от структуры ПАВ достигается и каталитический и ингибирующий эффект, в том числе при концентрациях, на порядок ниже применяемых с низкомолекулярными ПАВ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по крупному научному проекту по приоритетным направлениям научно-технологического развития (грант № 075-15-2024-553).

[1] I.M. Zorin, M.V. Kadnikov, P.A. Fetin, *Russ. J. Gen. Chem.*, 2024, **94**, Suppl. 1, pp. S148–S156 DOI: 10.1134/S1070363224140159

[2] P.A. Fetin, V.I. Fetina, M.V. Kadnikov, A.A. Lezov, I.M. Zorin, *Polym. Sci., Ser. C*, 2022, **64**, 144–153. DOI: 10.1134/S1811238222700163

[3] P.A. Fetin, V.I. Fetina, M.V. Kadnikov, V.V. Orlova, E.I. Ermolenko, A.A. Lezov, I.M. Zorin, *Colloids Surf. A*, 2024, **690**, 133696. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2024.133696

[4] P.A. Fetin, A.S. Senchukov, M.V. Kadnikov, A. Solunina, V.I. Fetina, P.M. Zefirova, A.A. Lezov, I. Perevyazko, I.M. Zorin, S.V. Lyulin, *Polymer*, 2025, **341**, 129303. DOI: 10.1016/j.polymer.2025.129303

М.А. КЛИМОВИЧ¹, Г.А. КРУСАНОВ², А.В. БЕЛОУСОВ², М.А. КОЛЫВАНОВА^{1,2},
В.Н. МОРОЗОВ¹

¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

²Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия

ПРОСТРАНСТВЕННО-УПОРЯДОЧЕННЫЕ АНСАМБЛИ БИОМОЛЕКУЛ КАК МОДЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ЗАДАЧ РАДИОБИОЛОГИИ

Одним из ключевых результатов радиобиологических исследований прошлого века стало определение основных клеточных мишеней радиационного воздействия. Таким образом, на сегодняшний день имеется довольно четкое (однако, все еще далеко не полное) понимание различных путей гибели подвергнутых облучению клеток. В то же время несмотря на совершенствование методов исследования клеточные эксперименты остаются сложными в части своей подготовки и проведения, а также характеризуются проблемами воспроизводимости в разных лабораторных условиях (к примеру, даже использование культуральной среды от различных производителей может существенно влиять на пролиферацию). В связи с этим значительный интерес для науки могли бы представлять модельные системы, частично воспроизводящие особенности живых систем, но характеризующиеся при этом большей «неприхотливостью» и точностью. Среди прочего это могло бы существенно способствовать развитию и внедрению в клиническую практику новых технологий лучевой терапии заболеваний опухолевой и неопухолевой природы. Мы полагаем, что таким подспорьем могли бы служить пространственно-упорядоченные системы, получаемые методами молекулярного конструирования.

Еще одной интересной задачей представляется поиск подходов, позволяющих с помощью простых физико-химических методов, например методов оптической спектроскопии, проводить как первоначальный скрининг (или, другими словами, экспресс-оценку) потенциальных радиомодификаторов, так и более детально изучать механизмы их действия. Как известно, большинство используемых тестов связаны с теми или иными допущениями или упрощениями, и для наиболее полного описания радиомодифицирующих свойств исследуемых соединений целесообразно применять целый комплекс различных методов. Кроме того, некоторые из них характеризуются сложной пробоподготовкой и весьма ресурсозатратны, другие трудно масштабируемы, третьи предоставляют исключительно качественные результаты.

В докладе будут рассмотрены возможности использования пространственно-упорядоченных ансамблей биомолекул для решения вышеописанных проблем. Также будет проведено сопоставление полученных результатов с «классическими» методами радиационной биологии.

А.А. КОНОВАЛОВА¹, С.В. ПАСЕЧНИК¹, А.В. ЗАХАРОВ²

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

²Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

ОПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК ГИБРИДНОГО ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО СЛОЯ, ОРИЕНТИРОВАННОГО МАГНИТНЫМ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ПОЛЯМИ НА ВОЗДЕЙСТВИЕ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕГО ПОТОКА ПУАЗЕЙЛЯ

Представлены первые экспериментальные результаты по комбинированному воздействию скрещенных магнитного и электрического полей, а также осциллирующего потока Пуазейля на ориентационную структуру жидкокристаллического слоя (Е7) с исходной гибридной поверхностной ориентацией директора. Методика проведения измерений соответствовала использованной ранее при изучении оптического отклика гомеотропного слоя ЖК на воздействие градиента давления [1].

Установлена возможность электрического контроля оптического отклика жидкокристаллического слоя на воздействие сдвигового течения. Исследования проводились в поляризованном лазерном свете, распространяющемся по нормали к слою ЖК, при величине индукции магнитного поля 0.28 Тл. Полученные результаты могут быть использованы для создания высокочувствительных датчиков механических возмущений, управляемых электромагнитными полями.

Работа была поддержана Министерством образования и науки РФ (грант № FSFZ-2026-0007).

[1] S. V. Pasechnik, V. G. Chigrinov, D. V. Shmeliova, Liquid crystals: viscous and elastic properties in theory and applications, John Wiley & Sons, 2009.

М.Ю. КУДРЯШОВ^{1,2}, Л.А. НОСИКОВА^{1,2}, А.А. СЕРГЕЕНКОВА¹, А.Н. КОЧЕТОВ^{1,2},
З.А. КУДРЯШОВА^{1,2}

¹МИРЭА – Российский технологический университет (Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова), Москва, Россия

²Институт физической химии и электрохимии им А.Н. Фрумкина (ИФХЭ) РАН, Москва, Россия

МЕЗОМОРФИЗМ АНТИКОАГУЛЯНТНЫХ РОДЕНТИЦИДОВ ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ

Антикоагулянтные родентициды второго поколения, в частности, дифенакум и бродифакум применяют уже полвека. Проведено исследование полиморфов дифенакума и бродифакума, показывающим разную растворимость и токсичность по отношению к целевым грызунам и т.д. Полученные новые модификации по данным ДТА имеют интервалы температур плавления. Анализ данных визуальной политермической микроскопии, а также рентгеноструктурного анализа позволил предположить реализацию жидкокристаллических состояний для полиморфных модификаций дифенакума и бродифакума. Сначала при плавлении в них формируются области с текстурами, напоминающими шлирен-текстуры смектиков (Рис. 1а-в) и четко выявляемые сферические области, похожие на капли холестерестериков (Рис. 1г), которые светятся при скрещенном положении поляризаторов в поле наблюдения микроскопа, по аналогии с термотропными ЖК.

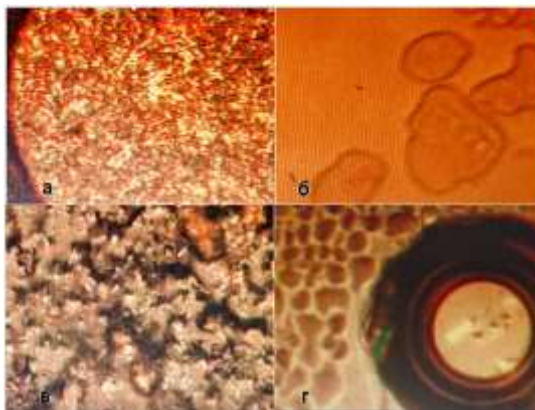


Рисунок 1 – Текстуры, полученные при увеличении $\times 100$ в скрещенных поляризаторах а) дифенакум при $232\text{ }^{\circ}\text{C}$, б) дифенакум при $230\text{ }^{\circ}\text{C}$, в) дифенакум при $232\text{ }^{\circ}\text{C}$, г) бродифакум при $218\text{ }^{\circ}\text{C}$

Методом РСА показаны внутри- и межмолекулярные водородные связи, различные π - π и С–Н... π -системы взаимодействий в кристаллических структурах производных рядов индандиона-1,3 и 4-гидроксикумарина. Упаковочный мотив (ряд индандиона-1,3) для полиморфов хлорофацинона указывает на образование сильной внутримолекулярной водородной связи, и формирование π - π -стэкинг взаимодействия с реализацией псевдодимеров по типу «голова к хвосту» (межплоскостное расстояние - 3.38 \AA), а за счет реализации набора С–Н... π Т-типа димеры связываются между собой. В другом полиморфе псевдодимеры не образуются, но реализуются набор контактов С–Н... π Т и РD-типов. Похожую картину наблюдают и для трех полиморфных форм дифенацина –гомолога хлорофацинона. Для них внутримолекулярная Н-связь отсутствует, но сильным межмолекулярным связям вторят наборы контактов С–Н... π Т и РD-типов для таких субстанций как бромациолон, дифенакум и бродифакум. Для каждого более сложного представителя данной серии добавляются новые типы взаимодействия, приводящие к росту температурного интервала плавления, и возможной реализации (идет исследование) мезоморфизма аналогично жидким кристаллам-каламитакам.

Понимание многообразия возможных упаковочных мотивов в совокупности с общими требованиями к молекулярным системам родентицидных субстанций позволят реализовать моделирование новых производных, обладающих улучшенными характеристиками, включая отсутствие барьера резистентности к используемым производным.

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА И СВОЙСТВ ПИГМЕНТА КРАСНОГО ДЛЯ НИТРОЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ СИСТЕМ

В настоящее время одним из приоритетных направлений развития химической промышленности нашей страны является импортозамещение, в том числе благодаря совершенствованию производства специальных красителей, в частности органических пигментов. В качестве объекта в данной работе выбран Пигмент красный, широко применяемый в лакокрасочной промышленности, производстве пластиков и полиграфических материалов. Актуальность исследования именно этого пигмента обусловлена тем, что отечественный продукт не удовлетворяет требованиям потребителя по вязкости и прозрачности.

В качестве образца сравнения использовался пигмент импортного производства, основой которого является Лак рубиновый СК (Рис. 1). Для анализа состава и структуры был применен комплекс физико-химических методов: ИК-Фурье-спектроскопия, атомно-абсорбционная и масс-спектрометрия, а также метод сухого озоления в муфельной печи.

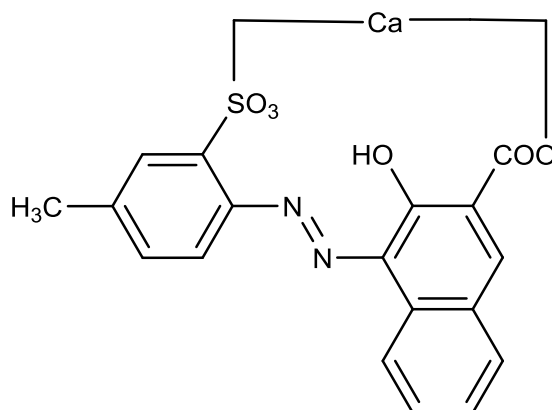


Рисунок 1 – Структурная формула Лака рубинового СК

Результаты масс-спектрального анализа отдельных зон, полученных проведением колоночной хроматографии образца сравнения, подтвердили наличие в смеси Лака рубинового СК.

В ходе интерпретации ИК спектров были установлены характерные колебания, указывающие на наличие органических функциональных групп, ароматических фрагментов и азосоединений в структуре пигмента.

Методом озоления был изучен неорганический остаток пигмента, в составе которого обнаружен оксид цинка, зачастую используемый в составе пигментов в качестве белил. Наличие цинка было также подтверждено в ходе выполнения атомно-адсорбционной спектрометрии.

Таким образом, комплексное исследование позволило установить, что в составе импортного образца Пигмента красного присутствуют как органическая основа (Лак рубиновый СК), так и неорганические компоненты. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации рецептуры отечественных аналогов с целью достижения требуемых показателей качества, в том числе для нитроцеллюлозных систем.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования ИГХТУ и при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема № FZZW-2026-0003.

А.С. МАНУКЯН¹, Т.В. КУСТОВА²

¹МБОУ СШ № 4, Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

ЖИВАЯ ВОДА РАСТЕНИЙ: УНИКАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ГИДРОЛАТОВ

Фитодистилляты или гидролаты, их еще называют «душистой водой» — это продукт паровой дистилляции растений. В процессе конденсации пара образуется два слоя: эфирное масло и вода, насыщенная полезными водорастворимыми компонентами. Полученная жидкость может иметь слабый запах. Гидролаты широко используются в качестве косметических средств, поскольку содержат ряд биологически активных водорастворимых компонентов эфирного масла, но в отличие от последнего имеют более мягкое воздействие на кожу, что позволяет использовать их в чистом виде.

Самые известные на сегодняшний день фитодистилляты — на основе розы, лаванды, василька, ромашки, розмарина, шалфея, календулы, Melissa и мяты. Все существующие исследования, описанные в литературе можно разделить на 2 основные группы: I группа ученых занимается исследованием состава имеющихся в продаже гидролатов, II группа — изучает свойства эфирных масел растений, а гидролаты считает побочным продуктом производства и исключает их из области своих интересов. Однако, описанные в литературе исследования показали, что несмотря на заявленный натуральный состав, в промышленных образцах многих гидролатов содержатся химические добавки, такие как глицерин, спирт, консерванты и синтетические ароматизаторы. Кроме того, в последнее время многие производители отказываются от дистилляции из-за больших затрат на растительное сырье и длительности процесса и под видом гидролата продают фальсификат в виде растворенных в воде эфирных масел, при этом сами масла могут быть как натуральными, так и синтетическими. Чтобы продлить срок годности такой воды, в неё добавляют спирт или консерванты, чтобы усилить цветочный аромат применяют отдушки.

Поэтому мы поставили перед собой задачу получить гидролаты без химических добавок, исследовать их свойства, а также оценить необходимость использования консерванта. Актуальность наших исследований подтверждается тем фактом, что ученые, работающие в этой области, в 2025 г. получили государственную поддержку в рамках программы «Приоритет 2030» [1].

В Ивановской области очень много растений, обладающих полезными свойствами, поэтому целью данного научного проекта является получение гидролатов для косметических целей, обладающих увлажняющими, тонизирующими и лечебными свойствами из растений родного края.

В качестве сырья нами были выбраны редкие в косметологии растения — полынь горькая, пион садовый, жасмин, подорожник, все эти растения хорошо известны своими целебными свойствами. Методом паровой дистилляции были получены натуральные гидролаты на основе выбранного сырья. Проведены исследования по изучению их стабильности во времени, определена возможность использования для всех типов кожи человека, а также оценена антимикробная активность полученных гидролатов. Определение химического состава подтвердило натуральность полученных фитодистиллятов. Показана неэффективность добавки консерванта в полученные гидролаты на всех этапах исследований. Техничко-экономические расчеты подтвердили конкурентоспособность полученных гидролатов. Экспериментально доказаны преимущества гидролата полыни над гидролатами пиона, жасмина и подорожника. Полученные результаты являются перспективой дальнейших разработок лекарственных и косметических средств на основе гидролата полыни горькой.

Исследование выполнено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ.

[1] <https://www.vyatsu.ru/internet-gazeta/prioritet-2030-uchenyie-vyatgu-izuchat-sostavyi-gi.html>. Дата обращения 15.11.2025

В.Н. МОРОЗОВ¹, М.А. КЛИМОВИЧ¹, О.В. ДЕМЕНТЬЕВА², В.М. РУДОЙ²,
М.А. КОЛЫВАНОВА^{1,3}

¹Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

²Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия

³Федеральный медицинский биофизический центр им. А.И. Бурназяна ФМБА России, Москва, Россия

ИНКОРПОРИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА В ЧАСТИЦЫ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИСПЕРСИЙ ДНК: SCIO ME NIHIL SCIRE

В определенных условиях двуцепочечные молекулы ДНК низкой молекулярной массы (обычно от $\approx 3 \times 10^4$ до $\approx 3 \times 10^6$ Да, т. е. от ≈ 50 до ≈ 4600 пар оснований) могут «собираться» в микронные и субмикронные частицы, для которых характерна выдающаяся (иногда даже используют термин «аномальная») оптическая активность. В литературе технология их получения хорошо известна как энтропийная или, иначе, *psi*-конденсация (акроним от “*Polymer and Salt Induced*”) [1]. Ее инициируют добавлением к водно-солевому раствору ДНК высокой ионной силы некоторой сверхкритической концентрации нейтрального, несмешивающегося с нуклеиновой кислотой полимера (чаще всего для этого используют полиэтиленгликоль (ПЭГ)). Известно, что оптическая активность получаемых частиц обусловлена специфической внутренней организацией: молекулы ДНК в них располагаются в параллельных слоях, повернутых друг относительно друга на некоторый угол и образующих типичную для холестерических мезофаз спиральную закрутку (собственно, именно из-за этого такие системы и получили название холестерических жидкокристаллических дисперсий (ХЖКД)) [2].

Примечательной особенностью ХЖКД ДНК является возможность целенаправленного инкорпорирования в их частицы органических красителей и/или металлических наночастиц (по ряду причин особый интерес представляют наночастицы золота). Последние могут не только стабилизировать структуру дисперсных частиц ДНК («сшитые» посредством наночастиц они способны сохранять свою структуру даже в отсутствие осмотического давления раствора ПЭГ), но и выступать в качестве функциональных элементов. Так, на базе ХЖКД ДНК можно создавать флуоресцентные сенсорные системы, в которых наночастицы могут служить тушителями или, наоборот, усилителями сигнала, или же конструировать мультифункциональные платформы для тераностики. Нельзя не отметить и фундаментальный интерес к исследованию взаимодействий наночастиц с частицами ХЖКД ДНК, ведь взаимодействия нанообъектов с жидкокристаллическими системами в целом весьма интересны с точки зрения создания новых функциональных материалов [3, 4].

В докладе будут рассмотрены структурные особенности взаимодействия наночастиц золота с частицами ХЖКД ДНК, кинетика этого процесса, влияние условий приготовления дисперсных систем и свойств самих наночастиц, а также перспективы их сочетанного практического использования. Будут освещены и малоизученные проблемы, которым планируется посвятить будущие работы.

[1] C.F. Jordan, L.S. Lerman, J.H. Venable, *Nat. New Biol.*, 1972, **236**(64), 67–70. DOI: 10.1038/new-bio236067a0

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

[3] O. Stamatiou, J. Mirzaei, X. Feng, T. Hegmann, *Top. Curr. Chem.*, 2012, **318**, 331–393. DOI: 10.1007/128_2011_233

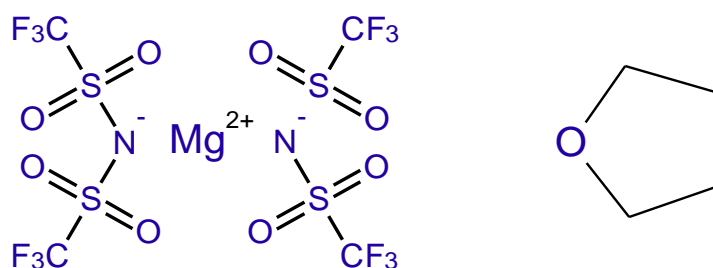
[4] G.F. Smaisim, K.J. Mohammed, S.K. Hadrawi, H. Koten, E. Kianfar, *BioNanoScience*, 2023, **13**, 819–839. DOI: 10.1007/s12668-023-01082-5

С.К. НИКОЛЕНКО¹, Е.А. АРХИПОВА¹, А.А. ЛЕОНОВ², А.С. ИВАНОВ¹¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия²НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, Москва, Россия

ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА НЕВОДНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ НА ОСНОВЕ БИС(ТРИФТОРМЕТАНСУЛЬФОНИЛ)ИМИДА МАГНИЯ

Среди устройств хранения энергии перезаряжаемые магний-ионные аккумуляторы (МИА) рассматриваются как альтернативная замена существующих литий-ионных батарей благодаря высокой удельной ёмкости магниевого анода ($3833 \text{ mA} \cdot \text{ч} \cdot \text{cm}^{-3}$), низкой стоимости и повышенной безопасности [1]. Использование высоковольтных катодов в сочетании с оптимизированными по составу электролитами позволяет существенно повысить энергоёмкость МИА. Тем не менее, подбор соответствующего электролита в настоящий момент представляет собой важную задачу. В частности, электролиты на основе реактива Гриньяра, хлорида алюмината магния, бор- и азотсодержащие растворы демонстрируют стабильную интеркаляцию/деинтеркаляцию Mg^{2+} . Однако узкое электрохимическое окно, сложные производственные процессы, коррозионная активность, воспламеняемость и высокая стоимость ограничивают их практическое применение [1]. Напротив, электролиты на основе бис(трифторметансульфонил)имида магния $\text{Mg}(\text{TFSI})_2$ характеризуются высокой анодной стабильностью.

Транспортные свойства электролитов определяют процессы массопереноса и кинетику миграции Mg^{2+} . Однако в большинстве публикаций, представленных в литературе, основное внимание уделено изучению электрохимических параметров МИА на основе магниесодержащего электролита, в то время как физико-химические параметры растворов даны ограничено. В настоящей работе изучены температурные (298 – 318 К) и концентрационные зависимости удельной электропроводности $\text{Mg}(\text{TFSI})_2$ в тетрагидрофуране (ТГФ) (Рис. 1). Анализ полученных данных проведён с использованием уравнения Кастеля-Амиса [2]. Установлено, что увеличение доли соли, а также температуры приводит к росту удельной электропроводности, что обусловлено повышением числа носителей заряда в растворе. С помощью моделей на основе уравнений Аррениуса и Вогеля-Фулчера-Таммана (ВФТ) [2] рассчитаны энергии активации электропроводности. Установлено, что уравнение ВФТ с большей точностью описывает полученные экспериментальные данные вследствие учёта образования ионных пар и агрегатов в электролите, в то время как уравнение Аррениуса предполагает полную диссоциацию соли. На основе данных зависимости плотности от концентрации определены коэффициенты изобарического расширения. Установлено, что плотность растворов электролитов растёт при увеличении содержания соли и уменьшается с ростом температуры.

Рисунок 1 – Структурные формулы $\text{Mg}(\text{TFSI})_2$ и ТГФ

[1] Lu Zhang, Yuping Liu, Xiaolei Wang, Zhihong Cui, Chenlong Xiao, Changguo Chen, Jingfeng Wang, Guangsheng Huang, Dingfei Zhang, Fusheng Pan, *Chem. Eng. J.*, 2025, **516**, 162410. DOI: 10.1016/j.cej.2025.162410

[2] Е.А. Arkhipova, M.M. Levin, A.S. Ivanov, M.Zakharov, I.D. Kozhatkin, K.I. Maslakov, P.K. Singh, S.V. Savirov, *Electrochim. Acta*, 2025, **512**, 145443. DOI: 10.1016/j.electacta.2024.145443

Т.А. ОВЧИННИКОВ, Д.А. ПЕТРОВ

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СУСПЕНЗИЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Коллоидные суспензии углеродных нанотрубок (УНТ) в нематическом жидком кристалле (НЖК) демонстрируют значительное снижение порога электрического перехода Фредерикса по сравнению с беспримесным нематиком [1]. Это обусловлено высоким значением анизотропии диэлектрической проницаемости примесных УНТ ($\epsilon_a^{\text{CNT}} \sim 10^4 \div 10^5$ [2]).

В настоящей работе в рамках предложенной нами ранее континуальной теории [2, 3] исследован электрооптический отклик НЖК, допированного однослойными УНТ. Путем минимизации функционала свободной энергии суспензии получено уравнение Лагранжа – Эйлера. Это уравнение удалось проинтегрировать и свести к интегральному уравнению, описывающему равновесные ориентационные конфигурации поля директора ЖК-суспензии. Как итог, нами рассчитаны фазовая задержка и интенсивность света, проходящего через ячейку с ЖК-суспензией. Получена высокая степень согласованности теоретических и экспериментальных данных из работы [1] для интенсивности света во всём диапазоне электрических напряжений. Эти результаты подтверждают полученную ранее оценку для анизотропии диэлектрической проницаемости УНТ $\epsilon_a^{\text{CNT}} \approx 10^4$, что также согласуется с независимыми литературными данными [4]. Показано, что используемое нами приближение абсолютно жёсткого сцепления директора ЖК с поверхностью нанотрубок позволяет корректно описать как снижение порога перехода Фредерикса, так и электрооптический отклик НЖК, допированного УНТ.

Предложенная теория может быть использована для прогнозирования электроориентационного отклика ЖК-суспензий УНТ, а также для оптимизации параметров переключающих элементов на основе наноструктурированных жидкокристаллических сред, таких как оптические затворы, пространственные модуляторы света и ЖК-дисплеи.

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

[1] D. Singh et al., *Liq. Cryst.*, 2019, **46**(9), 1389-1395. DOI: 10.1080/02678292.2019.1573329

[2] Т.А. Овчинников, Д.А. Петров, Жидкие кристаллы и "умные" наноматериалы (XI Чистяковские чтения): Сб. тез. докл. Всерос. науч. конф. с междунар. участием, Иваново, 2025, С. 36.

[3] Т.А. Овчинников, Д.А. Петров, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25**(4), 44. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.4.44

[4] S. Blatt et al. *Nano Lett.*, 2007, **7**(7), 1960. DOI: 10.1021/nl0706751

А.Э. ОСМИНИН^{1,2}, А. АМБАРЦУМЯН¹, Г.Э. УСТИНОВ², М. АЛТУНЯН¹, М. РАФАЕЛЯН¹,
А.А. МУРАВЬЕВ², С.А. ШВЕЦОВ¹, Т. ОРЛОВА¹

¹Центр оптики и фотоники, Ереванский государственный университет, Ереван, Армения

²Научный центр инфохимии, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Россия

НОВЫЙ ХИРАЛЬНЫЙ-АЗО-МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ФОТОПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЬ ДЛЯ ПРОГРАММИРУЕМОЙ ГЕНЕРАЦИИ СОЛИТОННЫХ СТРУКТУР В СВЕТОУПРАВЛЯЕМЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Следуя концепции хиральных азобензольных соединений, использованных в работе [1], мы синтезировали новую хиральную азобензольную добавку СЕАВ для жидких кристаллов, а также разработали холестерическую жидкокристаллическую смесь с фото переключаемыми свойствами на ее основе. Продемонстрированы возможности генерации топологических структур в ЖК ячейке.

Молекула СЕАВ состоит из: азобензольного фрагмента, хиральной и нехиральной алифатических цепей. Молекула синтезирована из коммерчески доступных соединений, базовыми реакциями с высоким выходом и нетоксичными реагентами. Синтез молекулы в себя включает 3 стадии: азосочетание исходной молекулы под действием щелочи в водном растворе и двумя реакциями образования простых эфиров, используя хиральный и не хиральный алифатические спирты.

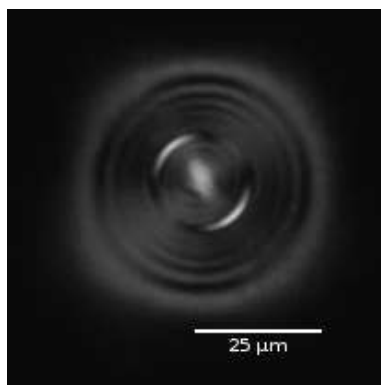


Рисунок 1 – Изображение оптического солитона (торона) в скрещенных поляризаторах, сформированного в образце E7 с добавкой СЕАВ

Для демонстрации генерации топологических солитонных структур использовали жидкокристаллическую ячейку с гомеотропными условиями с толщиной 30 мкм заполненную смесь нематического ЖК E7 и 1.87 вес. % хиральной добавки. Предварительно образец освещали с помощью ультрафиолетового светодиода (сетевой интенсивностью порядка 1 мВт/см²) для формирования *cis*-изомера и создания фрустрированного состояния хирального нематика в следствие увеличения шага холестерической спирали. На следующем этапе, световой пучок от полупроводникового непрерывного лазера ($\lambda = 450$ нм) отражался от амплитудного модулятора с матрицей из микрозеркал (digital micromirror device) и проецировался на образец с помощью линзы. Такой подход позволял локально увеличивать концентрацию *trans*-изомера и, соответственно, обратно уменьшать шаг холестерической спирали, контролируя и изменяя локальную структуру поля директора в реальном времени.

Мы показываем, что пространственно-контролируемое уменьшение шага холестерической спирали обеспечивает светоиндуцированное формирование холестерических солитонных структур, таких как тороны и холестерические пальцы разных типов, в разработанном нами жидкокристаллическом материале при воздействии маломощным лазерным пучком с интенсивностью порядка 100 мВт/см².

[1] Lin-Jer Chen, Jia-De Lin, Chia-Rong Lee, *J. Mater. Chem. C*, 2014, 2(22), 4388–4394. DOI: 10.1039/c4tc00128a

А.В. ПЕРЕСТОРОНИНА^{1,2}, М.В. ХАЗИМУЛЛИН²¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия²Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, Уфа, Россия

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ДЕФЕКТЫ В НЕМАТИЧЕСКИХ МОСТИКАХ: КОЛЛАПС КОЛЬЦЕВОЙ ДИСКЛИНАЦИИ В ТОЧЕЧНЫЙ ДЕФЕКТ

Жидкие кристаллы в ограниченных геометриях демонстрируют многообразие топологически нетривиальных структур, которыми можно управлять с помощью внешних полей, температурных градиентов, изменения геометрических параметров системы и граничных условий. В нематических жидких кристаллах конфигурации директора в сферических каплях и капиллярах хорошо изучены. Жидкие кристаллы в ограниченных цилиндрах, например, мостиках, представляющих собой каплю, смачивающую две параллельные подложки практически не исследованы. В работах [1, 2] описаны основные топологические состояния такой системы: с точечным и линейным (дисклинационное кольцо) дефектами в радиальной и гиперболической конфигурациях и изучена их устойчивость в зависимости от анизотропии упругости и геометрии мостика. В работе [3] продемонстрирован топологический переход от кольцевой дисклинации к точечному дефекту в электрическом поле.

В настоящей работе экспериментально изучался переход между линейным и точечным дефектами в мостиках нематика МВВА под действием электрического поля. Капли ЖК помещались между двумя плоскопараллельными пластинами с проводящим покрытием, разделенными прокладками толщиной 20 - 40 мкм. Поляризационно-оптические наблюдения показали существование мостиков с точечными и кольцевыми дефектами. Приложение переменного электрического напряжения к подложкам ячейки в мостиках с кольцевой дисклинацией приводило к наклону оптической оси в центральной части капли и уменьшению радиуса кольцевого дефекта. При достижении критического значения напряжения кольцевой дефект коллапсировал в точечный дефект. Были измерены зависимости радиуса кольца от величины приложенного напряжения и определены критические напряжения для мостиков с различным геометрическим параметром (отношением диаметра к высоте мостика).

Описание экспериментальных данных проводилось в рамках модели Озеена-Франка в одноконстантном приближении в однородном электрическом поле. Численно находилось распределение директора и вычислялась полная энергия. Были получены зависимости полной энергии системы от радиуса кольцевого дефекта для разных значений геометрических параметров и напряжений. Энергия мостиков большого размера имеет два минимума, соответствующих точечному и кольцевому дефекту, разделенных потенциальным барьером. Рост напряжения приводит к увеличению энергии кольцевого дефекта и сдвигу положения локального минимума в область меньших радиусов. Увеличение напряжения до критического значения приводит к полному исчезновению минимума кольцевого дефекта, что соответствует переходу к точечному дефекту.

Полученная теоретическая картина качественно согласуется с экспериментальными данными. Для количественного описания экспериментальных исследований необходимо дальнейшее развитие теоретической модели с учётом анизотропии упругости и неоднородности электрического поля.

[1] Ellis P., Huang S., Klaneček S. et al., *Phys. Rev. E*, 2018, **97**, 040701. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.040701

[2] Liang B.-J., Chen S.-H., *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**(5), 2189-2194. DOI: 10.1063/1.351115

[3] Thiberge S., Chevillard C., Gilli J.M. et al., *Liq. Cryst.*, 1999, **26**(8), 1225-1234. DOI: 10.1080/026782999204246

Е.А. ПЕТУХОВА, Е.А. ДАНИЛОВА

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА АЗОТ- И СЕРОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ С БИС(2-ХЛОРЭТИЛ) АМИНОГРУППОЙ И МАКРОГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Химические свойства соединений определяются их структурными особенностями. При анализе молекулярной архитектуры активных фармацевтических субстанций, обнаруживается, что в качестве фармакофоров выступают гетероциклические фрагменты. Преимущество этих соединений объясняется тем, что они имеют высокую химическую стабильность, обладают противомикробной, противоопухолевой, антиконвульсивной, фунгицидной активностями и способны взаимодействовать с биологическими мишенями.

Производные 1,2,4-триазола и 1,3,4-тиадиазола представляют собой гетероциклические соединения, проявляющие широкий спектр биологической активности, и находят применение в химико-фармацевтической промышленности, в органической и медицинской химии. А также входят в структуру таких известных препаратов как: флуконазол, диакарб, метазоламид, летрозол, этазол и т.п.

Немаловажную роль в структуре действующих веществ играют заместители, которые придают лекарственным препаратам те или иные фармакологические свойства, в частности, противоопухолевую активность. Рост заболеваемости онкологией в мире с каждым годом увеличивается, поэтому поиск новых противоопухолевых препаратов остается актуальной проблемой. Известно, что производные бис(2-хлорэтил)амин являются первыми цитостатическими противоопухолевыми препаратами, используемыми в химиотерапии. По механизму действия они относятся к бифункциональным алкилирующим агентам, широко используемым для лечения различных онкологических заболеваний. При этом соединения с бис(2-хлорэтил)аминогруппой достаточно токсичны. Для понижения токсичности заместитель вводят в биогенные соединения. Так были получены допан, сарколизин и хлорамбуцил.

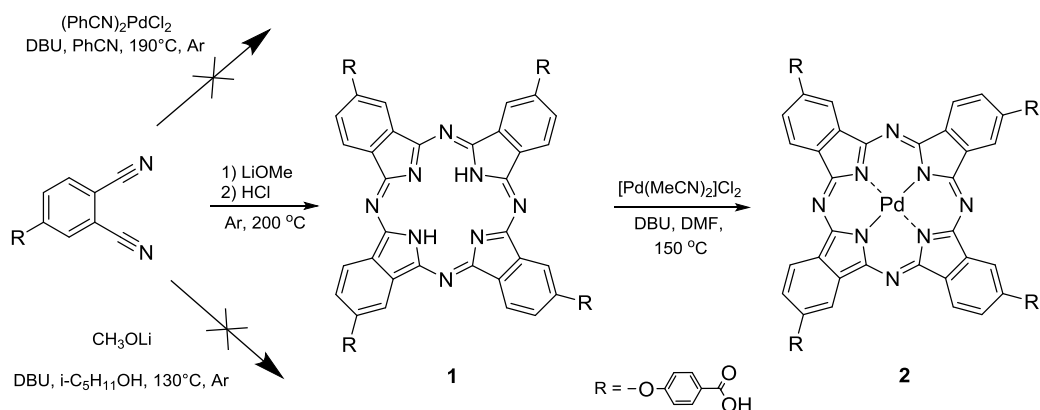
3,5-Диамино-1*N*-1,2,4-триазол и 2,5-диамино-1,3,4-тиадиазол, а также производные фталонитрила являются прекурсорами макрогетероциклических соединений (Мс). Известно, что Мс обладают уникальными свойствами и благодаря этому находят применение в качестве высокоэффективных красителей, катализаторов, переносчиков малых молекул, полупроводников, анионных рецепторов. Наличие тех или иных свойств, проявляемых Мс, напрямую зависит от молекулярной структуры, которая определяется выбором природы исходных соединений и условий синтеза. Поэтому ведение бис(2-хлорэтил)аминогруппы в молекулы прекурсоров Мс открывает перспективы для дальнейшего исследования структурного многообразия этого класса соединений с целью получения биологически активных веществ.

В работе получен ряд бисаминоазолов по усовершенствованной нами методике, синтезированы 1*N*-(2-хлорэтил)-3-амино-1,2,4-триазол, 4-(бис(2-гидрокси/хлорэтил)амино)-5-нитрофталонитрилы, а также Мс на их основе. Структура всех полученных соединений установлена на основании данных ИК-, электронной, ¹H, ¹³C и 2D HSQC ЯМР-спектроскопии, газовой хромато-масс- и масс-спектрометрии, элементного анализа, РСА и подтверждена квантово-химическими расчетами. С помощью компьютерного скрининга изучены *in silico* биологические, фармакокинетические и токсикологические свойства полученных соединений. Для оценки правильности прогноза спектров антибактериальной активности, проведено исследование противомикробных свойств *in vitro* бисаминотиадиазолалканов на трех штаммах микроорганизмов: *Staphylococcus epidermidis*, *Escherichia coli*, *Citrobacter amalonaticus*. Противогрибковые свойства были оценены по отношению к фитопатогенному грибу *Fusarium graminearum*.

ГЕТЕРОГЕННЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ НА ОСНОВЕ ТЕТРА-(П-КАРБОКСИ)-ФЕНОКСИФТАЛОЦИАНИНА ПАЛЛАДИЯ(II) ДЛЯ РЕАКЦИИ СОНОГАШИРЫ

Реакция Соногаширы – палладий-катализируемое кросс-сочетание арил(винил)галогенидов с терминальными алкинами – является одним из ключевых методов образования связей С–С в органическом синтезе. Однако широко используемые гомогенные катализаторы часто приводят к образованию неактивной палладиевой черни. Ранее нашей научной группой были разработаны гомогенные каталитические системы на основе фталоцианиновых комплексов, решающие данные проблемы, однако в таком случае отсутствует возможность повторного использования и регенерации катализатора. В связи с этим перспективными являются гетерогенные системы, обеспечивающие легкое отделение катализатора от реакционной среды.

Тетра-(п-карбокситетрафенокси)замещенный фталоцианин палладия(II) синтезирован двухстадийным one-pot методом. На первой стадии из соответствующего фталонитрила получен фталоцианин лития, который без выделения был обработан разбавленной HCl для получения свободного лиганда. Затем в колбу вводили $[Pd(MeCN)_2]Cl_2$. Контроль стадий осуществляли с помощью методов ТСХ и электронной спектроскопии (УФ-видимая область). Выход целевого металлофталоцианина составил 35%.



Полученный комплекс иммобилизовали на диоксиде кремния двумя способами:

- физической адсорбцией на немодифицированном SiO_2 ;
- ковалентной сшивкой с SiO_2 , модифицированным (3-аминопропил)триэтоксисиланом ($A-SiO_2$), в присутствии ДЦК и 4-диметиламинопиридина.

Прививку подтверждали ИК-спектроскопией. Текстуальные характеристики материалов изучены методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и низкотемпературной адсорбции-десорбции азота.

Полученные гетерогенные системы далее были исследованы в реакции Соногаширы между йодбензолом и фенилацетиленом в присутствии сокатализатора CuI. Установлено, что иммобилизованные фталоцианины палладия проявляют повышенную каталитическую активность по сравнению с гомогенным аналогом (тетра-(п-карбокситетрафенокси)фталоцианин Pd(II) в растворе). Таким образом, разработанные материалы являются эффективными и легко отделяемыми катализаторами для кросс-сочетания Соногаширы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-73-00147).

А.Е. РАССОЛОВА, В.Е. МАЙЗЛИШ

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

СИНТЕЗ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРА-4-[(2'/3'-МЕТОКСИФЕНОКСИ)-5-ХЛОР]ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ, КОБАЛЬТА

Ранее мы показали, что тетра-4-(4'-метоксифенокси)фталочиаин меди образует колоннообразные гексагональные мезофазы. Мезоген характеризуется флуоресцентными свойствами, как в растворах хлороформа, так и в тонких слоях, полученных с помощью метода спин-коатинга [1].

Данное сообщение посвящено синтезу и спектральным свойствам других метоксифеноксизамещенных металлофталочиаинов – тетра-4-[(2'/3'-метоксифенокси)-5-хлор]фталочиаинам меди и кобальта.

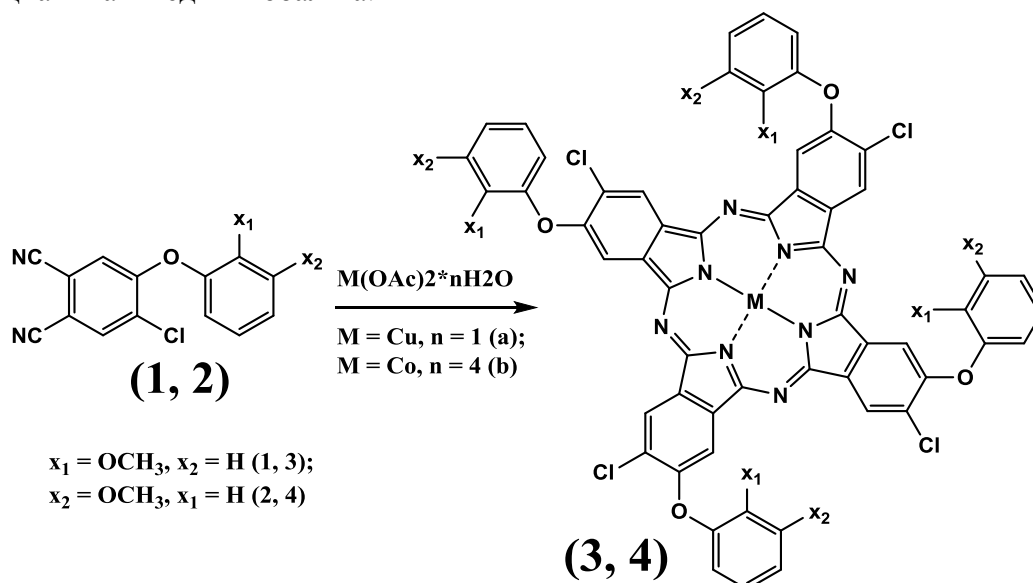


Рисунок 1 – Схема

Синтез тетра-4-[(2',3'-метоксифенокси)-5-хлор]фталочиаина меди и кобальта (3, 4) осуществляли взаимодействием фталонитрила (1, 2) с соответствующими ацетатами металлов при температуре 170-180 °С (Схема). Очистку комплексов проводили колоночной хроматографией на силикагеле М60 хлороформом. Идентификацию синтезированных соединений 3, 4(a, b) осуществляли с привлечением масс-спектрометрии, ИК- и электронной спектроскопии. Полученные фталочиаины обладают растворимостью в органических растворителях (хлороформ, ацетон, ДМФА, хлористый метилен, бензол и др.).

Анализируя характер электронных спектров поглощения комплексов 3, 4(a, b), можно предполагать, что в растворе они находятся преимущественно в мономерной форме. Q-полоса находится в интервале 671-684 нм.

[1] А.И. Смирнова, В.А. Кулев, А.Е. Рассолова, В.Е. Майзлиш, И.В.Холодков, С.В. Яблонский, Т.В. Тихомирова, В.В. Александрыйский, И.Г. Абрамов, Е.Г. Глуховской, Н.В. Усольцева, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2022, **22**(4), 37-54. DOI: 10.18083/LCAppl.2022.4.37

Исследование выполнено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ и при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, тема № FZZW-2026-0003.

О.А. СВИДАН¹, П.С. ЗАХАРОВА¹, Б.А. УМАНСКИЙ², С.В. ПАСЕЧНИК¹, А.В. ДУБЦОВ¹

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт»

ФОТОИНДУЦИРОВАННЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИЛЬНО ХИРАЛЬНЫХ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Индукция хиральности в нематических жидких кристаллах (НЖК) приводит к появлению специфических мезофаз, в которых молекулы организованы в спиральные структуры, обладающие брэгговским отражением света. В нематических жидкостях с высокой степенью хиральности (шаг спирали $p < 500$ нм), спиральные структуры представляют собой цилиндры с двойным кручением директора НЖК, организующиеся в кубические решетки с размером от 100 до 400 нм, что приводит к образованию трехмерных фотонных кристаллов, называемых голубыми фазами. В пространстве между цилиндрами нарушается молекулярная ориентация, что приводит к образованию энергетически невыгодных дисклинаций внутри кубических решеток. В связи с этим голубые фазы обычно существуют в узком температурном диапазоне 0,5–2,0 °С между изотропной и холестерической фазами.

К настоящему моменту результаты проведенных исследований показывают высокую чувствительность голубых фаз к электрическим, температурным и оптическим полям, а также возможность существенного расширения температурного диапазона голубых фаз за счет стабилизации полимерными сетями или использования мезогенных молекул с особой конфигурацией. Несмотря на детальные исследования голубых фаз в условиях вариации температуры и приложения электрических полей, имеется мало информации о влиянии УФ/видимого излучения на физические свойства данных фаз в фоточувствительных материалах.

В настоящей работе представлены результаты экспериментального исследования влияния УФ/видимого излучения на фазовое поведение сильно хирального фоточувствительного нематического жидкого кристалла на поликарбонатных DVD подложках без/с субмикронным рельефом. Объектом исследования являлась жидкокристаллическая матрица ЖК-440 на основе производных азоксибензола, допированная хиральной добавкой S-811/CB15. Оптическое наблюдение жидкокристаллического образца проводилось с применением поляризационного микроскопа, оборудованного видеокамерой, нагревательным столиком и оптоволоконным спектрометром. УФ облучение образца проводилось монохроматическим светом с длиной волны 405 нм/видимым светом от галогенной лампы микроскопа. Наблюдение в коноскопическом режиме дифракционных картин (диаграмм Косселя) позволило идентифицировать голубые фазы.

Обнаружено, что исследуемый образец с 40% концентрацией хиральной добавки S-811 при охлаждении из изотропной фазы имеет более широкий температурный диапазон существования голубых фаз (>14 °С) по сравнению с добавкой CB15 (~ 6 °С). Для голубой фазы ВР I, ориентированной поликарбонатными подложками без субмикронного рельефа наблюдался сдвиг длины волны селективного отражения света, что объясняется поворотом кристаллической решетки.

Облучение УФ/видимым светом приводило к последовательному формированию голубых фаз ВР III, ВР II и ВР I при комнатной температуре. В ходе облучения наблюдалось формирование полидоменной текстуры фазы ВР II/ВР I с чрезвычайно большими пластинками ($\sim 0,04$ мм²) с размерами на два порядка больше, чем при температурном охлаждении образца.

Результаты исследования обсуждаются для практического применения голубых фаз жидких кристаллов в качестве сенсоров химических и биологических примесей.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSFZ-2026-0007).

М.А. УТКИН¹, М.В. ХАЗИМУЛЛИН², Д.В. МАКАРОВ¹¹Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия²Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, Уфа, Россия

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ И ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ФАКТОРА НА КОНФИГУРАЦИИ ДИРЕКТОРА В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МОСТИКАХ

В работе исследуется жидкокристаллический (ЖК) мостик, представляющий собой каплю нематического жидкого кристалла (НЖК), зажатую между двумя параллельными подложками. Известно [1, 2], что в ЖК мостике с нормальными граничными условиями на боковых поверхностях и подложках устойчивыми могут быть четыре конфигурации директора с топологическими дефектами: гиперболические точечная и кольцевая, радиальные точечная и кольцевая. Однако устойчивость конфигураций исследовалась только в зависимости от анизотропии упругости и геометрического фактора Γ (отношения диаметра к высоте цилиндра), причем теоретический анализ был выполнен для «прямого» цилиндра с краевым углом на подложке 90° при жестком сцеплении молекул ЖК с границами.

В данной работе в рамках континуальной теории Озеена-Франка проводилось численное моделирование распределения директора в ЖК мостике в широком диапазоне краевых углов γ и геометрического фактора Γ , и проведен анализ устойчивости четырех топологических состояний. Все расчеты были выполнены для значения анизотропии упругости, соответствующей типичным низкомолекулярным термотропным ЖК, таким как MBVA и 5CB. Показано (Рис. 1), что для углов $\gamma < 87^\circ$ при малых значениях геометрического фактора ($\Gamma < 4.5$) устойчивой является конфигурация с гиперболическим точечным дефектом (HP), а при больших значениях ($\Gamma > 4.5$) – конфигурация с линейным гиперболическим дефектом (HR).

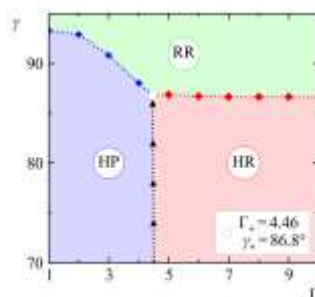


Рисунок 1 – Фазовая диаграмма геометрический фактор Γ – краевой угол γ

Обнаружено, что при $\gamma < 87^\circ$ критическое значение Γ_c , при котором энергии конфигураций равны, практически не зависит от краевого угла. Для $\gamma > 93^\circ$ устойчивой является единственная конфигурация с радиальным кольцевым дефектом (RR), а в диапазоне $87^\circ < \gamma < 93^\circ$ область устойчивости гиперболической точки (HP) сильно зависит от Γ . Также были выполнены тестовые расчеты с учетом конечного взаимодействия молекул ЖК с подложками. Результаты показали, что слабое сцепление на основаниях мостиков приводит к расширению области существования гиперболической точечной конфигурации.

Заметим, что полученные в данной работе значения Γ_c заметно отличаются от результатов работы [2]. Для выяснения причин этого необходимы дальнейшие теоретические исследования влияния слабого сцепления на устойчивость топологических состояний в ЖК мостиках.

[1] B.-J. Liang, S.-H. Chen, *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**(5), 2189-2194. DOI: 10.1063/1.351115

[2] P.W. Ellis, S. Huang, S. Klaneček, et al., *Phys. Rev. E*, 2018, **97**(4), 040701. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.040701

ГОМО- И ГЕТЕРОЗАМЕЩЕННЫЕ ФТАЛОЦИАНИНЫ С 4-(1-МЕТИЛ-1-ФЕНИЛЭТИЛ)ФЕНОКСИГРУППАМИ. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА

В работе обобщены данные относительно влияния химического строения (природы периферийных заместителей и металлов-комплексобразователей) ряда гомо- и гетерозамещенных фталоцианинов и их металлокомплексов, содержащих в молекуле 4-(1-метил-1-фенилэтил)-феноксигруппы, на их физико-химические свойства.

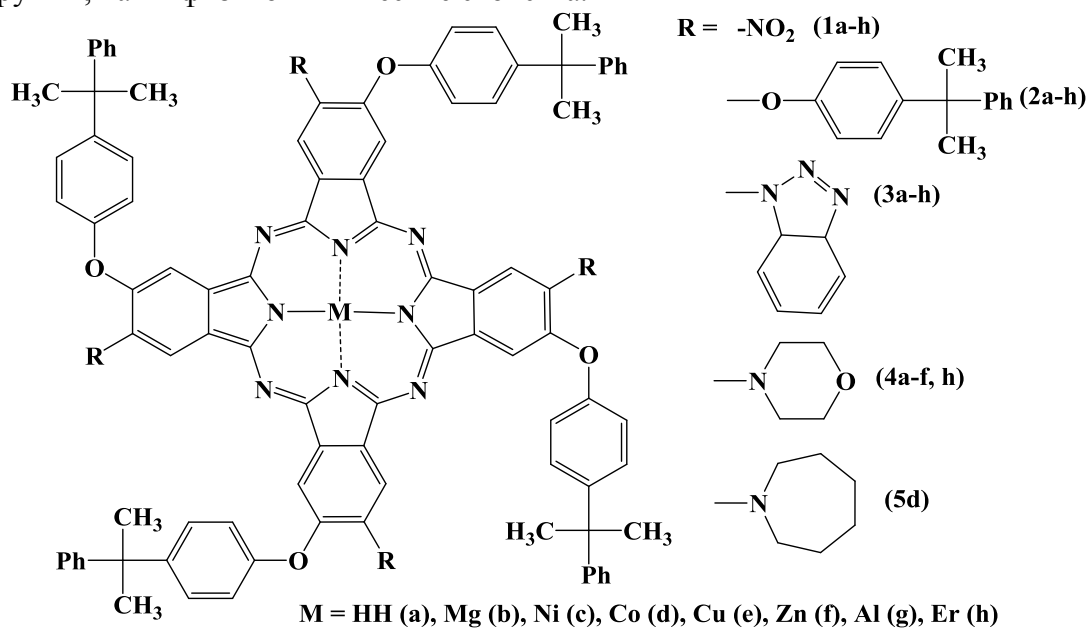


Рисунок 1 – Структурные формулы октазамещенных фталоцианинов

Обнаружено, что металлокомплексы фталоцианинов **1a,b,f,g-3 1a,b,f,g, 4f** с магнием, цинком и алюминием являются люминофорами и способны генерировать активные формы кислорода (АФК) [1]. Наблюдается влияние природы металла-комплексобразователя на величину квантового выхода люминесценции и АФК, которые растут в ряду: Mg < Al < Zn. Сульфопроизводные кобальтфталоцианинов **1d-3d** проявляют каталитическую активность в реакциях гомогенного жидкофазного окисления серосодержащих органических соединений [2]. Фталоцианины меди **2e** и **3e** являются мезоморфными и способны формировать колончатые мезофазы, причем дальнейшая структурная модификация **1e** и **3e** путем введения в имеющиеся оксиарильные фрагменты октадецилсульфамойльных групп приводит к изменению типа мезофазы с колончатой на смектическую и заметному расширению интервала ее существования по сравнению со фталоцианинами-предшественниками [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема № FZZW-2026-0003.

[1] S.A. Znoiko, A.S. Malyasova, E.A. Kostrova, A.I. Mikhailova, A.S. Vashurin, V.E. Maizlish, O.G. Khelevina, P.M. Ivanova, Y.A. Zrilova, D.V. Mishchenko, *Macroheterocycles*, 2020, **13** (3), 269–276. DOI: 10.6060/mhc191173z

[2] A. Filippova, A. Vashurin, S. Znoyko, I. Kuzmin, M. Razumov, A. Chernova, G. Shaposhnikov, O. Koifman, *J. Mol. Struct.*, 2017, **1149**, 17–26. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.07.086

[3] С.А. Федуллова, Н.В. Бумбина, О.Б. Аكوпова, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25** (4), 81–90. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.4.81

ВЛИЯНИЕ ДЛИНЫ АЛКИЛЬНОГО ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ С ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ НА ОСНОВЕ 4-ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТ И ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДИНА

В случае использования в качестве компонентов ЖК систем с водородными связями бензолсульфокислот и производных пиридина требуется рассмотреть вариант комплекса с переносом протона от сульфокислотной группы к пиридиновому фрагменту с образованием межмолекулярной водородной связи типа $O\cdots H-N$, что связано с достаточно выраженными кислотными свойствами сульфогруппы [1].

В данной работе анализируется влияние заместителя на характеристики и тип межмолекулярных водородных связей на примере систем «4-алкилбензолсульфокислота: 4-пиридил-4'-алкилоксибензоат». Рассматривается влияние длины алкильного заместителя в молекуле замещенной бензолсульфокислоты в ряду 4-X-БСК, где X = Me, Eth, Pr, iPr, Dod. Выполнены как теоретические исследования с помощью квантовой химии (B3LYP/cc-pVTZ, B97D/6-311++G**, Gaussian09), так и экспериментальные (ИК-спектроскопия, ДСК, поляризационная термомикроскопия). Для всех сульфокислот проведено моделирование Н-комплексов с переносом протона с сульфогруппы на пиридиновый фрагмент 4-пиридил-4'-пропилоксибензоата (PCM, этанол), рассчитаны энергии комплексообразования, определены основные характеристики Н-связей, которые в таблице 1 сопоставляются с рассчитанными величинами электронных эффектов сульфогрупп $\Sigma E^{(2)}_{\text{созн}}$ и величин энергии Гиббса депротонирования $\Delta_r G^0(298)$ соответствующих сульфокислот.

Таблица 1 – Энергии комплексообразования ($-\Delta E_{\text{комп.}}$) различных Н-комплексов, а также характеристики межмолекулярных водородных связей типа $O\cdots H-N$ (DFT/ B3LYP/cc-pVTZ)

X	$-\Delta E_{\text{комп.}}$ ккал/моль	$r(H-N)$, Å	$r(H\cdots O)$, Å	$O\cdots H-N$, °	$\Delta \nu_{H-N}$, см ⁻¹	$\Sigma E^{(2)}_{\text{созн}}$, ккал/моль	$\Delta_r G^0(298)$, ккал/моль
Me	18.4	1.059	1.604	179.3	861.4	-3.20	315.0
Eth	18.4	1.059	1.607	179.0	863.1	-3.23	314.4
Pr	18.3	1.060	1.602	180.0	875.7	-3.23	314.5
iPr	18.3	1.060	1.604	179.0	865.4	-3.23	314.4
Dod	18.2	1.059	1.606	179.4	860.3	-3.26	314.4

Из таблицы видно, что прочность межмолекулярной водородной связи в рассматриваемом ряду комплексов отличается мало, однако можно выделить Н-комплекс с наиболее короткой водородной связью $H\cdots O$, которая составила 1.602 Å – это Н-комплекс на основе 4-Pr-БСК.

Таким образом, алкильные заместители изопропил-, пропил-, додецил-, являясь электронодонорными, приводят к усилению электроноакцепторных свойств сульфогруппы, уменьшают газофазную кислотность, что способствует в сочетании с производным пиридина формированию более прочных комплексов с переносом протона.

Были получены образцы Н-комплексов 4-Me-БСК и 4-Et-БСК с 4-пиридил-4'-алкилоксибензоатом (n = 6; 12) путём смешения компонентов в эквимолярном соотношении и дальнейшего растворения или плавления. Для полученных четырех систем были зарегистрированы ИК-спектры и ДСК кривые, а также текстуры в поляризационном микроскопе при нагревании и охлаждении. Все они обладают мезоморфными свойствами в широком температурном интервале, при этом температуры фазовых переходов слабо зависят от длины алкильного заместителя в кислоте 4-X-БСК и в производном пиридина.

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

Н.С. ФОМИН, Д.К. КРУЧИНИНА, Т.В. КУСТОВА

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ ФДТ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОНОКАТИОННЫХ ХЛОРИНОВЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ

В настоящее время фотодинамическая терапия (ФДТ) достаточно широко применяется в клинической практике при лечении ряда онкозаболеваний. У этого метода множество преимуществ, и он обладает высокой противоопухолевой активностью, но имеет и ряд ограничений. Основными проблемами являются малая глубина проникновения света в ткани и недостаточная селективность накопления в опухолевых тканях по сравнению с окружающими здоровыми. Преодоление этих ограничений позволит значительно расширить область применения ФДТ. В связи с этим дальнейшее совершенствование метода проходит как в области поиска новых фотосенсибилизаторов (ФС), обладающих более высокой опухолетропностью к конкретным видам опухолей, так и поиском путей их активации в глубине тела.

В данной работе были проведены физико-химические исследования монокатионных фотосенсибилизаторов хлорофиллового типа, полученных ранее [1]. Исследование генерации синглетного кислорода было проведено двумя способами – химическим методом и методом разрешенной во времени люминесценции синглетного кислорода. Далее было изучено взаимодействие ФС с белками плазмы методом гель-фильтрации. Проведены исследования по изучению аффинности ФС к белкам плазмы методом гель-фильтрационной хроматографии с использованием гелей «Акрилекс Р 200» и «Сефадекс G 200» и получены кривые распределения ФС по транспортным белкам плазмы. Оказалось, что оба монокатионных хлорина транспортируются в основном ЛПНП (липопротеины низкой плотности) и ЛПВП (липопротеины высокой плотности), что приводит к преимущественному накоплению в опухолевых клетках и ассоциированных с опухолью макрофагах. Таким образом, оба монокатионных хлорина обладают выраженным сродством к липидным мембранам, что приводит к преимущественному связыванию с липопротеиновой фракцией плазмы. Это указывает на то, что эти вещества должны в большей степени накапливаться в опухолевых клетках, чем хлорин *e6*.

Пилотное фотодинамическое лечение крыс с саркомой М1 с помощью этих макроциклов, демонстрирует их высокий потенциал в противоопухолевой фотодинамической терапии. Оба исследованных хлоринных фотосенсибилизатора обладают низкой темновой токсичностью в темноте, но при облучении красным светом обнаруживают выраженную противоопухолевую активность. Они заслуживают пристального внимания как потенциальные ФС для проведения ФДТ, что требует дополнительных исследований как на других типах перевивных опухолей, так и изучении потенцирования противоопухолевой активности полученных нами ФС путем их комбинирования с ФС, таргетирующими васкулярную сеть опухолей [2].

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

[1] Т.В. Кустова, Н.С. Фомин, А.Е. Рассолова, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25**, 35-43. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.4.35

[2] A.V. Kustov, Ph.K. Morshnev, N.L. Smirnova, T.V. Kustova, T.E. Zorina, V.P. Zorin, A.K. Gagua, N.S. Fomin, D.S. Lyapin, M.D. Fomichev, D.B. Berezin, O.B. Abramova, *ACS Omega*, 2026, **11** (4), 5271–5280. DOI: 10.1021/acsomega.5c07979

М.В. ХАЗИМУЛЛИН

Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, Уфа, Россия

УСТОЙЧИВЫЕ КОНФИГУРАЦИИ ДИРЕКТОРА В ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ КАПЛЯХ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

В настоящей работе экспериментально и теоретически анализируется устойчивость конфигураций директора нематического жидкого кристалла в ограниченном цилиндре с нормальными граничными условиями. Для проведения экспериментальных исследований формировалась система изолированных жидкокристаллических мостиков жидкого кристалла МББА между двумя параллельными подложками с проводящим покрытием, зазор между которыми составлял 20 — 40 мкм, а диаметр жидкокристаллических мостиков в плоскости подложки - от 50 до 200 мкм, так что геометрический фактор $\Gamma = 2R/H$ (отношение диаметра $2R$ к высоте H мостика) находился в диапазоне от 1 до 10. При охлаждении образцов из изотропной фазы в ЖК мостиках небольшого диаметра формировалась типичная текстура с точечным дефектом в центре, представляющая собой темный закрученный крест с расширяющимися от центра к боковой границе мостика четырьмя темными полосами. Ориентация директора в ЖК мостиках большого диаметра была практически полностью гомеотропной, за исключением небольшой области в окрестности боковой границы, где наблюдалась линейная кольцевая дисклинация. При приложении высокочастотного (1 кГц) электрического напряжения между параллельными подложками в ЖК мостиках с большим диаметром наблюдался переход от кольцевой дисклинации к точечному дефекту. Нагрев до изотропной фазы или использование низкочастотного напряжения большой амплитуды в режиме динамического рассеяния света возвращало исходное состояние ЖК мостиков с кольцевой дисклинацией. В результате анализа экспериментальных данных была получена оценка критического геометрического фактора $\Gamma_c \approx 4$, при котором происходит смена топологической конфигураций в ЖК мостиках.

Численное моделирование распределения директора в цилиндрической капле нематического жидкого кристалла с нормальными граничными условиями проводилось в рамках континуальной теории с использованием метода конечных разностей. Расчеты были выполнены в осесимметричной геометрии для радиальной и гиперболической конфигураций директора в диапазоне радиусов кольцевой дисклинации R_r от 0 до R ($R_r = 0$ соответствует точечному дефекту в центре цилиндра). Анализ полной упругой энергии системы показал, что устойчивыми являются конфигурации директора с «большим» (радиус близок к радиусу цилиндра) радиальным и гиперболическим кольцевым дефектом, радиальное кольцо с малым радиусом $R_r \approx 0.05R$ и с гиперболическим точечным дефектом. Были определены области параметров, где устойчива та или иная топологическая конфигурация в диапазоне отношений модулей упругости K_{11}/K_{33} от 0.5 до 1 и геометрического фактора Γ - от 1 до 10, а также получены критические значения геометрического фактора Γ_c .

Полученные теоретические значения Γ_c заметно отличаются от результатов работ [1, 2], однако оказались близки к нашим экспериментальным данным. Обсуждаются возможные причины расхождения результатов, в частности, влияние размера сетки области вычислений на значения Γ_c .

[1] B.-J. Liang and S.H. Chen, *J. Appl. Phys.*, 1992, **71**, 2189. DOI: 10.1063/1.351115

[2] Ellis P., Huang S., Klaneček S. et al., *Phys. Rev. E*, 2018, **97**, 040701. DOI: 10.1103/PhysRevE.97.040701

С.Р. ЫШЫҚДЕМИР¹, П.С. ЗАХАРОВА¹, Б.А. УМАНСКИЙ², Д.И. ПРОХОРОВ¹,
С.В. ПАСЕЧНИК¹, А.В. ДУБЦОВ¹

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ Курчатовский институт

ВЛИЯНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ БЕЛКОВ НА ПЛЕНКИ НЕМАТИЧЕСКОЙ СМЕСИ ДОПИРОВАННОЙ ДИХРОИЧНЫМ КРАСИТЕЛЕМ

Нематические жидкие кристаллы (НЖК) являются перспективными материалами для использования в качестве датчиков химических и биологических примесей в различных средах. В настоящее время хорошо известно, что молекулы НЖК на основе производных цианобифенилов на границе раздела с водой ориентируются в плоскости границы. Присутствие амфифильных молекул в воде, контактирующей со слоем НЖК, приводит к формированию гомеотропной ориентации нематика на границе раздела данных сред. Для регистрации изменения ориентации нематика на границе раздела с водой мы использовали так называемый эффект «гость-хозяин». Для этого в НЖК растворялся дихроичный краситель с положительным дихроизмом. При ориентации директора НЖК в плоскости границы раздела поглощение дихроичного красителя максимально, а в случае гомеотропной ориентации минимально. Таким образом, по изменению поглощения света дихроичного красителя, растворенного в НЖК, мы можем судить об изменении ориентации директора на границе раздела НЖК с водой.

В отличие от амфифильных молекул, присутствие белковых молекул в воде вызывает планарную ориентацию легкой оси НЖК на границе раздела НЖК-вода. Таким образом, для регистрации белков в воде необходимо наличие исходной гомеотропной/наклонной ориентации, отличной от планарной ориентации НЖК на границе с водной средой, что не обеспечивают нематики на основе цианобифенилов. Поэтому в данной работе мы использовали в качестве НЖК смесь слабо и сильно полярных мезогенов, а именно, слабо полярного ЖК-440 и сильно полярного 5СВ в соотношении (0,75:0,25). В качестве дихроичного красителя с положительным дихроизмом использовался КД-184 с концентрацией 0,5%.

Объектом исследования являлась смесь НЖК с дихроичным красителем, ограниченная порами сетки для электронной микроскопии, в условиях контакта с водой и водным раствором белка. В настоящей работе представлены результаты исследования оптических свойств и внутреннего упорядочения нематической смеси, которая подвергалась воздействию водного раствора белка – бычьего сывороточного альбумина (БСА).

Поляризационно-оптические наблюдения показали наличие темного оптического состояния при контакте НЖК с водой для инъекций, что соответствовало гомеотропной ориентации на водной границе раздела. Наличие спонтанной гомеотропной ориентации объясняется разрушением димерных молекул 5СВ с образованием мономеров (в том числе ассоциатов молекул ЖК-440/5СВ), которые обладают амфифильными свойствами. В условиях присутствия БСА в воде с концентрацией 1,1 мг/мл темное оптическое состояние образца, наблюдаемое при скрещенных поляризаторах, менялось на светлое, что свидетельствовало о трансформации поверхностной и объемной ориентации НЖК от гомеотропного состояния к планарному. При этом анализ микроскопических изображений, полученных без поляризаторов, показал уменьшение яркости пикселей при добавлении в воду водного раствора БСА. Таким образом, смесь НЖК ЖК-440/5СВ с дихроичным красителем может быть эффективно использована для регистрации присутствия белков в водной среде без меток и поляроидов.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSFZ-2026-0007).

С.В. ЯКОВЛЕВ¹, Н.И. ОСИПОВ², Е.В. СУСЛОВА²

¹ИОНХ РАН им. Н.С. Курнакова, Москва, Россия

²Химический факультет, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИТНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ НАПОЛНИТЕЛЕЙ SiO₂-ПОЛИВИНИЛИМИДАЗОЛ ДЛЯ АНТИКОРРОЗИОННЫХ ПОКРЫТИЙ

Поверхность корпусов судов и кораблей покрывают полимерными красками с целью повышения антикоррозионной устойчивости. В состав красок добавляют различные соединения, например, пигменты, красители, а также биотоксичные соединения Cu(I), Cr, Ag и др., препятствующие обрастанию корпусов живыми организмами и последующей биокоррозии. Известно, что введение в состав красок частиц SiO₂, Al₂O₃, TiO₂ и др. также способствует существенному улучшению антикоррозионных характеристик [1].

Для получения органо-неорганических композитов на основе наночастиц аморфного SiO₂, ковалентно связанных с поливинилимидазолом (ПВИ) – адгезионной добавкой в антикоррозионные краски, – предложен двухэтапный синтез, заключающийся в модификации поверхности SiO₂ виниловыми радикалами с последующей сополимеризацией с винилимидазолом. Поверхностно-модифицированный SiO₂ получали обработкой его суспензий в воде или спирте триметоксивинилсиланом. Композит SiO₂@ПВИ синтезировали при сополимеризации поверхностно-модифицированного SiO₂ со свежеперегнанным винилимидазолом. Состав и структура всех промежуточных и конечных продуктов подтверждены методами ИК-спектроскопии, термогравиметрического анализа, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопией. Полученные органо-неорганические композиты SiO₂@ПВИ использованы в качестве 0.05 мас. % добавки в коммерчески доступную краску на основе поливинилхлорида.

[1] Tejjido R., Ruiz-Rubio L., Echaide A.G. et al., State of the art and current trends on layered inorganic-polymer nanocomposite coatings for anticorrosion and multi-functional applications, *Progress in Organic Coatings*, 2022, **163**, 106684.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

А.И. АЛЕКСАНДРОВ¹, Т.В. ПАШКОВА^{1,2}, М.С. ГРУЗДЕВ³¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия²Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России, Иваново³Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОЛИ(ПРОПИЛЕНИМИНОВОГО)ДЕНДРИМЕРА ТРЕТЬЕЙ ГЕНЕРАЦИИ

Представляемая работа посвящена исследованию дендримера 3,4-п-децилоксибензоил поли(пропиленимина) 3-ей генерации (D3) и является продолжением работ по рентгеноструктурным исследованиям низших (0-ой, 1-ой и 2-ой) генераций дендримера этой природы [1, 2], в которых рассматривался ряд таких вопросов как молекулярная конформация, способность кристаллизоваться, жидкокристаллический полиморфизм, возможность ориентации дендримера магнитным и электрическим полями, характер фазовых переходов и структурные превращения при фазовых переходах. Следует отметить, что по результатам цитируемых работ вопросы, связанные со способностью кристаллизоваться и с возможностями полевой ориентации для дендримера D3 являются уже не актуальными. Что касается его конформации, то она по результатам молекулярного моделирования имеет форму плоского диска, но с существенным зазором между правой и левой частями диска (Рис. 1).

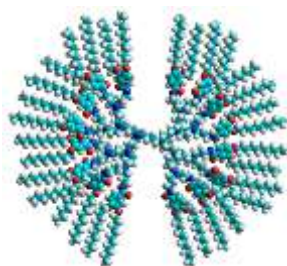


Рисунок 1 – Конформация дендримера D3

Исследование структуры дендримера проводилось в температурном диапазоне от комнатной температуры до температуры перехода в изотропную фазу (260 °С) с помощью малоугловой рентгеновской камеры КРМ-1. Использовалось фильтрованное Cu K α излучение (Ni фильтр). В ходе эксперимента были получены дифрактограммы, соответствующие колончатой структурам, существенно отличающиеся по угловым положениям некратных малоугловых рефлексов и характером широкоугловых рефлексов. Однако, рассчитанные параметры колончатых структур не соответствуют ожидаемой гексагональной упаковке колонок. Соотношение параметров соответствует проекциям центров колонок, образующих косоугольную сетку, которая при более высокой температуре преобразуется в ортогональную. При этом параметры колончатой структуры существенно меньше размеров плоской молекулы, что позволяет сделать заключение об изогнутой конформации молекулы D3. На температурных зависимостях структурных параметров, соответствующих колончатой и внутриколончатой структурам, видны два фазовых перехода. По ходу этих зависимостей в окрестностях переходов первый переход можно отнести к растянутому переходу 1-го рода (соответствуют сильному пику на ДТА диаграмме). Зависимости параметров в окрестностях второго перехода имеют разную форму (соответствуют слабому ДТА пику), что позволяет сделать вывод о переходе 1-го рода для колончатой структуры (резкое уменьшение параметра при фазовом переходе) и переходе 2-го рода для внутриколончатой структуры (критическое поведение параметра в окрестности перехода), иначе говоря, о 2-х фазном поведении структуры дендримера при этом фазовом переходе.

[1] Т.В. Пашкова, А.И. Александров, М.С. Груздев, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2017, **17**(3), 83-92.

[2] А.И. Александров, Т.В. Пашкова, М.С. Груздев, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2021, **21**(3), 84-91.

Р.Д. БАЛАБАНОВ, Т.П. ДЬЯЧКОВА
Тамбовский государственный технический университет

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ ПРЕССОВАНИЯ НА СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОКСИДОМ ГРАФЕНА

При получении изделий из углеродных композитов методом прессования с последующим обжигом важной задачей является поиск оптимального давления. Оптимальную величину удельного давления при прессовании невозможно рассчитать теоретически и ее устанавливают экспериментально для каждого вида изделий. При этом следует учитывать, что свойства обожженных изделий находятся в сложной зависимости от плотности и от усадки при обжиге, на которую в свою очередь влияет плотность спрессованных заготовок. Известно, что коэффициент усадки зависит от плотности «зеленой» заготовки, которая является функцией давления при прессовании, причем, чем меньше плотность, тем больше усадка [1].

В работе исследовано влияние удельного давления прессования в диапазоне 180–220 МПа на характеристики композита, полученных в несколько стадий. Первоначально проводилось совмещение искусственного графита марки МПГ-7 (фракция -30+0 мкм), нитрида бора (дисперсность менее 30 мкм) и оксида графена (ООО «НаноТехЦентр», г. Тамбов) в мельнице ножевого типа. Данный метод обеспечивал гомогенизацию состава при сохранении слоистой морфологии наполнителей. На втором этапе полученную шихту смешивали с графитом (фракция -63+30 мкм) и высокотемпературным пеком в смесителе с Z-образными лопастями при температуре 230 °С в массовом соотношении 21:39:40. После охлаждения и измельчения полученной массы производилось прессование цилиндрических заготовок. Финальная стадия включала обжиг заготовок до температуры 900 °С.

Таблица 1 – Физико-механические характеристики опытных образцов до и после обжига.

Удельное давление, МПа	Плотность после прессования, г/см ³	Плотность после обжига, г/см ³	Пористость, %	Предел прочности при сжатии, МПа
180	1,60	1,71	14,32	82,80
200	1,62	1,75	12,70	98,74
220	1,64	1,75	11,54	-

В ходе эксперимента установлено, что повышение удельного давления прессования до 220 МПа является избыточным, так как приводит к образованию трещин. Наилучшие результаты достигнуты при давлении 200 МПа: данное значение обеспечивает оптимальную плотность «зеленой» заготовки, что в процессе последующего обжига позволяет получить композит с высокой прочностью и минимальной для бездефектных образцов пористостью.

Результаты проведенного исследования показывают, что удельное давление прессования является критическим технологическим параметром, определяющим структурно-механические характеристики и эксплуатационную надежность углеродных композитов на основе пековой матрицы и слоистых наполнителей. Экспериментально установлено, что оптимальное значение давления обеспечивает необходимую плотность упаковки частиц и прочность контактов в «зеленой» заготовке, позволяя достичь после обжига максимального предела прочности при сжатии при сохранении целостности структуры.

[1] М.И. Рогайлин, Е.Ф. Чалых, Справочник по углеграфитовым материалам, 1974, 4, 112–118.

Г.А. БИТКОВ¹, А.С. МЕРЕКАЛОВ², Р.В. ТАЛЬРОЗЕ

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, ФФФХИ, Москва, Россия

²Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЖК-МАТРИЦ С ФОТОХРОМНЫМИ ДОБАВКАМИ

Фотохромные жидкие кристаллы (ЖК) привлекают внимание благодаря возможности обратимого изменения оптических и диэлектрических свойств под действием света. Перспективным направлением является создание светуправляемых материалов для оптических переключателей, сенсоров и адаптивных покрытий.

Цель данной работы – исследование изменения диэлектрических характеристик нематической ЖК-матрицы при введении фотохромных добавок различного строения и концентрации и определение энергии активации процессов дипольной релаксации.

Объектом исследования служила смесевая нематическая ЖК-матрица (НЖК) с температурой изотропизации 64 °С, допированная фотохромными азохромофорами разной концентрации (1 – 10%) АХ-7 и АХ-8, способных к *транс-цис*-изомеризации [1]. Для получения композита их смешивали в необходимом соотношении и нагревали до 100°С градусов, выдерживая до полного растворения азохромофора в нематической матрице. Измерительная ячейка представляла собой плоский конденсатор с ИТО-электродами и зазором 5 мкм. Диэлектрические параметры измеряли с помощью LCR-метра ET4510 в частотно-температурном диапазоне 10 Гц – 100 кГц при нагреве и охлаждении от комнатной температуры до 80 °С с амплитудой сигнала 0,1 В.

По полученным данным рассчитана диэлектрическая проницаемость ϵ' . Температурная зависимость ϵ' при частоте 10 кГц демонстрирует резкое изменение параметра проницаемости при температурах, соответствующих фазовому переходу ЖК–ИЖ (жидкий кристалл – изотропная жидкость). Эта температура хорошо согласуется с данными дифференциальной сканирующей калориметрии. По частотным зависимостям диэлектрических потерь построены аррениусовские графики в координатах $\ln(f) - 1/T$ и рассчитаны энергии активации для разных наблюдаемых фаз.

Изучение диэлектрических релаксационных процессов в смесевых композитах на основе нематической ЖК-матрицы с разными азохромофорами показало значительное различие энергий активации дипольной релаксации для ЖК и изотропной фаз. В частности, для систем с 10% концентрацией азохромофоров АХ-7 и АХ-8 для данного фазового перехода, инициированного температурным воздействием, значение энергии активации релаксации увеличивается практически одинаково по отношению к исходной ЖК-матрице. Напротив, в случае фотоиндуцированного фазового перехода в изотропное состояние различие в энергиях активации релаксационных процессов оказывается весьма существенным. В композите с хромофором АХ-7 это расхождение энергий значительно меньше, нежели в случае добавления хромофора АХ-8. Поскольку ключевую роль в фотоинициированном фазовом переходе ЖК–ИЖ играет изменение соотношения *транс-цис*-конформеров, вследствие чего и происходит переход «порядок–беспорядок», то исходное различие в концентрациях допантов неизбежно повлияет и на изменение энергии активации.

Исследование выполнено в рамках Госзадания ИНХС РАН.

[1] А.С. Мерекалов, О.Н. Карпов и др., *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25**(3), 34-45. DOI: 10.18083/LCAppl.2025.3.34

А.И. ГАЛЕЕВА, А.Н. БЕЗРУКОВ, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

ГИБРИДНЫЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ СУРФАКТАНТОВ С ЛЮМИНОФОРАМИ ДЛЯ ТРАНСПОРТА ЛЕКАРСТВЕННОГО СРЕДСТВА

Структуры лиотропных жидких кристаллов (ЛЖК), широко распространенные в биологических системах, таких как клеточные мембраны, благодаря своей биосовместимости и структурной универсальности открывают возможности для инновационных способов доставки лекарств [1]. Исследования в этой области открывают перспективы для развития персонализированной медицины, в рамках которой лечение может быть адаптировано под индивидуальные потребности пациента [2]. Анизотропные люминесцентные материалы на основе лиомезофаз и углеродных «голубых» точек являются биосовместимыми средами, перспективными для целей тераностики. Микрофлюидные каналы позволяют регулировать их свойства в условиях, имитирующих биологические капиллярные системы [3].

В данной работе изучена возможность получения новых препаратосодержащих гибридных лиотропных сред на основе монодецилового эфира тетраэтиленгликоля ($C_{12}EO_4$) и «голубых» углеродных точек (bCD) в водно-деканольных средах. В качестве лекарственного средства (ЛС) использовался Ксимедон (Хум, 1 мас. %), обладающий выраженными противовоспалительным, ранозаживляющим, иммуностимулирующим и противоожоговым действием [4]. Исследовано ЖК поведение комплексных систем с ЛС. Методом поляризационной оптической и люминесцентной микроскопии установлена гомогенность полученных лиомезофаз (Рис. 1). Определены температурные границы образования лиотропных мезофаз. На основании полученных результатов вискозиметрии системы $C_{12}EO_4/H_2O/dec/Хум$ и $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/dec/Хум$ (45/49/5/1 мас. %) относятся к псевдопластичным системам с установленным пределом текучести и наиболее оптимальной для них является модель Кэссона, что важно при использовании трансдермальных системах доставки. Проведен сравнительный анализ ориентационного поведения и оптических свойств статичных композитов после введения в микрофлюидный канал.



Рисунок 1 – Микрофотографии образцов в поляризованном свете $C_{12}EO_4/H_2O/dec/Хум$ (а) и $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/dec/Хум$ (б), $\times 100$

Таким образом, полученные гибридные препарат-содержащие системы открывают возможности для разработки микрофлюидных устройств для управления супрамолекулярной организацией, оптическими свойствами композитов ЛЖК с углеродными точками в моделях биологических капиллярных сред для решения задач молекулярной диагностики и биомедицины.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 25-33-00354.

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

[2] A. Behera, A.K. Nayak, R.K. Mohapatra, A.A. Rabaan. Smart micro-and nanomaterials for pharmaceutical applications. – CRC Press, 2024, 39-49.

[3] A. Bezrukov, A. Galeeva, A. Krupin, Y. Galyametdinov, *Nanomaterials*, 2025, **15**(21), 1682.

[4] С.Г. Измайлов, Г.А. Измайлов, М.Ю. Аверьянов, В.С. Резник, Ксимедон в клинической практике. 2001.

Н.И. ГИРИЧЕВА, Е.А. ЛАПЫКИНА, А.М. САЛЬКОВА, А.И. СМИРНОВА, Н.В. УСОЛЬЦЕВА
 НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ИЗМЕНЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ПРОИЗВОДНЫХ ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНА ПРИ ОБРАЗОВАНИИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Распространенным способом индуцирования мезогенности является добавление второго компонента, который способен образовывать супермолекулы с первым компонентом. В данной работе рассмотрены вопросы, связанные с изменением электронных свойств производных тристриазоло-триазина t_1 -ТТТ при образовании водородосвязанных комплексов с незамещенной бензойной кислотой (БК).

Выполнено квантово-химическое моделирование (метод DFT/B97D/6-311G**, программа Gaussian'09) геометрического и электронного строения производных t_1 -ТТТ- X_3 , где $X = H, Ph, NH_2$, а также их Н-комплексов t_1 -ТТТ- $X_3 \dots$ БК.

При образовании Н-комплексов в зависимости от природы X происходят различные изменения (повышение/понижение) энергий ВЗМО и НСМО, изменение $E_{gap} = E_{НСМО} - E_{ВЗМО}$, влияющее на оптические свойства системы. Особое внимание уделено изменению состава граничных МО при переходе от соединений t_1 -ТТТ- X_3 к их Н-комплексам t_1 -ТТТ- $X_3 \dots$ БК, поскольку эти характеристики обычно рассматриваются при определении структур, обладающих термически активированной замедленной флуоресценцией (TADF), и при определении каналов переноса заряда в колончатых мезофазах производных ТТТ.

В Н-комплексах происходит полное разделение локализации электронной плотности на ВЗМО и НСМО (Рис. 1). Причем в комплексе t_1 -ТТТ...БК бензойная кислота ведет себя как электронодонор (повышает энергию ВЗМО), а в комплексе t_1 -ТТТ-(NH_2) $_3$...БК – как акцептор (понижает энергию НСМО). Если Н-комплексы смогут формировать колончатые мезофазы, то это может привести к изменению каналов переноса заряда. В Н-комплексе t_1 -ТТТ...БК электроны будут транспортироваться через остов ТТТ (см. вид НСМО), в то время как в Н-комплексе t_1 -ТТТ-(NH_2) $_3$...БК, наоборот, через остов будут транспортироваться «дырки».

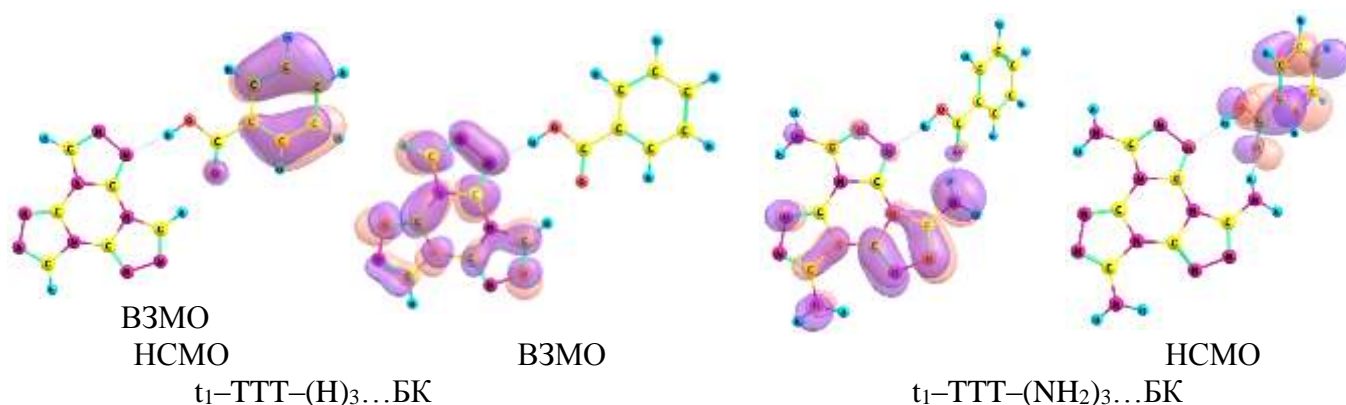


Рисунок 1 – Вид граничных орбиталей для Н-комплексов БК с производными t_1 -ТТТ- X_3 ($X = H, NH_2$)

В приведенных примерах Н-комплексов t_1 -ТТТ-(X) $_3 \dots$ БК показана различная роль БК, которая может приводить к усилению или ослаблению донорных/акцепторных свойств исходного соединения, к изменению направления атаки нуклеофилами и электрофилами, способствовать переносу электрона с одной части Н-комплекса на другую и возможности проявлять термически активированную замедленную флуоресценцию.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (FZZM-2026-0004).

КВАНТОВЫЕ ЛИНДБЛАДАНЫ В ФИЗИКЕ АКТИВНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Активные жидкие кристаллы (АЖК) определяются как лиотропные ЖК-системы, содержащие активные агенты и находящиеся в неравновесном термодинамическом состоянии [1]. АЖК реализуются в коллоидных нематических фазах, молекулярных моторах, колониях бактерий, косяках птиц, в полимерных материалах и др., им присуще коллективное движение и эффекты синхронизации. Элементы устройств с АЖК применяются в молекулярной электронике [2], в процедурах доставки лекарств в медицине, в топofотонике [3], в смазочных материалах [4], нанoeлектромеханических и сенсорных системах [5] и пр.

В феноменологическом подходе АЖК описываются стандартными уравнениями гидродинамики с тензорным параметром порядка Q и дополнительным членом, соответствующим активному напряжению, которое возникает в результате взаимного скольжения между частицами АЖК или подложкой [1]. Активное движение характеризуется малыми числами Рейнольдса.

В теоретических подходах к описанию фазовых переходов в АЖК также используются квантовые аналогии, отражающие наличие дополнительных степеней свободы, связанных с самодвижением [6,7]: в частности, предложена аналогия потока частиц АЖК с движением электронов, связанных сильным спин-орбитальным взаимодействием, при этом уравнение Шредингера нерелятивистской квантовой механики используется в связи с классической статистической механикой, описываемой уравнением диффузии.

Кинетическое уравнение Линдблада диссипативных систем типа АЖК имеет вид [6]:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}] + D(\hat{\rho}),$$

где $\hat{\rho}$ – матрица плотности системы, \hat{H} – гамильтониан системы, описывающий эволюцию системы в когерентных членах, и $D(\hat{\rho})$ – член, отвечающий за диссипативную динамику.

Мы представляем обзор современных моделей, использующих квантовые уравнения Линдблада при описании фазовых переходов в АЖК, включая системы с топологическими дефектами, и их применение для оценки и предсказания оптических, реологических, электрических и др. свойств различных классов АЖК систем, определяющих их эксплуатационные характеристики.

Работа выполнена в рамках финансирования государственного задания НИЦ “Курчатовский институт”.

- [1] И.С. Арансон, *УФН*, 2019, **189**(9), 955-974. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2018.10.038433>
- [2] D. Xiang, X. Wang, Ch. Jia, T. Lee, X. Guo, *Chem. Rev.*, 2016, **116**, 4318–4440. DOI: [10.1021/acs.chemrev.5b00680](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00680)
- [3] F. Recabal and F. Herrera, *J. Chem. Phys.*, 2020, **152**, 100902. <https://doi.org/10.1063/5.0319363>
- [4] A. Jha, Ya. Amarouchene, and Th. Salez, *J. Fluid Mech.*, 2023, **977**, A50. DOI: [10.1017/jfm.2023.1016](https://doi.org/10.1017/jfm.2023.1016)
- [5] M. L. Perrin, R. Frisenda, M. Koole, J.S. Seldenthuis, J. A. Celis Gil, H. Valkenier, J. C. Hummelen, N. Renaud, F.C. Grozema, J. M. Thijssen, D. Dulic, H.S.J. van der Zant, *Nature Nanotechnology*, 2014, **9**, 830-834. DOI: [10.1038/NNANO.2014.177](https://doi.org/10.1038/NNANO.2014.177)
- [6] R. Khasseh, S. Wald, R. Moessner, Ch.A. Weber, M. Heyl, *Phys. Rev. Lett.*, 2025, **135**, 248302. DOI: [10.1103/rd46-hr3q](https://doi.org/10.1103/rd46-hr3q)
- [7] B. Loewe, A. Souslov, P.M. Goldbart, *New J. Phys.*, 2018, **20**, 013020. DOI: [10.1088/1367-2630/aa9cdc](https://doi.org/10.1088/1367-2630/aa9cdc)

Е.А. ЕРШОВА¹, Е.А. ПЕТУХОВА¹, А.А. КОЧЕТОВА², Е.А. ДАНИЛОВА¹

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²ФГБУ СЭУ ФПС ИПЛ по Ивановской области, Иваново, Россия

СОЗДАНИЕ НОВЫХ ОГНЕЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ ДЛЯ ПОЖАРООПАСНЫХ ДРЕВЕСНЫХ МАТЕРИАЛОВ

На сегодняшний день одним из наиболее распространённых строительных материалов является древесина и её производные. Можно с уверенностью сказать, что древесина долгие годы будет востребована в связи с её свойствами: экологичностью, простотой механической обработки, прочностью, а также возобновляемостью ресурсов.

Наиболее существенным недостатком древесины и материалов на её основе является высокая пожарная опасность. На основании нормативных документов, а также мирового исследовательского опыта можно сказать о том, что необходимый уровень пожарной безопасности строительных материалов и изделий можно обеспечить с помощью средств огнезащиты, к которым в том числе относятся огнезащитные средства (ОЗС) и огнебиозащитные составы (ОБЗС) для поверхностной и глубокой пропитки изделий из древесины.

С помощью антипиренов можно замедлить или подавить отдельные стадии горения древесного материала. Эффективные антипирены изменяют механизм пиролиза, уменьшая выход горючих продуктов, или ингибируют пламенное горение, в результате чего количество тепла при экзотермическом процессе окисления в газовой фазе уменьшается. В качестве антипиренов обычно используют вещества, в молекулах которых содержатся такие элементы, как галогены, фосфор, азот, бор, металлы. В основе применения антипиренов лежит их плавление или разложение при нагреве. В одном случае часть тепла расходуется на плавление антипиренов, что повышает температуру воспламенения. В другом случае негорючие газы, выделяющиеся при разложении, смешиваясь с воздухом или создают изолирующий слой, который препятствует доступу кислорода к поверхности древесины. При разложении азотсодержащих антипиренов выделяются газы, поддерживающие горение и разбавляющие горючие летучие продукты пиролиза древесины.

В работе были получены различные композиции, включающие полимер и по меньшей мере одно азотсодержащее соединение, имеющее температуру плавления в диапазоне от 149 до 212 °С. Было доказано, что азотсодержащие антипирены действуют синергически с фосфорсодержащими антипиренами, могут взаимодействовать с другими антипиренами и участвовать в сложных химических реакциях для синтеза антипиренов. Композиции выделяют негорючие газы из азотсодержащего соединения при воздействии пламени. В качестве азотсодержащих соединений были выбраны некоторые гетероциклы и линейные соединения.

В экспериментальной части работы образцы древесины обрабатывались огнезащитными составами методом кистевого нанесения, что обеспечивало равномерное распределение композиции по поверхности материала и формирование защитного слоя заданной толщины. После нанесения составов образцы высушивались и выдерживались до достижения стабильной массы. Далее высушенные образцы подвергались воздействию открытого пламени горелки с целью оценки их огнезащитной эффективности. В ходе испытаний анализировались изменения состояния поверхности, характер горения и степень термического разрушения материала.

По результатам проведённых экспериментов установлено, что предложенные составы проявляют положительный эффект, способствуют снижению интенсивности горения и формированию более устойчивого защитного слоя при воздействии открытого пламени.

Н.В. ЖАРНИКОВА, Н.В. БУМБИНА, О.Б. АКОПОВА, А.И. СМИРНОВА, Н.В. УСОЛЬЦЕВА
НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4,5-ТЕТРАКИС(1,3,4-ОКСАДИАЗОЛИЛ)-БЕНЗОЛА КАК ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Одной из основных задач современной химии является получение новых материалов с перспективными для применения свойствами. К таким соединениям относятся звездообразные структуры с фрагментами оксадиазола, обладающие фотолюминесцентными и мезогенными свойствами [1]. Ранее [2] нами были синтезированы немезогенные тетразамещенные 1,2,4,5-бензолтетракарбонной кислоты с фрагментами оксадиазола, которые, как было показано в [3], демонстрируют в растворе хлороформа сине-голубую флуоресценцию.

Вышеизложенное послужило основанием для синтеза и изучения физико-химических свойств новых производных 1,2,4,5-тетраakis(1,3,4-оксадиазолил)бензола (Рис. 1) с возможным проявлением ими люминесцентных и жидкокристаллических свойств.

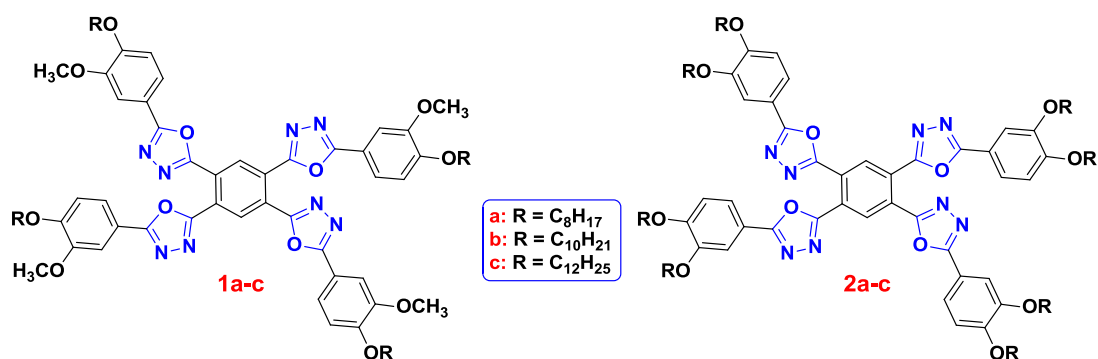


Рисунок 1 – Структурные формулы производных 1,2,4,5-тетраakis(1,3,4-оксадиазолил)бензола (1, 2)

Было синтезировано шесть производных 1,2,4,5-тетраakis(1,3,4-оксадиазолил)бензола. Индивидуальность данных соединений контролировалась методом тонкослойной хроматографии. Полученные гомологи были охарактеризованы современными методами органической химии (¹H ЯМР, масс-спектрометрии и электронной спектроскопии). Мезоморфные свойства этих соединений были изучены методами поляризационной оптической микроскопии и дифференциальной сканирующей калориметрии. Установлено, что соединения серии **2** проявляют мезоморфизм, а люминесцентные свойства наблюдаются у всех синтезированных соединений в органических растворителях различной полярности и в твердой фазе.

Работа поддержана Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2026-0004).

[1] О.Б. Акопова, Н.В. Жарникова, А.И. Смирнова, Н.В. Бумбина, Н.В. Усольцева, Органические и гибридные наноматериалы: получение, исследование, применение: монография / под ред. В.Ф. Разумова, М.В. Клюева. Иваново: Иван. гос. ун-т, 2023. 404 с. (гл. 8, С. 289-336).

[2] N.V. Usol'tseva, O.B. Akopova, A.I. Smirnova, M.I. Kovaleva, N.V. Bumbina, N.V. Zharnikova, *Phase Transit.*, 2017, **90**(8), 800-807. DOI: 10.1080/01411594.2017.1309405

[3] О.Б. Акопова, Н.В. Жарникова, А.И. Смирнова, Н.В. Бумбина, Н.В. Усольцева, Органические и гибридные наноматериалы: получение, исследование, применение: монография / под ред. В.Ф. Разумова, М.В. Клюева. Иваново: Иван. гос. ун-т, 2021. 368 с. (гл. 8, С. 307-361).

А.Г. КАЛУГИН

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

ОБ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ОЦЕНКЕ ДИВЕРГЕНТНОЙ КОНСТАНТЫ В ЭНЕРГИИ ФРАНКА НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

Свободная энергия Франка нематических жидких кристаллов в наиболее общем случае может быть записана в виде

$$2F_V = K_{11}(\operatorname{div}\vec{n})^2 + K_{22}(\vec{n} \cdot \operatorname{rot}\vec{n})^2 + K_{33}|\vec{n} \times \operatorname{rot}\vec{n}|^2 + K_{24}(\nabla_i n_j \cdot \nabla^j n^i - (\nabla_k n^k)^2)$$

причем последнее слагаемое имеет дивергентную форму, поэтому не вносит вклад в уравнения движения или равновесия, но входит в граничные условия в случае слабой ориентации директора на границе. В настоящее время значение константы K_{24} измерено недостаточно точно, с существенным разбросом полученных результатов (см. таблицу и ссылки в [1]). В случае, когда K_{24} достаточно большая по сравнению с другими константами, энергия Франка перестает быть положительно определенной функцией и в слое нематика даже в случае плоской границы и однородных внешних воздействиях могут возникать периодические структуры [2]. При этом наименьшее значение K_{24} , допускающее такие решения будет для однородного слоя с невозмущенной планарной ориентацией и плоскостью возмущений, ортогональной невозмущенному направлению директора [3].

В представленной работе проведена численная оценка дивергентной константы Франка. Для оценки использованы экспериментальные данные работы [4], в которой наблюдались периодические структуры в тонком слое нематика для некоторых видов п-цианобифенилов. Используя полученную авторами экспериментальную зависимость периода таких структур от толщины слоя, можно дать оценку величины дивергентной константы K_{24} . Кроме того, значение предельной толщины слоя, в котором наблюдаются такие структуры, позволяет оценить величину анизотропного коэффициента в поверхностной энергии для модели Рапини-Папулара.

[1] Jianfei Li, Mengchen Gao, Lizhi Zhu and Yanjun Zhang, *Mater. Res. Express*, 2019, **6**(8), 0850b2-1-9. DOI 10.1088/2053-1591/ab2446

[2] A.D. Kiselev, *Phys. Rev. E*, 2004, **69**, 041701-1-13. DOI: 10.1103/PhysRevE.69.041701

[3] А.Г. Калугин, *Известия РАН: механика жидкости и газа*, 2015, **2**, 3-7.

[4] U. Delabre, C. Richard, A.M. Cazabat, *Phys. Chem. B*, 2009, **113**(12), 3647-3652. DOI: 10.1021/jp8062492

А.А. КОНОВАЛОВА, Н.И. ГИРИЧЕВА, Е.А. ЛАПЫКИНА, З.А. АБРОМАЙТИС
 НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ГЕОМЕТРИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ ФЕНИЛ-ТРИС-ОКСАДИАЗОЛОВ С -Ph И -Ph(OCH₃)₂ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Соединения на основе 1,3,5- и 1,2,4-трис[5-фенил-(1,3,4)-оксадиазол-2-ил]бензола имеют широкий спектр применения в органических светодиодах (OLED), полевых (OFET) и тонкопленочных транзисторах (OTFT), а также в фотоэлектрических элементах, и обладают как люминесцентными, так и жидкокристаллическими свойствами при наличии длинных алкилокси-углеводородных заместителей.

Выполненный квантово-химический расчет (DFT/B3LYP/6-311G**, Gaussian09) показал, что исследуемые молекулы 1 и 3 (Рис. 1а) имеют по два плоских конформера с относительными энергиями: 0 и 1.25 (молекула 1) и 0 и 1.74, ккал/моль (молекула 3). В то же время молекулы 2 и 4 имеют по шесть конформеров, которые отличаются положением оксадиазольных фрагментов относительно центрального фенила и обладают неплоским строением с относительными энергиями: от 0 до 3.21 (молекула 2) и от 0 до 3.46 (молекула 4), ккал/моль. Отметим, что для каждого конформера был найден энантиомер.

Расчет электронных спектров поглощения (ЭСП) в газовой фазе (TD-DFT/B3LYP/6-311G**) выполнен для структур 1–4, представленных на Рис. 1а. Определены энергии и параметры первых восьми синглетных возбужденных состояний. На Рис. 1б представлено по три электронных перехода для каждой молекулы 1–4, обладающих ненулевой силой осциллятора ($f > 0$), которые являются оптически разрешенными и определяют наиболее интенсивные полосы в спектре.

Как при добавлении алкилокси-заместителя, так и при переходе от симметричной структуры к несимметричной происходит повышение значений энергий ВЗМО и сокращение разницы $\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{НСМО}} - E_{\text{ВЗМО}}$ в ряду молекул 1–4: 4.30 → 3.80 → 3.75 → 3.36 эВ, которая показывает общую тенденцию изменения $\lambda_{\text{полг.}}$.

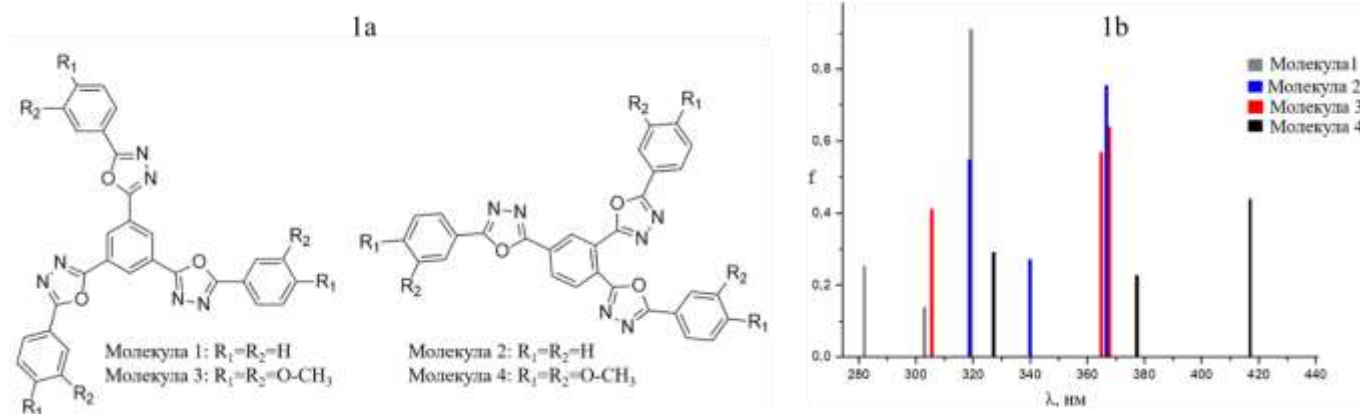


Рисунок 1 – Структура исследуемых молекул (а), электронные спектры поглощения (б)

На диаграмме видно (Рис. 1б), что при переходе от молекулы 1 к молекуле 4 происходит смещение полос поглощения в длинноволновую область видимого спектра, что соответствует тенденции полученной по результатам экспериментальных данных в растворителе (хлороформ) $\lambda_{\text{полг.}}$, нм: 294 → 318 → 329 → 343 для соединений 1–4, соответственно (данные из литературных источников). Отметим, что добавление донорного радикала -OCH₃ и изменение положения заместителей -C₂N₂O-Ph(OCH₃)₂ в центральном фениле оказывает значительное влияние на ЭСП.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (FZZM-2026-0004).

П.В. КОРОЛЁВ^{1,2}, М.А. ШИЛОВ^{1,2}, Т.П. ДЬЯЧКОВА³, А.И. СМИРНОВА¹, Н.В. УСОЛЬЦЕВА¹

¹НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия,

²Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина, Иваново, Россия

³Тамбовский государственный технический университет, Тамбов, Россия

ТРИБОТЕХНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВАЗЕЛИНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ И ИХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ

Разработка высокоэффективных смазочных материалов является одной из ключевых задач современного машиностроения. Перспективным направлением является модификация базовых масел и пластичных смазочных материалов углеродными наноразмерными присадками [1-4], которые способны существенно улучшить антифрикционные и противоизносные свойства. Углеродные нанотрубки (УНТ) привлекают внимание исследователей благодаря своим уникальным физико-механическим свойствам [5], однако их склонность к агрегации требует дополнительной модификации поверхности. В качестве модельного смазочного материала для изучения влияния наноразмерных присадок часто используется химически инертный и доступный вазелин [1]. Согласно литературным данным, вазелин является удобной моделью для изучения реологических и трибологических свойств смазочных композиций (СК), так как его характеристики чувствительны к введению различных углеродных аллотропов [1].

В данной работе исследованы СК вазелина медицинского (VM) с присадками многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ) и МУНТ, модифицированных стеариновой кислотой (МУНТ-St-nc). Концентрации присадок составляли 0,1–1,0 мас. %. Трибологические свойства СК были изучены на специализированной машине трения МТУ-01 на базе Bosch PDB 40, которая предназначена для триботехнических испытаний в широком диапазоне внешних нагрузок и схем испытаний. В нашем случае использованы: схема испытаний «палец–диск», нагрузки 100, 150 и 200 Н.

В ходе триботехнических испытаний выявлено снижение коэффициента трения у СК с присадками по сравнению с базовым VM. Установлено, что минимальные значения коэффициента трения зарегистрированы в дисперсиях VM/МУНТ и VM/МУНТ-St-nc при концентрациях присадок 0,5 и 0,25 мас. %, соответственно.

Полученные экспериментальные данные (коэффициент трения) обработаны методом корреляционно-регрессионного анализа (с учетом факторов: нагрузка, тип и концентрация присадок) на уровне значимости $\alpha = 0,01$ с использованием критерия Стьюдента. Коэффициент множественной корреляции R^2 для полученной модели составил 95 %. Анализ указанных факторов показал, что к увеличению коэффициента трения приводят повышение нагрузки и концентрации добавки, а к уменьшению – замена МУНТ на МУНТ-St-nc, а также совместное действие типа и концентрации присадок.

Работа выполнена с финансовой поддержкой Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2026-0004).

[1] А.С. Парфенов, М.А. Шилов, А.И. Смирнова, Е.В. Берёзина, А.Г. Ткачев, А.А. Бурков, Н.Н. Рожкова, Н.В. Усольцева, *Трение и износ*, 2021, **42**(3), 338-349.

[2] А.А. Гвоздев, А.И. Смирнова, Е.В. Березина, А.В. Дунаев, А.Г. Ткачев, Н.В. Усольцева, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2018, **18**(1), 66-72.

[3] В.И. Комарова, А.И. Комаров, *Материалы международной научно-технической конференции. Гомель: Изд-во ИММС НАН Беларуси*, 2011, 117-118.

[4] С.В. Панин, Л.А. Корниенко, В.О. Алексенко, Ань Нгуен, Л.Р. Иванова, *Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология»*, 2017, **9**, 46-52.

[5] А.Н. Шумаков, В.Е. Юдин, В.М. Светличный, А.Н. Диденко, Н.Н. Богорад, Е.Н. Попова, Д.Г. Летенко, Ю.А. Фадин, А.Н. Соловьёв, *Вопросы материаловедения*, 2006, **46**(2), 158-165.

А.А. КУЗЬМИНА, А.А. БУДАНОВА, И.В. НОВИКОВ, В.А. БУРМИСТРОВ
Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

ИНДУКЦИЯ ХИРАЛЬНОЙ НЕМАТИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В СМЕСЯХ СВ-2 ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПИРОФЕОФОРБИДА НИКЕЛЯ: МЕЗОМОРФНЫЕ, ОПТИЧЕСКИЕ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Целенаправленное легирование нематических жидких кристаллов (ЖК) хиральными добавками является эффективным способом создания спирально закрученных мезофаз с уникальными электрооптическими свойствами. Особый интерес представляют металлокомплексы природных тетрапирролов, сочетающие оптическую активность с возможностью специфических межмолекулярных взаимодействий. В данной работе изучено влияние пирофеофорбида никеля (ПФФБ-Ni) на мезоморфные, диэлектрические и оптические характеристики нематической смеси алкоксицианобифенилов СВ-2.

Показано, что ПФФБ-Ni обладает высокой оптической активностью (удельное вращение – 820,64), а его дипольный момент, рассчитанный квантово-химическим методом, составляет 5,2 D. В спектрах CD зарегистрированы характерные полосы при 299, 394, 421 и 646 нм, для которых рассчитаны факторы диссимметрии g (например, $g_{421} = 0,00137-0,00143$), что подтверждает хиральность допанта.

Методом термомикроскопии установлено, что введение ПФФБ-Ni приводит к линейному снижению температуры просветления смеси СВ-2 ($dT/dn_2 = -1,0500$), что указывает на дестабилизацию нематической фазы. В отличие от безметального аналога, ПФФБ-Ni индуцирует в СВ-2 образование текстур «отпечатков пальцев» (Рис. 1а, б), характерных для хиральной нематической фазы.

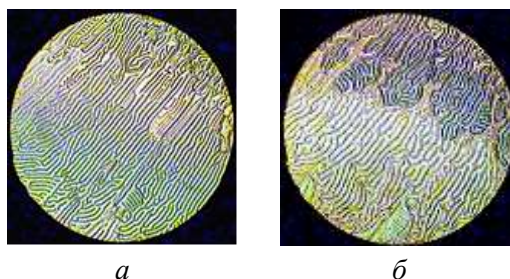


Рисунок 1 – Текстуры «отпечатков пальцев», образующиеся в смесях СВ-2 с ПФФБ-Ni 1,224% при 22 °С (а), смесь СВ-2 с ПФФБ-Ni 1,224% при 69 °С (б)

На основе этих текстур и метода колец Ньютона определены температурные зависимости шага спирали и энергии скручивания β . Для смеси с 1,224% допанта шаг спирали увеличивается с ростом температуры (от 8,8 мкм при 42 °С до 16,5 мкм при 68,5 °С), а β снижается (от 20,05 до 10,72 мкм⁻¹).

Диэлектрические исследования показали, что все смеси сохраняют положительную диэлектрическую анизотропию, однако с ростом концентрации ПФФБ-Ni $\Delta\epsilon$ значительно уменьшается, что свидетельствует о нарушении ориентационного порядка в матрице.

Таким образом, установлено, что пирофеофорбид никеля индуцирует хиральную нематическую фазу в смеси СВ-2, о чем свидетельствует формирование текстур «отпечатков пальцев» и возможность расчета параметров спиральной структуры. ПФФБ-Ni оказывает более сильное дестабилизирующее влияние на мезофазу и существенно снижает диэлектрическую анизотропию исходной ЖК-матрицы.

Работы проводились в рамках гос. задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FZZW-2026-0003).

А.Д. КУРИЛОВ, П.А. КРАСНОВ, С.А. ЗУБКОВ
Государственный университет просвещения, Москва, Россия

ПОТЕНЦИАЛ СОВРЕМЕННЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ДИСПЛЕЕВ ДЛЯ СУБМИКРОННОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ГАЗОВЫХ ПОТОКОВ

Традиционные шлирен-системы ограничены неоднородностью освещения и недостаточной гибкостью настройки. Недавний прогресс в области дисплейных технологий открыл новые подходы к визуализации потоков [1, 2]. В данной работе представлен метод BOS на базе ЖК-дисплея, преодолевающий эти ограничения и достигающий субмикронной точности. Система использует цветовую информацию и высокий динамический диапазон (HDR) современных дисплеев для повышения точности измерений.

Оптическая конфигурация соответствует симметричной схеме: расстояние от дисплея до объекта 37,5 см, расстояние от объекта до камеры 37,5 см. Использовалась камера Canon R6 с объективом 100 мм, регистрирующая 12-битные RAW-изображения. Фоновый узор отображался на ЖК-дисплее MSI PRO MP273 (разрешение 2560×1440). Пропан-бутановая смесь подавалась через сопло диаметром 2 мм при различных потоках; измерения проводились как для холодного газа, так и во время горения.

Собственный конвейер обработки на Python сохраняет 12-битные RAW-данные для обеспечения субпиксельной точности. Многоканальный алгоритм оптического потока обрабатывает RGB-каналы отдельно с последующим усреднением для снижения шума. Реконструкция физических полей преобразует смещения в градиенты показателя преломления через геометрию эксперимента, позволяя вычислять распределения плотности и температуры с использованием соотношения Гладстона–Дейла.

Ключевые достижения включают: субмикронную точность 300 нм среднеквадратичного шума смещений (0,03 пикселя), успешную визуализацию тестовых объектов и снижение шума на 30% по сравнению с монохроматическим BOS благодаря использованию цветовой информации.

Подход на основе дисплея устраняет неоднородность освещения – фундаментальное ограничение классического BOS. Современные дисплеи обеспечивают программируемые фоны с точным пространственным и интенсивностным контролем, а возможности HDR позволяют регистрировать тонкие рефракционные эффекты, ранее недоступные для обнаружения.

Продемонстрировано, что потребительские ЖК-дисплеи могут обеспечивать научные измерения потоков с субмикронной точностью. Масштабируемость метода, от микрофлюидных устройств с использованием микродисплеев до крупномасштабных аэродинамических испытаний со светодиодными панелями, делает его широко применимым в различных инженерных дисциплинах.

Работа выполнена в рамках реализации научно-исследовательского проекта-победителя конкурса на получение гранта федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Государственный университет просвещения» в 2026 году.

[1] В.Е. Schmidt, et al., *AIAA Journal*, 2025, **63**(12), 5028-5058. DOI: 10.2514/1.J065669

[2] D. Rabha, et al., *Experiments in Fluids*, 2025, **66**(8), 147. DOI: 10.1007/s00348-025-04071-4

А.Д. КУРИЛОВ^{1,2}, У.И. ТАРАТОНКИНА¹, А.В. ГУБАРЕВА^{1,2}, И.С. ЧЕКУЛАЕВ^{1,2}

¹Государственный университет просвещения, Москва, Россия

²Московский государственный университет, Москва, Россия

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ОПТИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ

Разработан программный комплекс для моделирования поляризационно-оптических микроскопических (ПОМ) изображений топологических дефектов в нематических жидких кристаллах. Генерация трёхмерных полей директора реализована для ключевых типов дефектов, возникающих в нематических коллоидах [1–4]. Поля директора строятся аналитически с использованием мультипольного разложения и численно на равномерной сетке с пространственным разрешением до 0,05–0,15 мкм.

Расчёт ПОМ-изображений основан на методе матриц Джонса для многослойной анизотропной среды с учётом спектральной зависимости показателей преломления жидкого кристалла 5СВ (модели Коши) и реального спектра источника. Интенсивность формируется интегрированием по длинам волн от 400 до 680 нм с последующим преобразованием в цветовое пространство sRGB с коррекцией баланса белого. Вычисление двулучепреломления для каждого слоя учитывает локальную ориентацию директора и угол падения света. Для коллоидных частиц предусмотрено маскирование области внутри сферы и учёт френелевского пропускания на границе частица – жидкий кристалл.

На основе предложенного подхода смоделированы ПОМ-изображения для пяти типов дефектов при скрещенных поляризаторах. Разработанный комплекс позволяет быстро получать синтетические ПОМ-изображения для произвольных конфигураций директора и может служить инструментом для идентификации типов топологических дефектов в экспериментах, а также для оптимизации параметров коллоидных систем (размер частиц, сила закрепления, ориентация поляризаторов). Все смоделированные изображения и поля директора доступны в виде текстовых файлов для последующего анализа.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-01078, <https://rscf.ru/project/25-23-01078/>.

[1] I.I. Smalyukh, *Annu. Rev. Condens. Matter. Phys.*, 2018, **9**, 207-226. DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-033117-054102

[2] B. Senyuk, et al., *Nature*, 2013, **493**(7431), 200-205. DOI: 10.1038/nature11710

[3] B. Senyuk, et al., *Nature Commun.*, 2016, **7**(1), 10659. DOI: 10.1038/ncomms10659

[4] T.C. Lubensky, et al., *Phys. Rev. E*, 1998, **57**(1), 610. DOI: 10.1103/PhysRevE.57.610

В.А. МОЗГОВА, Н.Г. БИЧАН, Е.Н. ОВЧЕНКОВА, А.А. КСЕНОФОНТОВ, Т.Н. ЛОМОВА
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

ДИАДЫ НА ОСНОВЕ (5,10,15,20-ТЕТРА(1-НАФТИЛ)ПОРФИРИНАТО)ЦИНКА(II) И ФУЛЛЕРО[60]ПИРРОЛИДИНОВ: САМОСБОРКА, СПЕКТРАЛЬНЫЕ, ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Тетрапиррольные макроциклические соединения, благодаря высоким коэффициентам экстинкции и развитой π -сопряжённой системе, представляют интерес для создания донорно-акцепторных систем. В составе таких систем при фотовозбуждении они способны выступать донорами электронов, участвуя в процессах фотоиндуцированного переноса электрона. В работе исследованы реакции координации фуллеро[60]пирролидинов с *мезо*-тетра(1-нафтил)порфирином цинка(II) (ZnNaphP). Методом спектрофотометрического титрования установлено образование донорно-акцепторных комплексов состава 1:1 (диады) с константами устойчивости, представленными на рисунке 1. Из полученных констант видно, что введение алкильных заместителей в фуллеро[60]пирролидин понижает устойчивость комплекса в 2 раза, по сравнению с диадами, содержащими PyC_{60} или (4-Py) $_2\text{C}_{60}$, оставляя значение констант на высоком уровне.

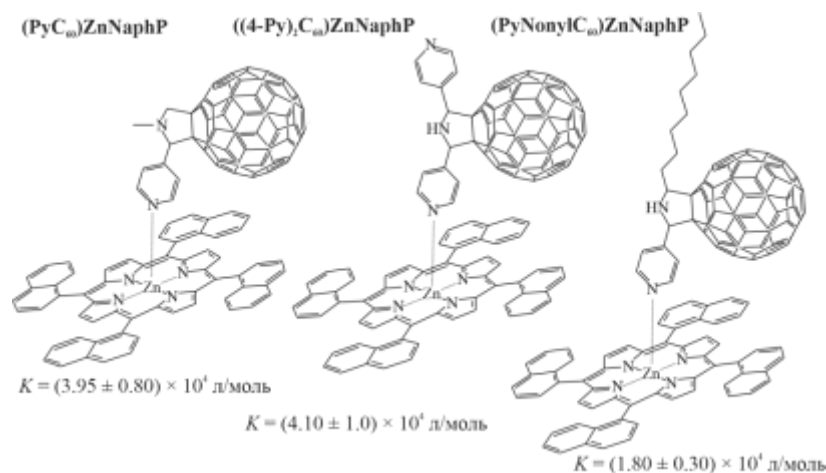


Рисунок 1 – Химические структуры донорно-акцепторных диад

Полученные диады охарактеризованы методами УФ-видимой, флуоресцентной, ИК, ^1H ЯМР спектроскопии. DFT-анализ граничных молекулярных орбиталей и данные циклической вольтамперометрии подтверждают возможность реализации PET с донорного фрагмента ZnNaphP на акцепторный фуллереновый фрагмент. По данным циклической вольтамперометрии значения ВЗМО диад находятся в диапазоне от -5.30 до -5.34 эВ, а НСМО — от -3.89 до -3.97 эВ. Установлено, что уровни НСМО всех диад располагаются выше края зоны проводимости TiO_2 (-4.26 эВ), что указывает на возможность эффективной фотоиндуцированной инжекции электрона в полупроводник. Благодаря наличию двух пиридинных фрагментов (4-Py) $_2\text{C}_{60}$ использован как якорный лиганд для модификации поверхности FTO/ TiO_2 электрода диадой ((4-Py) $_2\text{C}_{60}$)ZnNaphP. Поэтому была собрана сенсibilizированная красителем солнечная ячейка (DSSC) с фотоанодом FTO/ TiO_2 /(4-Py) $_2\text{C}_{60}$ (ZnNaphP). Противоеlectроды изготавливали, нанося пасту Platisol (Solaronix) с последующим отжигом. Межеlectродное пространство заполняли электролитом на основе йодид/трийодидной редокс-пары. Для DSSC ячейки получены следующие фотовольтаические параметры: $J_{sc} = 4.71 \text{ мА} \times \text{см}^{-2}$, $V_{oc} = 0.42 \text{ В}$, $\text{FF} = 67\%$ и $\eta = 1.33\%$, свидетельствующие о стабильном фотоэлектрическом отклике системы. Полученные результаты демонстрируют перспективность порфирин-фуллереновых диад в качестве фотоактивных компонентов для DSSC.

Работа выполнена на оборудовании Центра коллективного пользования научным оборудованием «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований».

О.В. МИШУКОВА¹, М.А. МАРЧЕНКОВА¹, Б.В. НАБАТОВ¹, А.В. КАЗАК^{1,2,3}¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия²Ивановский государственный университет, Иваново, Россия³Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, Россия

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ЛЕНГМЮРА-ШЕФФЕРА ПРОИЗВОДНОГО СУБФТАЛОЦИАНИНА C₃₆H₃₈BClN₆

Фталоцианины – широкий класс соединений, применяемых в медицине, микроэлектронике и нанопотонике, в частности используемых для создания люминесцентных материалов и оптических сенсоров, а также лекарственных и терапевтических препаратов. Однако для сенсоров необходимо формировать слои со строго заданными параметрами. Для обеспечения возможности формирования таких слоев были сформированы малодефектные тонкопленочные материалы и изучены оптические свойства нового синтезированного производного субфталоцианина (АТ-39) с формулой C₃₆H₃₈BClN₆ (Рис. 1а).

Плавное изменение давления изотермы сжатия ленгмюровского монослоя АТ-39, а также изображения брестеровского микроскопа в процессе формирования слоя (Рис. 1б) говорят о гомогенности слоя.

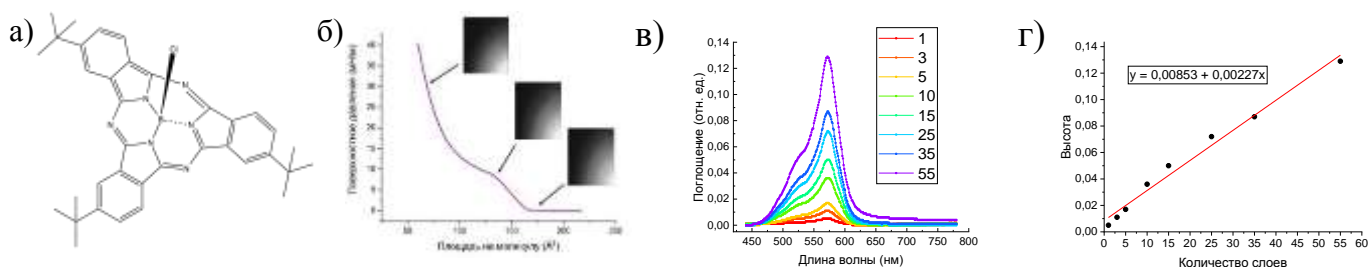


Рисунок 1 – а) Структурная формула производного субфталоцианина АТ-39, б) изотерма сжатия и изображения брестеровского микроскопа, в) спектры поглощения пленок АТ-39, г) зависимость максимума полосы поглощения от количества нанесенных ЛШ-слоев

Спектры поглощения (Рис. 1в) для разного количества слоев в пленке, перенесенных методом Ленгмюра-Шеффера (ЛШ), показывают линейное увеличение интенсивности полосы поглощения в области 500–600 нм (аппроксимация $y = 0,00853 + 0,00227x$, $R^2 = 0,98422$) (Рис. 1г). Для пленки из 55 слоев максимум полосы поглощения достигает 0,12 отн. ед.

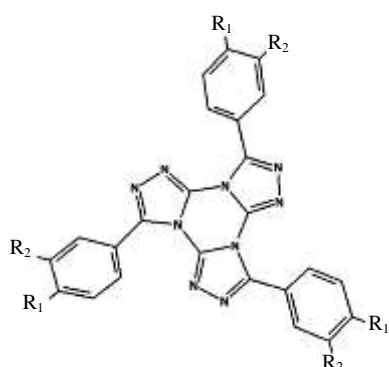
Показано, что новое производное субфталоцианина АТ-39 формирует однородные пленки Ленгмюра–Шеффера. При увеличении числа слоев поглощение в области 500–600 нм закономерно возрастает, что указывает на возможность получения воспроизводимых многослойных покрытий с управляемыми оптическими свойствами для сенсорных и фотонных приложений.

Работа проведена с использованием оборудования ЦКП «Структурная диагностика материалов» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт» при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и частично поддержана грантом Российского научного фонда № 25-73-20034.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ТРИСТРИАЗОЛОТРИАЗИНА В РАСТВОРИТЕЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПОЛЯРНОСТИ

Звездообразные гетероциклические структуры на основе тристриазолотриазина (ТТТ) вызывают особый интерес, благодаря высокой электроноакцепторной способности и люминесценции. Производные ТТТ являются перспективными материалами для создания органических светодиодов с термически активированной замедленной флуоресценцией и фотоэлектрических устройств.

С использованием методов квантовой химии (TD-DFT/B3LYP/6-311G**) рассчитаны электронные спектры поглощения (ЭСП) двух гомологов ТТТ (структуры I и II, Рис. 1) в газовой фазе и с учетом растворителя в неявном виде (модель PCM). Выбранные растворители являются разными по полярности. Расчет ЭСП выполнен для наиболее энергетически выгодных структур.



Структура I: $R_1=O-CH_3$, $R_2=O-C_3H_7$

Структура II: $R_1=R_2=O-CH_3$

Рисунок 1 – Структуры ТТТ

Таблица 1 – Результаты расчетов ЭСП исследуемых структур

	Структура I			Структура II		
	$\lambda_{\text{погл.}}$, нм (теор.)	$\lambda_{\text{погл.}}$, нм (эксп.)	μ , D	$\lambda_{\text{погл.}}$, нм (теор.)	$\lambda_{\text{погл.}}$, нм (эксп.)	μ , D
Газовая фаза	337	-	0.25	336	-	0.40
Циклогексан	338	315	0.52	338	318	0.69
Толуол	338	313	0.59	338	313	0.74
$CHCl_3$	336	316	0.87	335	316	1.00
CH_2Cl_2	334	310	1.07	333	310	1.21
DMSO	332	307	1.37	331	303	1.46

Результаты расчетов в газовой фазе и с учетом растворителей в сравнении с экспериментальными данными представлены в Табл. 1. Растворители располагаются в порядке увеличения полярности (ϵ). Анализ данных, представленных в таблице 1, показал отчетливую взаимосвязь между полярностью среды и электрооптическими параметрами исследованных структур. Также наблюдается монотонный рост дипольного момента (μ) для соединений I и II при переходе от неполярных к полярным растворителям. Данная тенденция объясняется эффектом поляризации молекулы в электрическом поле растворителя. Что касается электронных спектров поглощения, то сдвиги длин волн максимумов поглощения ($\lambda_{\text{погл.}}$) под действием растворителя выражены крайне слабо. Максимальные изменения зафиксированы при переходе к наиболее полярному из использованных растворителей (DMSO), в других растворителях разница не превышает 2 нм, что наблюдается как в теоретических, так и в экспериментальных значениях. Энергии высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей свободной молекулярной орбитали (НСМО) понижаются при переходе от газовой фазы к полярному растворителю DMSO. При этом ΔE_{gap} постепенно увеличивается. Наибольшая энергия взаимодействия между молекулой ТТТ и растворителем наблюдается в самом полярном растворителе DMSO и составляет -20.48 и -20.80 ккал/моль для структуры 1 и 2, соответственно.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (FZZM-2026-0004).

[1] Zharnikova N.V., Akopova O.B., Kazak A.V., Nikitin K.S., Usoltsev S.D., Pigolkina N.A., Usol'tseva N.V. Effect of alkyloxy substituents on mesomorphic and photophysical properties of star-shaped tristriazolotriazines. *Liq. Cryst.*, 2023, **50**(7-10), 1296-1309.

О.А. СВИДАН¹, Б.А. УМАНСКИЙ², С.В. ПАСЕЧНИК¹, А.В. ДУБЦОВ¹

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

²Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова, Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ТЕРМОТРОПНЫЕ КУБОСОМЫ НА ОСНОВЕ ГОЛУБЫХ ФАЗ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ В ВОДНЫХ СРЕДАХ

Термотропные кубосомы представляют собой наноскопические или микроскопические сферические капли анизотропной жидкости с трехмерной кубической структурой, диспергированной в водной среде. В отличие от лиотропных кубосом, в которых трехмерная периодическая структура образуется при тонком подборе концентрации липидов, растворителя и стабилизатора, кубическая решетка в термотропных кубосомах формируется в узком температурном интервале мезофазы (~3 °С) между изотропной и холестерической фазами сильно хиральных нематических жидких кристаллов. В таком интервале образуются так называемые голубые фазы жидких кристаллов (ВР II и ВР I), обладающие трехмерной периодической структурой с периодом решетки от 200 до 300 нм, позволяющим наблюдать Брэгговское селективное отражение света в видимой области спектра.

В настоящей работе представлены результаты экспериментального исследования влияния УФ/видимого излучения на кубосомы на основе фоточувствительной жидкокристаллической смеси, диспергированной в водной среде.

Объектом исследования являлась жидкокристаллическая матрица, состоящая из ЖК-440 и ЖК-1795, допированная хиральной добавкой S-811. Жидкокристаллическая эмульсия была получена путем диспергирования жидкокристаллической смеси в деионизированной воде с помощью ультразвука. Оптическое наблюдение жидкокристаллических капель осуществлялось с применением поляризационного микроскопа, оборудованного видеокамерой, нагревательным столиком и оптоволоконным спектрометром. УФ облучение эмульсии проводилось монохроматическим светом с длиной волны 405 нм/видимым светом от галогенной лампы микроскопа, что вызывало транс-цис/цис-транс изомеризацию азоксибензольных соединений жидкокристаллической матрицы.

В ходе наблюдения обнаружено, что кубосомы микронного размера с фазами ВР II и ВР I при комнатной температуре имеют монодоменное внутреннее упорядочение. Облучение эмульсии УФ приводило к фазовому переходу в каплях к изотропному состоянию с последующим формированием голубых фаз ВР II и ВР I при облучении видимым светом.

Результаты исследования обсуждаются для практического применения термотропных кубосом в качестве сенсоров химических и биологических примесей.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант № FSSFZ-2026-0007).

ПРОЧНОСТЬ Н-СВЯЗИ В ПОТЕНЦИАЛЬНО МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСАХ В СИСТЕМАХ С ПИРИДИНОВЫМИ, ГИДРОКСИЛЬНЫМИ И ЦИАНОГРУППАМИ ПО ДАННЫМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

В работе описывается квантово-химическое исследование геометрического и электронного строения потенциально мезогенных Н-комплексов на основе азосоединения 4(3'-гидроксипропилокси)-4''-цианоазобензола (3-GAOSA), 4,4'-бипиридина и его структурных аналогов с различными мостиковыми группами (Рис. 1). Для расчетов выбрано универсальное сочетание метода DFT и базиса (B3LYP/сс-pVTZ), расчеты выполнены в программе Gaussian09, визуализация выполнена с помощью программы ChemCraft.

Нами были смоделированы Н-комплексы с 4,4'-бипиридином и его структурными аналогами, имеющими следующие различные мостиковые группы: $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{C}_6\text{H}_4-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{S}-\text{S}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ и $-\text{N}=\text{N}-$. Рассмотрены комплексы состава 1:1 и 2:1.

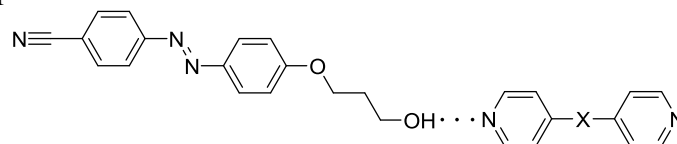


Рисунок 1 – Структурная формула исследуемых Н-комплексов состава 1:1, где X: $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, $-\text{C}_6\text{H}_4-$, $-\text{CH}=\text{CH}-$, $-\text{S}-\text{S}-$, $-\text{C}\equiv\text{C}-$ и $-\text{N}=\text{N}-$

Для выяснения причин различной устойчивости полученных комплексов нами были рассчитаны и проанализированы некоторые электронные характеристики, как отдельных молекул, так и Н-комплексов. Выполнен NBO-анализ распределения электронной плотности с целью оценки электронных эффектов функциональных групп, а также энергий Н-связей. С помощью метода QTAIM (Multiwfn 3.8 [1]) выполнен поиск критических точек связей в комплексах с целью сравнения электронной плотности на Н-связях в различных Н-комплексах.

Анализируя донорно-акцепторные взаимодействия, приводящие к формированию Н-связей, удалось установить, что наибольший вклад вносит взаимодействие неподеленной пары электронов атома N пиридинового фрагмента и σ^* орбитали связи О–Н. Энергии таких взаимодействий представлены в таблице 1 вместе с энергиями межмолекулярного взаимодействия и значениями электронной плотности ρ в критической точке (CP) водородных связей $\text{N}\cdots\text{H}$.

Таблица 1 – Энергетические и электронные характеристики Н-связей в Н-комплексах

Мостиковая группа	E_{MMB} , ккал/моль	$E^{(2)}(\text{LP}_\text{N} + \sigma^*_{\text{O-H}})$, ккал/моль	$\sum E^{(2)}$, ккал/моль	ρ в CP(N \cdots H), а.е.
$-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$	-8.165	12.52	13.36	0.03442
$-\text{C}_6\text{H}_4-$	-8.150	12.49	13.33	0.03437
$-\text{CH}=\text{CH}-$	-8.045	12.33	13.17	0.03416
–	-7.809	11.87	12.71	0.03355
$-\text{S}-\text{S}-$	-7.774	11.81	12.65	0.03347
$-\text{C}\equiv\text{C}-$	-7.707	11.70	12.54	0.03334
$-\text{N}=\text{N}-$	-7.545	11.43	12.25	0.03295

Анализ полученных значений электронной плотности для Н-комплексов показал, что в ряду от более прочного комплекса к менее прочному наблюдается ее уменьшение. При этом между параметрами в таблице 1 наблюдается четкая зависимость. Чем выше энергия взаимодействия орбиталей Н-связи ($E^{(2)}$ и $\sum E^{(2)}$), тем более отрицательна E_{MMB} , больше значение электронной плотности и прочнее комплекс.

[1] S.R. Emamian, T.Lu, H. Kruse, H. Emamian, J. Comput. Chem., 2019, 40(32), 2868-2881. DOI: 10.1002/jcc.26068

В.А. СТАКАНОВА, Ю.В. СУВорова

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ЛАКА ФИОЛЕТОВОГО ДЛЯ ВОДНЫХ ФЛЕКСОГРАФСКИХ КРАСОК

Отечественные потребители столкнулись со сложностями закупки импортных лакокрасочных материалов, органических пигментов, лаков и красителей, а отечественные аналоги не всегда отвечают запрашиваемому качеству. Поэтому производители продукции тонкого органического синтеза занимаются научными разработками, направленными на поиск состава готовых продуктов требуемой вязкости, прочности и стабильности.

В качестве объекта исследования в данной работе выбран аналог Лака фиолетового, применяющийся в полиграфической промышленности и в производстве грифелей для цветных карандашей. В основе Лака фиолетового лежит триарилметановый краситель (Рис. 1).

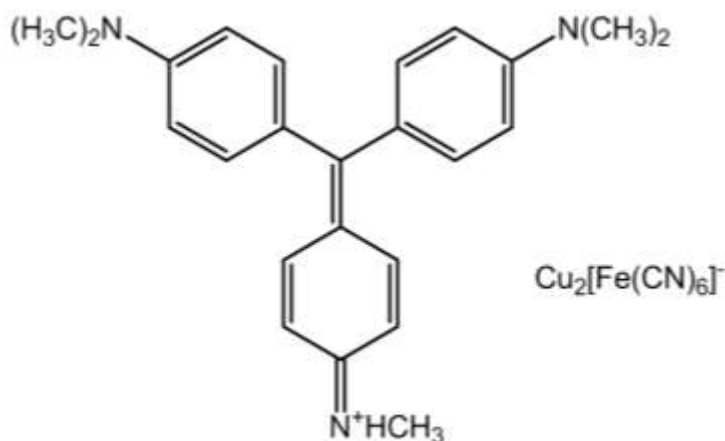


Рисунок 1 – Структурная формула Лака фиолетового

На первом этапе исследования для разделения многокомпонентного лака была подобрана наиболее эффективная элюирующая смесь (изобутанол : н-пропанол : вода = 6:2:1).

Разделение лака на компоненты осуществляли методами колоночной хроматографии на Хромсорбенте силикатном и препаративной хроматографии на алюминиевых пластинах, покрытых силикагелем (Sorbfil).

С использованием физико-химических методов анализа: масс-спектрометрии, электронной, ИК-спектроскопии и рентгенофазового анализа – удалось предположить наличие в составе Лака фиолетового красителей фиолетового и зеленого, меди, железа, кальция, ванадия, а также полиэтиленгликоля, добавляемого в состав лаков в качестве диспергатора. Кроме того, проведенные испытания позволили исключить возможность добавления в состав ализиринового масла.

Результаты, полученные в данном исследовании, лягут в основу дальнейшей работы, направленной на разработку состава Лака фиолетового с требуемыми колористическими характеристиками, вязкостью и стабильностью при хранении.

Работа выполнена с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ и при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, тема № FZZW-2026-0003.

В.В. ТЕРЕНТЬЕВ¹, З.А. ЖОВНИРЕНКО¹, С.А. ТЮТЮКИН¹, О.Б. АКОПОВА²

¹Верхневолжский государственный агробиотехнологический университет, Иваново, Россия

²НИИ наноматериалов, Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

ПРИМЕНЕНИЕ НИКЕЛЕВОГО КОМПЛЕКСА ФТАЛОЦИАНИНА ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ ПРОТИВОИЗНОСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИЦИОННОГО МАТЕРИАЛА

Улучшение показателей надежности подшипников скольжения машин и оборудования является важной задачей, остающейся актуальной на протяжении многих лет. Применение полимерных композиционных материалов, в состав которых входят различные функциональные наполнители, является эффективным путем ее решения.

Целью работы является определение эффективности применения никелевого комплекса фталоцианина (NiPc) в качестве противоизносного наполнителя полимерного композиционного материала на основе литьевого полиамида.

Эффективность его применения определялась по оценке триботехнических характеристик на машине трения 2070 СМТ-1 при переменных нагрузках на образцы (вращающийся ролик-сталь 45 ГОСТ 1050-2013; неподвижный образец-колодка, который изготавливался из исследуемой полимерной композиции). Нагрузка на образцы изменялась ступенчато от 200 Н до 800 Н, частота вращения ролика – 500 мин⁻¹. Опыты проводились с 5 кратным повтором.

Состав полимерного композиционного материала: матрица – полиамид литьевой П-610 ГОСТ 10584-73, антифрикционный наполнитель – фторопласт Ф-4 ГОСТ 10007-80, противоизносный наполнитель – NiPc марки х.ч. с молекулярной формулой C₃₂H₁₆N₈Ni. Никелевый комплекс фталоцианина был выбран ввиду его высокой термической стабильности (температура плавления > 300 °С). Полимерная композиция составлялась путем механического смешивания исходных компонентов, вводимых в виде порошков. Образцы из сформированной полимерной композиции были получены методом горячего прессования с использованием пресс-формы. Износ измерялся весовым методом и в дальнейшем пересчитывался в интенсивность изнашивания. Трение осуществлялось как без охлаждения образцов, так и с охлаждением – дистиллированной водой.

Согласно полученным экспериментальным данным, следует отметить значительное снижение интенсивности изнашивания образцов из приготовленного полимерного композиционного материала, модифицированного NiPc.

Максимальное снижение интенсивности изнашивания отмечено в условиях трения без охлаждения. Такое поведение можно объяснить более высоким температурным фактором в зоне трения и очевидной способностью NiPc формировать на поверхности трения упорядоченные ориентированные слои, выполняющие роль смазочного материала. Также у рассматриваемого композиционного материала отмечен рост нагрузочной способности в 4 раза по сравнению с ненаполненным полиамидом. Полученный положительный эффект при работе в узлах трения разработанной композиции (существенное улучшение триботехнических показателей) должен способствовать дальнейшему ее использованию в качестве конструкционного материала для изготовления необслуживаемых подшипников скольжения, что является эффективным путем снижения затрат на дальнейшее обслуживание и ремонт подшипникового узла. При испытаниях в среде дистиллированной воды эффект снижения износа оказался ниже (всего в 1,3-2,9 раза). Следует отметить, что эффект улучшения триботехнических характеристик проявляется при повышенных нагрузках на образцы (свыше 300 Н).

Полученные данные свидетельствуют об эффективности применения никелевого комплекса фталоцианина в качестве трибоактивного наполнителя конструкционных полимерных композитов, который позволяет повышать их прочностные и противоизносные характеристики.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ (грант № FZZM-2026-0004).

СИНТЕЗ ГЕТЕРИЛЗАМЕЩЕННЫХ ФТАЛОНИТРИЛОВ

Среди огромного разнообразия органических соединений внимание ученых и практиков привлекают фталонитрилы и их производные, которые являются компонентами полимерных композиционных материалов, углепластиков, жидких кристаллов, а также субстратами для синтеза макрогетероциклических соединений. Гетероциклические соединения занимают особое место в современной химии, благодаря своей способности проявлять биологическую, противомикробную и каталитическую активность. Это позволило им стать неотъемлемыми компонентами широкого спектра фармацевтических препаратов, катализаторов и агрохимикатов. Поэтому синтез новых и оптимизация уже существующих способов получения гетерилзамещенных фталонитрилов является актуальной задачей.

В данной работе сообщается о проведении палладий-катализируемой модификации галогензамещенных фталонитрилов, используя 2-тиофен- и 2-фуранбороновые кислоты в качестве субстратов (Рис. 1). Проведена оптимизация условий синтеза фталонитрилов, содержащих фрагменты тиофена или фурана. Структура полученных соединений подтверждена методами хроматомасс-спектрометрии, ИК-, ^1H , ^{13}C и HSQC ЯМР спектроскопии. Используя дифференциальную сканирующую калориметрию и термогравиметрический анализ, исследована устойчивость полученных соединений к термоокислительной деструкции. Полученные данные подтверждаются данными квантово-химических расчетов.

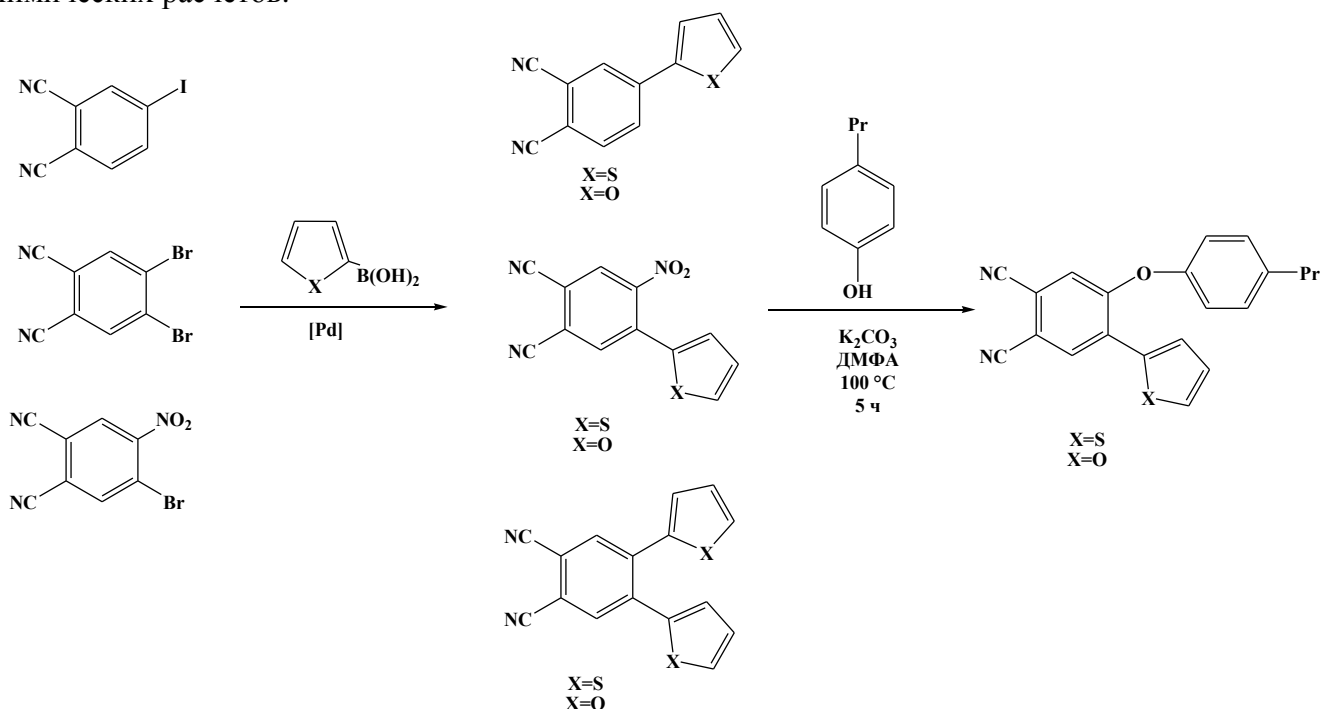


Рисунок 1 – Синтетический путь получения гетерилзамещенных фталонитрилов

Выполнено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ и при финансовой поддержке государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, тема № FZZW-2026-0003.

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

В.А. АВДЕЕНКОВ^{1,2}, В.В. БЕЛЯЕВ^{1,3}¹Российский университет дружбы народов, Москва, Россия²Московский университет «Синергия», Москва, Россия³Государственный университет просвещения, Москва, Россия

МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ УСТРОЙСТВ

Органические полупроводники (ОП) занимают заметное место среди функциональных материалов современной электроники. По сравнению с неорганическими аналогами они технологичнее, допускают изготовление гибких плёнок и не требуют ряда токсичных реагентов. Вместе с тем подвижность носителей заряда – главный параметр, ограничивающий эффективность приборов на основе ОП, — определяется молекулярным строением и особенностями кристаллической упаковки, а предсказание транспортных свойств из первых принципов остаётся нетривиальной задачей.

В работе применялись два взаимодополняющих подхода. Расширенная модель гауссова беспорядка [1] описывает прыжковый перенос заряда через локализованные состояния и связывает подвижность с температурой, концентрацией носителей и шириной гауссова распределения σ . Метод атом-атомных потенциалов [2, 3] использован для расчёта энергии межмолекулярного взаимодействия в зависимости от взаимной ориентации молекул без обращения к дорогостоящим квантово-химическим вычислениям. Геометрия молекул предварительно оптимизирована полуэмпирическим методом PM3 в пакете HyperChem 8.0.

Численное моделирование в рамках расширенной модели гауссова беспорядка показало: подвижность демонстрирует термоактивационный характер, квадратично возрастает с постоянной решётки ($\mu_0 \propto a_0^2$) и экспоненциально убывает при росте параметра беспорядка σ . Увеличение σ с 0,10 до 0,15 эВ уменьшает подвижность при комнатной температуре на несколько порядков величины, что наглядно указывает на критическую роль степени молекулярного порядка в материале.

Для шести ОП на основе нафталоцианинов и субфталоцианинов — Cl-SubPc(Ph)₆(CN)₂, Cl-SubPc(OPh)₆(CN)₂, Cl-SubPc(tBu)₆(CN)₂, Zn(OBu)₈Nc, ZnNc(OHex)₈, ZnNc(OOct)₈ – построены энергетические карты межмолекулярного взаимодействия в пространстве углов Эйлера. У всех соединений выявлен чёткий глобальный минимум, отвечающий столбчатой упаковке с почти параллельными молекулярными плоскостями ($\theta \approx 0-10^\circ$) при небольшом латеральном смещении ($\varphi \approx 0-10^\circ$). Оптимальное межплоскостное расстояние $d_{\text{opt}} \approx 3,3-3,7 \text{ \AA}$ соответствует эффективному π - π перекрытию орбиталей в столбчатой упаковке. Изменение взаимной ориентации молекул варьирует энергию взаимодействия в диапазоне 10^4-10^5 Дж/моль, что количественно согласуется с характерными значениями параметра беспорядка $\sigma = 0,10-0,15$ эВ, полученными в рамках расширенной модели гауссова беспорядка.

Метод атом-атомных потенциалов воспроизводит результаты, сопоставимые с более ресурсоёмкими теоретическими подходами, и пригоден для быстрого скрининга молекулярных структур при разработке органических полупроводников нового поколения для информационно-измерительных приборов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 25-49-01022.

[1] Pasveer W.F. et al., *Phys. Rev. Lett.*, 2005, **94**(20), 206601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.206601

[2] Беляев В.В. и др., *Оптический журнал*, 2024, **91**(11), 82–90.

[3] Chaousov D.N. et al., *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, **2056**(1), 012014. DOI: 10.1088/1742-6596/2056/1/012014

Я.В. БАРНАШ^{1,2,3}, Н.В. КАМАНИНА^{1,2,3}¹Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина, Ленинградская область, Россия²Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия³АО «Научно-производственное объединение Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова», Санкт-Петербург, Россия

ВЛИЯНИЕ НАНОТРУБОК MoS₂ И WS₂ НА ДИНАМИКУ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЯЧЕЕК НА ОСНОВЕ 5СВ

Быстродействие жидкокристаллических электрооптических элементов в значительной степени определяется временами включения и выключения, которые зависят от упругих, вязких и межфазных характеристик среды [1, 2]. В связи с этим представляет интерес модификация нематического жидкого кристалла 5СВ малыми добавками нанотрубок слоистых дихалькогенидов переходных металлов, способных изменять как объемные свойства композита, так и процессы на границе раздела жидкий кристалл – ориентирующая поверхность [3, 4].

В работе исследованы планарно ориентированные ЖК ячейки на основе чистого 5СВ и композитов 5СВ с нанотрубками MoS₂ и WS₂. Особое внимание уделено образцам с одинаковой концентрацией добавки 0,1 вес. %, что позволяет корректно сопоставлять влияние типа нанотрубок на кинетику электрооптического отклика. Ячейки формировались с использованием полиимидных ориентирующих слоев. Динамические измерения проводились в поляризационной схеме при подаче на образец управляющего напряжения с регистрацией временной зависимости интенсивности прошедшего излучения.

Показано, что введение нанотрубок приводит к изменению характера переходных зависимостей по сравнению с исходным 5СВ. Для композитных систем наблюдаются различия во временах нарастания и релаксации оптического сигнала, а также в форме отклика при переключении. Полученные результаты указывают на различный характер взаимодействия нанотрубок MoS₂ и WS₂ с жидкокристаллической матрицей 5СВ. Вероятно, это связано с изменением эффективных вязкоупругих параметров, степени локального упорядочения и условий перераспределения ионной примеси в электрическом поле. Практический интерес работы состоит в возможности управлять динамическими параметрами ЖК ячеек без изменения их базовой конструкции, что важно для создания модуляторов, фазовых элементов и других управляемых оптических устройств.

[1] P.G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2nd ed., Oxford, Clarendon Press, 1993.

[2] Л.М. Блинов, *Жидкие кристаллы. Структура и свойства*, Москва, URSS: ЛИБРОКОМ, 2013.

[3] Н.В. Каманина, А.С. Тойкка, Г.Н. Зверева, П.В. Кужаков, Я.В. Барнаш, С.А. Тарасов, Рельеф поверхности полиимидных тонкопленочных ориентирующих материалов для жидкокристаллических модуляторов света, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2021, **21**(4), 47-52. DOI: 10.18083/LCAppl.2021.4.47.

[4] N. Kamanina, A. Toikka, Y. Barnash, A. Zak, R. Tenne, Influence of Surface Relief on Orientation of Nematic Liquid Crystals: Polyimide Doped with WS₂ Nanotubes, *Crystals*, 2022, **12**(3), 391. DOI: 10.3390/cryst12030391.

А.В. БУТУЗОВ, Ю.Е. ЛЕБЕДЕВА, Е.А. СЕРКОВА, А.В. СЕМИНА, Е.А. КУКУШКИНА
 НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ, Москва, Россия

ВЛИЯНИЕ СИНТАКТНОГО ЖЕРТВЕННОГО НАПОЛНИТЕЛЯ НА РЕОЛОГИЮ ФОТООТВЕРЖДАЕМОЙ КЕРАМИЧЕСКОЙ ПАСТЫ ДЛЯ ТЕХНОЛОГИИ SLA

В данной работе исследование направлено на изучение реологических свойств фотоотверждаемой керамической пасты, содержащей полимерные полые микросферы в качестве синтактного жертвенного наполнителя, и предназначенной для изготовления пористой алюмооксидной керамики по технологии лазерной стереолитографии (SLA).

В НИЦ «Курчатовский институт» - ВИАМ была разработана высоконаполненная фотоотверждаемая керамическая паста с содержанием частиц оксида алюминия 80 мас. % и полимерных полых микросфер 0,5 мас. % ($d_{50} = 40$ мкм). Было обнаружено, что от момента изготовления с течением времени происходит процесс постепенного загущения керамической пасты. В следствии чего, представляло интерес провести исследования, направленные на изучение реологического поведения и микроструктурных превращений керамической пасты во времени. На основании проведенного реологического анализа керамической пасты был построен 3D-график зависимости вязкости от времени и скорости сдвига (Рис. 1а). Реологическое поведение изготовленной керамической пасты хорошо описывалось при помощи модели Гершеля-Балкли:

$$\tau = \tau_0 + K\dot{\gamma}^n$$

где τ – напряжение сдвига, τ_0 – предел текучести, K – показатель консистенции, $\dot{\gamma}$ – скорость сдвига, а n – индекс течения. Высокое значение коэффициента детерминации ($R^2 \geq 0,9987$) говорит о хорошей сходимости экспериментальных данных с расчетными. В результате проведенной аппроксимации экспериментальных данных был построен график зависимости вычисленных эмпирических параметров модели от времени (Рис. 1б). Как можно видеть из графика, с течением времени происходит рост показателей K , n и τ_0 , что свидетельствует не только об прогрессировании неньютоновского поведения с повышением вязкости пасты, но и об увеличении прочности пространственной структуры. Микроструктурные исследования керамической пасты в динамике подтвердили предположения об образовании новой пространственной структуры, образованной полыми полимерными микросферами (Рис. 1в). Таким образом, с течением времени в фотоотверждаемой керамической пасте происходят флокуляционные процессы, в результате которых микросферы выстраиваются в нитеподобные и клеточные структуры, что существенным образом влияет на реологическое поведение и консистенцию самой композиции.

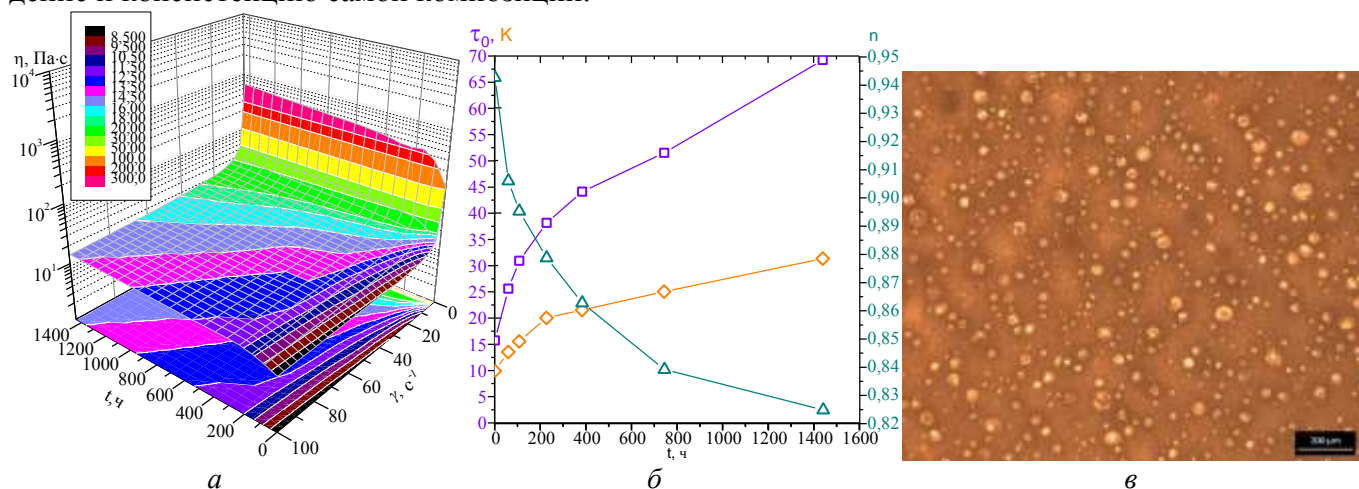


Рисунок 1 – а) 3D-график зависимости вязкости от скорости сдвига и времени проведения эксперимента; б) зависимости параметров реологической модели от времени проведения эксперимента; в) микроструктура керамической пасты с синтактным жертвенным наполнителем через 1440 ч.

Д.П. БЫЗОВ, Г.М. МИРГАЛЕЕВ, С.В. ШИЛОВА

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

НАНОЧАСТИЦЫ АЛЬБУМИНА КАК ПЕРСПЕКТИВНАЯ СИСТЕМА ДОСТАВКИ КОРТЕКОСТЕРОИДНОГО ПРЕПАРАТА ДЕКСАМЕТАЗОНА

Среди многочисленных наноразмерных носителей биологически активных веществ особое внимание исследователей привлекают наночастицы на основе белков, в частности бычьего сывороточного альбумина (БСА), благодаря их биосовместимости, биodeградируемости, отсутствию токсичности и доступности. Дексаметазон (ДЕКС) – это синтетический глюкокортикоид, широко применяемый в медицине благодаря своим выраженным противовоспалительным, иммуносупрессивным, антиаллергическим свойствам и эффективности в терапии тяжелых форм COVID-19. Однако системное воздействие свободного ДЕКС на организм человека сопряжено с рядом серьезных побочных эффектов. В этом контексте детальное изучение механизмов взаимодействия ДЕКС с БСА в растворах и в составе наночастиц, которые могут выступать в качестве его транспортных систем, приобретает особое значение для разработки «умных» наноматериалов для фармакологии.

В настоящей работе использовали образец БСА с молекулярной массой 64 кДа (Купавнареактив, Россия). В качестве ДЕКС применяли дексаметазон натрия фосфат в виде раствора для инъекций с концентрацией 4 мг/мл (Shreya Life Sciences, Индия).

Синтез наночастиц БСА с инкапсулированным ДЕКС проводили методом десольватации с последующей химической «сшивкой». Десольватирующим агентом выступал этанол, в качестве сшивающего агента применяли глутаровый альдегид (8% водный раствор). Характеризация носителей осуществлялась с помощью методов динамического светорассеяния и сканирующей электронной микроскопии. Полученные частицы БСА имели размер 74.1 нм и ζ -потенциал, равный -15.5 мВ. Анализ СЭМ-изображений поверхности наноносителей выявил присутствие частиц с размерами 40–50 нм, которые включают химические элементы, отражающие состав исследуемой системы. Эффективность инкапсулирования ДЕКС в наночастицы БСА составила 87 ± 1 %.

Методами кондуктометрии и УФ-спектроскопии изучены межмолекулярные взаимодействия БСА с ДЕКС в водном растворе трис-буфера. Установлено, что ДЕКС образует стабильные комплексы с БСА состава, отвечающего мольному отношению $[\text{ДЕКС}] : [\text{БСА}] = 4.0 : 1.0$.

Установлено, что константы тушения флуоресценции БСА дексаметазоном с ростом температуры в интервале 288–308 К уменьшаются, что указывает на тушение флуоресценции БСА за счет его химического взаимодействия с ДЕКС. Определенные на основе температурной зависимости констант связывания лекарственного вещества термодинамические параметры ($\Delta H^\circ = -91.76$ кДж/моль, $\Delta S^\circ = -210.77$ кДж/моль · К, $\Delta G^\circ = -28.94$ кДж/моль) указывают на самопроизвольность процесса комплексообразования БСА с ДЕКС. Сравнительный анализ ИК-спектров исходных веществ и их комплекса показал, что доминирующую роль в комплексообразовании БСА с ДЕКС играют силы Ван-дер-Ваальса и водородные связи и то, что связывание ДЕКС сопровождается конформационными изменениями белковых молекул.

Для анализа данных по высвобождению ДЕКС из наночастиц в условиях *in vitro* в трис-буфер, имитирующий физиологическую жидкость, использовали пять математических моделей: нулевого, первого порядков, кинетические модели Хиксона–Кроуэлла, Корсмейера–Пеппаса и Хигучи. Выявлено, что модель Корсмейер–Пеппаса хорошо подходит для аппроксимации кинетических данных.

Полученные данные расширяют понимание межмолекулярных механизмов, лежащих в основе формирования наноносителей глюкокортикостероидов на основе белков, и свидетельствуют о высоком их потенциале в разработке систем контролируемой доставки противовоспалительных препаратов.

Исследование выполнено при в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 от 12.01.2026 (FZSG-2026-0003).

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

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ АДРЕСНОЙ ДОСТАВКИ НОВОГО СУЛЬФОНАМИДА С ВКЛЮЧЕНИЕМ ФРАГМЕНТА (L)-ТИРОЗИНА

Сульфонамиды обладают широким спектром биологической активности благодаря наличию фармакофорной группы ($-\text{NH}-\text{SO}_2-$). На сегодняшний день российский фармацевтический рынок насчитывает более 100 эффективных лекарственных препаратов с сульфонамидной группой в структуре действующего вещества. Одним из способов снижения негативного воздействия на организм действующего вещества и повышения его эффективности является применение средств адресной доставки. Водные лиотропные жидкокристаллические (ЛЖК) системы на основе монододецилового эфира декаэтиленгликоля способны инкапсулировать действующее вещество и высвобождать его внутри клетки в течение продолжительного времени.

Синтезировано новое сульфонамидное соединение бензотиазинового ряда с включением фрагмента (L)-тирозина (Рис. 1). Для формирования тиазинового цикла проводили реакцию Дильса-Альдера между *para*-метокси-N-сульфиниланилином (диен) и малеинамидом (L)-тирозина (диенофил). Превращение сульфинамидной группы в сульфонамидную проводили путем окисления пероксидом водорода. Полученное соединение охарактеризовано и идентифицировано методами ИК- и ЯМР-спектроскопии.

С синтезированным сульфонамидом были получены ЛЖК-системы на основе монододецилового эфира декаэтиленгликоля ($\text{C}_{12}\text{EO}_{10}$) и воды. Полученные ЛЖК-системы были изучены методом поляризационной оптической спектроскопии и характеризуются гексагональной мезофазой (Рис. 2). Были измерены температуры фазовых переходов. Для расширения области применения ЛЖК среды были модифицированы введением солей лантаноидов (Eu^{3+} , La^{3+} , Gd^{3+}). Для лантаноид-содержащих систем описаны их люминесцентные свойства.

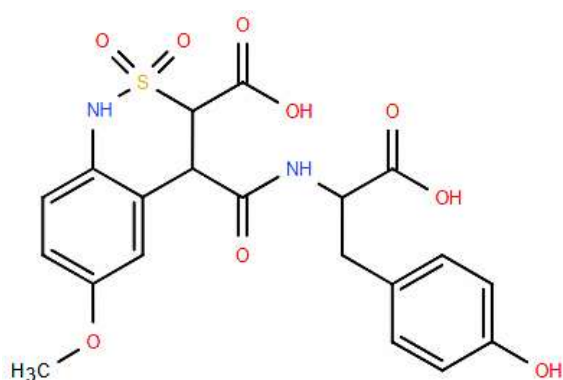


Рисунок 1 – Структура нового сульфонамидного соединения

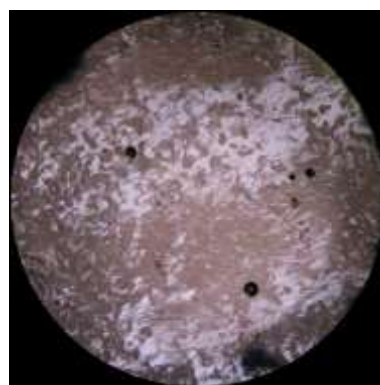


Рисунок 2 – Микрофотография образца ЛЖК-системы в поляризованном свете

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 от 12.01.2026 (FZSG-2026-0003).

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

[2] К.А. Глинов, Я.В. Веремейчик, А.И. Галеева, А.С. Крупин, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2025, **25**(4), 6-15. DOI 10.18083/LCAppl.2025.4.6

М.Н. ЁРОВ¹, У.ДЖ. РАХИМОВА¹, М.Х. ЭГАМОВ^{1,2}

¹Худжандский научный центр НАН Таджикистана, Худжанд, Таджикистан

²Горно-металлургический институт Таджикистана, Бустон, Таджикистан

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГОВОГО НАПРЯЖЕНИЯ ДЛЯ ПОЛИМЕРНО-ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПОЗИТОВ

В последнее время диспергированные полимером жидкокристаллические (ДПЖК) материалы типа "гость-хозяин" привлекли значительное внимание различных исследовательских групп из-за их технологической важности [1, 2]. Было обнаружено, что диспергирование небольшого количества поверхностно-активного вещества (ПАВ) - сурфактанта ("гостя") в ЖК ("хозяине") улучшает оптические характеристики последних. Морфология ЖК-капли и электрооптические свойства ДПЖК пленки, легированные ПАВ-ом типа "гость-хозяин" и капсулированные полимером жидкокристаллических (КПЖК) пленок (без ПАВ) зависят от различных факторов, таких как показатель преломления материалов, концентрация ЖК-полимера, количество сурфактанта, скорость отверждения, напряженность приложенного электрического поля, энергия сцепления, скорость охлаждения, растворимость материалов относительно друг к другу и температуре [3].

Целью настоящей работы является исследование морфологии ЖК-капель, электро- и термооптических свойств ПДЖК пленок типа «гость-хозяин». Было исследовано влияние сурфактанта на морфологические характеристики и переключение ПДЖК пленки в зависимости от электрического поля и температуры, а также проведено их сравнительный анализ.

Нематический жидкий кристалл (НЖК) 4-*n*-пентил-4'-цианобифенил (5СВ) (Merck, Германия), поливиниловый спирт (ПВС) (Норланд, Нью-Джерси) и катионный цетилтриметиламмоний бромид (СТАВ) в качестве (ПАВ) (Rolic, Швейцария) были использованы для подготовки образцов. ЖК 5СВ имеет температурой фазового перехода из нематического состояния к изотропному (T_{NI}) = 35,2 °С, двойное лучепреломление ($\Delta n = n_e - n_o$) = 0,186 и $n_e = 1,717$. Показатель преломления полимерного материала составил $n_p = 1,524$. Катионный сурфактант СТАВ хорошо растворяется только в НЖК 5СВ. Было обнаружено, что в образце ДПЖК типа «гость-хозяин» при более низком напряжении (10 В) ориентация капель ЖК не сильно меняется, однако при более высоком напряжении (80 В) биполярная конфигурация принимает типа мальтийского креста.

Установлено, что с ростом температуры (от комнатной до T_{NI}) оптическое пропускание увеличивается и имеет тенденцию к насыщению при более высоком приложенном напряжении, что связано с уменьшением параметра порядка и совпадением показателя преломления ЖК с полимерной матрицей. Установили, что оптическое пропускание увеличивается с повышением температуры, а затем насыщается при более высоком напряжении как для пленок ДПЖК типа «гость-хозяин», так и для КПЖК. Образцы ДПЖК типа «гость-хозяин» показывает в 4 раза более высокую пропускательность по сравнению с КПЖК пленок. Пороговое напряжение (U_{th}) для оба типа образцов увеличивается с повышением температуры из-за уменьшения общего эффективного поля, распространяющегося на капли ЖК. Результаты сравнительного анализа показывает, что образцы ДПЖК «гость-хозяин» имеет более быстрое время переключения (340 мс), чем КПЖК (510 мс) при 40 °С и находятся в хорошем согласии с теорией.

[1] В.А. Лойко, В.Я. Зырянов и др., *Опт. и спектр.*, 2016, **20**(1), 158-164.

[2] P.S. Drzaic. *Liquid Crystal Dispersion*, 1995. World Scientific, Singapore. 429 p.

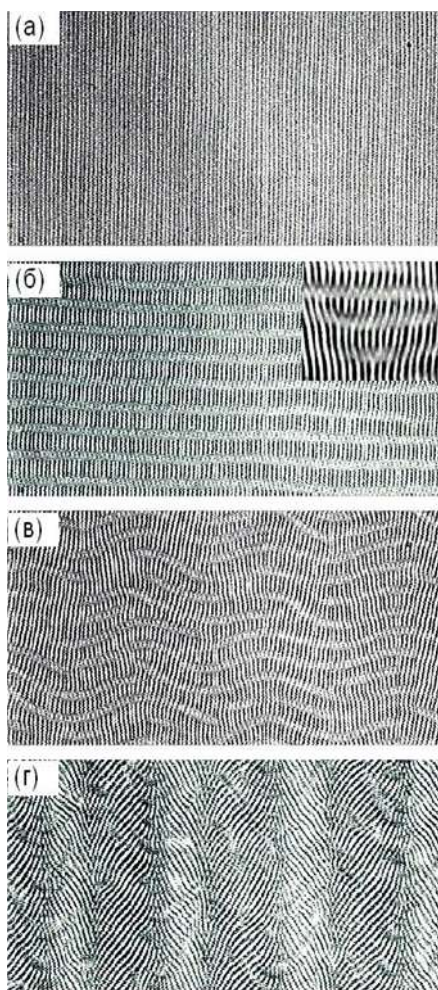
[3] L.M. Blinov. *J. Appl. Crystallogr.*, 1985, **18**(2), 130-139.

В.А. ДЕЛЕВ, Ю.И. ТИМИРОВ

Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, Уфа, Россия

НОВЫЙ СЦЕНАРИЙ ОБРАЗОВАНИЯ ШЕВРОНОВ В ЗАКРУЧЕННЫХ НЕМАТИКАХ

Исследуются структурные превращения, наблюдаемые в диэлектрическом режиме электроконвекции (ЭК) закрученного на $\pi/2$ нематического жидкого кристалла (НЖК). Типичные



переходные ЭК структуры, возникающие последовательно с увеличением контрольного параметра $\varepsilon = (U^2 - U_c^2)/U_c^2$, представлены на Рис. 1. Электрооптический анализ показал, что линейные домены ориентируются нормально к исходной ориентации директора n в середине ЖК-слоя. При $U \geq U_c$ наблюдается длинноволновая модуляция линейных доменов вдоль их оси. В точках, где амплитуда модуляции достигает максимума, происходит скачок фазы пространственной модуляции на π . Это приводит к образованию локализованных протяженных состояний, перпендикулярных линейным доменам. При $\varepsilon = 0.03$ такие линии достигают границ ЖК-образца, так что суперпозиция последних с линейными доменами образует вполне упорядоченную 2D структуру. На вставке Рис. 1б видно, что линии состоят из дислокаций. Образование такой переходной картины в закрученном на $\pi/2$ НЖК является принципиальным отличием в сценарии образования шевронов от случая исходной планарной ориентации директора [1]. Необходимо заметить, что протяженные линейные дефекты наблюдаются и в проводящем режиме ЭК [2]. С дальнейшим увеличением контрольного параметра ε появляется знакопеременный наклон линейных доменов, который растет с ε . При $\varepsilon = 0.12$ становится заметной шевронная структура.

Таким образом, в закрученном на $\pi/2$ нематике переход к шевронам происходит не из «хаоса дефектов» [1], и из вполне 2D упорядоченного квазистационарного состояния – суперпозиции диэлектрических доменов и линий осциллирующих дислокаций.

На основе линейного анализа устойчивости системы стандартных ЭК уравнений в рамках метода Галеркина получены численные оценки пороговых характеристик доменных структур.

Рисунок 1 – Образование шевронов в закрученном на $\pi/2$ НЖК ($d = 20$ мкм, $f_{AC} = 100$ Гц, $U_c = 72.8$ В): а) $\varepsilon = 0.01$; б) $\varepsilon = 0.03$; в) $\varepsilon = 0.12$; г) $\varepsilon = 0.25$

[1] V. Scheuring, L. Kramer, J. Peinke, *Phys. Rev. E*, 1998, **58**(2), 2018-2026. DOI: 10.1103/PhysRevE.58.2018

[2] В.А. Делев, *Письма в ЖЭТФ*, 2019, **113**(1-2), 26-32. DOI: 10.31857/S1234567821010043

Р.М. ЗИЯТДИНОВА, А.С. КРУПИН, А.А. КНЯЗЕВ, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ
Казанский национальный исследовательский технологический университет

ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ МЕЗОГЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III)

Люминесцентная термометрия благодаря своим преимуществам является перспективным методом измерения температур для использования в микроэлектронике, микрофлюидике, фотонике, биологии и медицине. Особое внимание уделяется комплексным соединениям Ln(III) благодаря их монохроматической люминесценции, большим временам жизни излучения и теоретически возможной 100% внутренней квантовой эффективности.

В работе изучены термочувствительные материалы на основе мезогенных комплексов Eu(III), полученные путем стеклования из расплава (Рис. 1а). Благодаря аморфному строению комплексы способны образовывать однородные пленки без кристаллических дефектов. Изучена температурная зависимость интенсивности и времени жизни люминесценции материалов на основе ЖК и не проявляющего мезоморфизм комплексов Eu(III) (Рис. 1б). Известно, что уменьшение интенсивности люминесценции и времени жизни комплексов Ln(III) с повышением температуры вызвано температурным тушением, обусловленным безызлучательными релаксационными процессами.

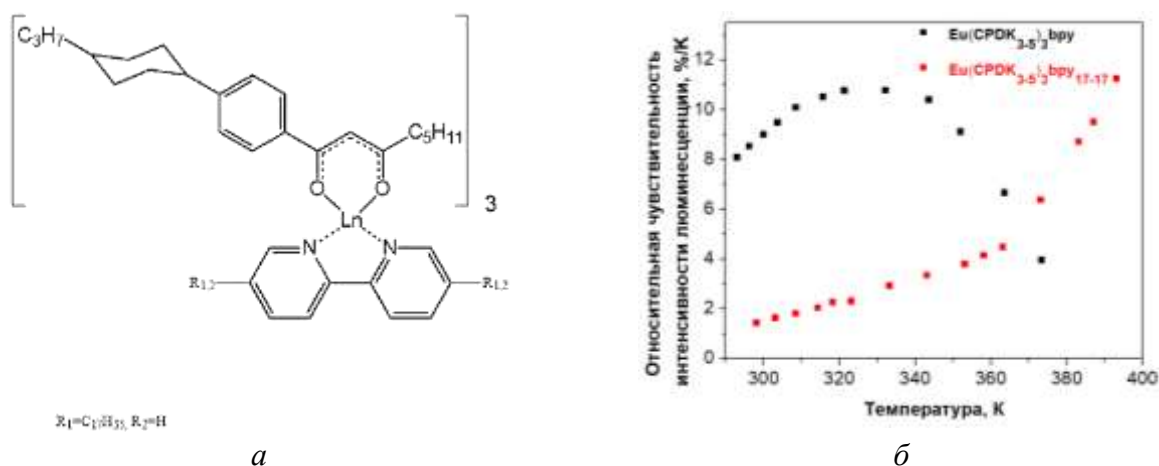


Рисунок 1 – Структура анизометричных комплексов европия(III) (а), температурная чувствительность пленок (б)

Определено, что пленки на основе ЖК комплекса Eu(III) проявляют температурную чувствительность люминесценции в более широком интервале температур по сравнению с немезогенным аналогом. Значение относительной чувствительности интенсивности ЖК комплекса составило $10\% \times K^{-1}$, и превышает таковую для не ЖК комплекса, что предположительно обусловлено изменением межмолекулярных взаимодействий в ЖК фазе (Рис. 1б). Данные пленки являются перспективными материалами для термосенсоров, пригодных для измерения температур в диапазоне 298-393 К, в том числе в области физиологических температур человека.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект №25-73-00170).

[1] Knyazev A.A., Krupin A.S., Ziyatdinova R.M., Galyametdinov Yu.G., *Liq. Cryst.*, 2026. DOI. 10.1080/02678292.2026.2616601.

А.Ф. ИСХАКОВ¹, К.А. РОМАНОВА¹, А.А. КНЯЗЕВ¹, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ^{1,2}

¹ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань

²КФТИ, ФИЦ КазНЦРАН, Казань

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРЕДОБУЧЕННЫХ СВЁРТОЧНЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ТЕКСТУР МЕЗОФАЗ КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ(III)

Определение жидкокристаллических (ЖК) мезофаз по текстурам поляризационной микроскопии представляет собой задачу, требующую привлечения специалиста. Данная работа включает сравнение четырёх известных предобученных свёрточных нейронных сетей (CNN): ResNet50, EfficientNet-B0, MobileNet и DenseNet121. Обучение CNN производилось в рамках задачи классификации ЖК мезофаз.

В качестве объектов исследования были выбраны ЖК комплекс $\text{La}(\text{CPDK}_{3-8})_3\text{Vpy}_{17-17}$, демонстрирующий четыре фазовых состояний: кристаллическое (Cryst), смектик А (SmA), нематик (Nem) и изотропную жидкость (Iso) [1]. Также была использована н-нонил-оксибензойная кислота, которая, в отличие от SmA фазы комплекса, имеет мезофазу смектик С (SmC). Подобный выбор объектов был сделан с целью выявления точности в определении разных смектических ЖК фаз для наших моделей. Из 20 микрофотографий, полученных на поляризационном микроскопе Olympus BX51, методом нарезки патчей размером 300×300 пикселей был сформирован датасет. Объём датасета составил 6028 изображений (Cryst: 1200, SmA: 1200, SmC: 1248, Nem: 1180, Iso: 1200). Датасет был разделён в соотношении 75/15/10 на обучающую (4521), валидационную (904) и тестовую (603) выборки. Для задачи классификации использовались предобученные архитектуры ResNet50, EfficientNet-B0, MobileNet и DenseNet121 [2-4]. Все CNN дообучались 50 эпох с возможностью ранней остановки (10 эпох без улучшений) по валидационной точности, скорость обучения – 0,001 и размер батча – 32.

В результате, MobileNet показала достигнутую точность по тестовым данным – 99,89% к 21 эпохе, CNN EfficientNet-B0 – 99,89% точности к 16 эпохе. Для DenseNet121 точность на тестовых данных составила 100% к 34 эпохе, а для ResNet50 – 99,78% к 15 эпохе. Анализ матриц ошибок показал, что наибольшая сложность для всех моделей CNN связана с разграничением Nem, Cryst и SmA ЖК фаз, особенно для ResNet50. Тогда как Iso и SmC для всех моделей CNN распознаются с точностью 100%. По результатам расчета такие CNN как MobileNet и EfficientNet-B0 показали себя достаточно эффективными моделями CNN для распознавания фазовых состояний.

Таким образом, трансфертное обучение обеспечивает высокую точность для задач многоклассовой классификации, распознавания типов мезофаз ЖК-комплекса La(III) при малом объёме специализированных данных. Для практического применения рекомендуются MobileNet и EfficientNet-B0, отличившиеся точностью в классификации ЖК фаз и быстрой обучаемостью.

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 (FZSG-2026-0003).

[1] V. Dzhabarov, A. Knyazev, M. Strelkov, E. Molostova, V. Schustov, W. Haase, Yu. Galyametdinov, *Liq. Cryst.*, 2010, **37**, 285–291. DOI: 10.1080/02678290903506040

[2] K. He, X. Zhang, S. Ren, J. Sun, *Proc. IEEE Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit. (CVPR)*, 2016, 770–778. DOI: 10.1109/CVPR.2016.90

[3] M. Tan, Q.V. Le, *Proc. 36th Int. Conf. Mach. Learn. (ICML)*, PMLR **97**, 2019, 6105–6114. DOI: 10.48550/arXiv.1905.11946

[4] A.G. Howard, M. Zhu, B. Chen, D. Kalenichenko, W. Wang, T. Weyand, M. Andreetto, H. Adam, *arXiv preprint*, 2017, arXiv:1704.04861. DOI: 10.48550/arXiv.1704.04861

[5] G. Huang, Z. Liu, K.Q. Weinberger, *Proc. IEEE Conf. Comput. Vis. Pattern Recognit. (CVPR)*, 2017, 2261–2269. DOI: 10.1109/CVPR.2017.243

Т.С. КАПРАЛОВА, Ю.Г. КУРАЕВА, Л.А. ОНУЧАК
ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С.П. Королева»,
Самара, Россия

ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКАЯ СОРБЦИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ СОРБЕНТАМИ НА ОСНОВЕ НЕМАТИЧЕСКОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА И МОДИФИЦИРОВАННЫХ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ

Жидкие кристаллы (ЖК) и макроциклические соединения, такие как β -циклодекстрин (β -ЦД), широко используются в создании селективных сорбентов для газовой хроматографии и материалов с управляемыми свойствами.

Целью работы являлось исследование закономерностей формирования смешанных мезофаз и сорбции органических соединений из газовой фазы бинарными сорбентами на основе нематического жидкого кристалла 4-метокси-4'-этоксиязоксibenзола (МЭАБ) и химически модифицированных β -циклодекстринов: бензоилированного (Vz - β -ЦД), ацетилированного (Ac - β -ЦД) и метилированного (Me - β -ЦД).

В данной работе изучены фазовые переходы, типы образующихся мезофаз, термодинамика сорбции и селективность по отношению к различным классам органических соединений, включая оптически активные. Установлено, что природа заместителя в β -ЦД определяет доступность полости макроцикла и тип образующейся мезофазы. Ac - β -ЦД индуцирует переход нематической фазы МЭАБ в хиральную закрученную нематическую (N^*), тогда как Vz - β -ЦД и Me - β -ЦД сохраняют нематическую структуру (N). В ряду Vz - β -ЦД \rightarrow Me - β -ЦД \rightarrow Ac - β -ЦД возрастает сила индукции спиральной структуры. Величина энтропии фазового перехода и температурный интервал существования мезофазы увеличиваются в ряду Me - β -ЦД $<$ Ac - β -ЦД $<$ Vz - β -ЦД, что свидетельствует о росте ориентационной упорядоченности смешанных мезофаз.

Внесение производных β -ЦД изменяет удерживание сорбатов по сравнению с исходной жидкокристаллической матрицей. Изменение удерживания связано с балансом энтальпийных и энтропийных вкладов. Для Ac - β -ЦД и Vz - β -ЦД определяющим является энтальпийный фактор, для Me - β -ЦД – энтропийный, что связано с разупорядочиванием мезофазы.

Бинарные сорбенты проявляют высокую структурную селективность к изомерам пара и метаксилола и цис-транс-селективность к изомерам декалина. Ac - β -ЦД обеспечивает наилучшую энантиоселективность, проявляющуюся в разделении изомеров камфена, лимонена и бутандиола-2,3. Me - β -ЦД не проявляет энантиоселективности из-за сильного разупорядочивания и экранирования полости.

Таким образом, показано, что природа заместителя в молекуле модифицированного β -ЦД оказывает определяющее влияние на фазовое состояние, ориентационную упорядоченность, сорбционные и селективные свойства смешанных жидкокристаллических систем. Среди исследованных систем бинарный сорбент «МЭАБ – Ac - β -ЦД» обладает наилучшей энантиоселективностью и высокой структурной упорядоченностью, что открывает перспективы для создания новых ЖК-материалов с управляемыми свойствами для разделительных и сорбционных технологий.

Исследование проведено за счет средств государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, шифр проекта FSSS-2026-0007.

БИМЕДИЦИНСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАППА-КАРРАГИНАНА И НЕИОННЫХ ПАВ

Модификация систем доставки лекарственных компонентов является перспективной областью современной биомедицины. Инкапсулирование органических биоактивных соединений - 1,2,3-триазолов способствует созданию новых лекарственных средств. Благодаря широкому спектру биологической активности, включающему противоопухолевую, данные гетероциклы являются важными агентами для онкологической фармации [1]. Однако низкая растворимость в воде ограничивает использование 1,2,3-триазолов. Во избежание трудностей, вызванных гидрофобностью соединений, исследуют структуры с эффективной солюбилизующей способностью. В этом плане интерес привлекают гидрогели на основе биополимеров, обеспечивающие биодоступность и контролируемое высвобождение действующего вещества [2,3].

В данной работе исследовалась антиоксидантная активность 2,2'-(4-метилкарбоксил-1,2,3-триазол-1-ил)-1,1'-этоксиэтана (TR-1) и противоопухолевое действие бис-1,3-(4-метилкарбоксил-1,2,3-триазол-1-ил)ксилилена (TR-2). Структура соединений представлена на Рис. 1а,б. Гидрогели получали на основе сульфатированного полисахарида каппа-каррагинана и неионного ПАВ $C_{12}EO_{10}$. Однако гидрофобные триазолы препятствовали стабильности системы, затрудняя инкорпорирование в структуру геля биополимера. Для решения этой проблемы дополнительно в систему вводили $C_{12}EO_{10}$ (3,5 мас. %). Система $CaCl_2/C_{12}EO_{10}$ позволяла достичь высокой степени солюбилизации 1,2,3-триазолов (до 5 мас. %).

В отношении раковых клеток аденокарциномы двенадцатиперстной кишки HuTu-80 и клеток печени человека соединение TR-2 подтвердило стабильную терапевтическую способность, сопоставимую с препаратом сравнения – 5-фторурацилом. Исследования антиоксидантной активности методом FRAP (Ferric Reducing Antioxidant Power) проводились в сравнении с эталонным антиоксидантом – аскорбиновой кислотой. Результаты показали высокое значение восстановительной способности синтезированных триазолов.

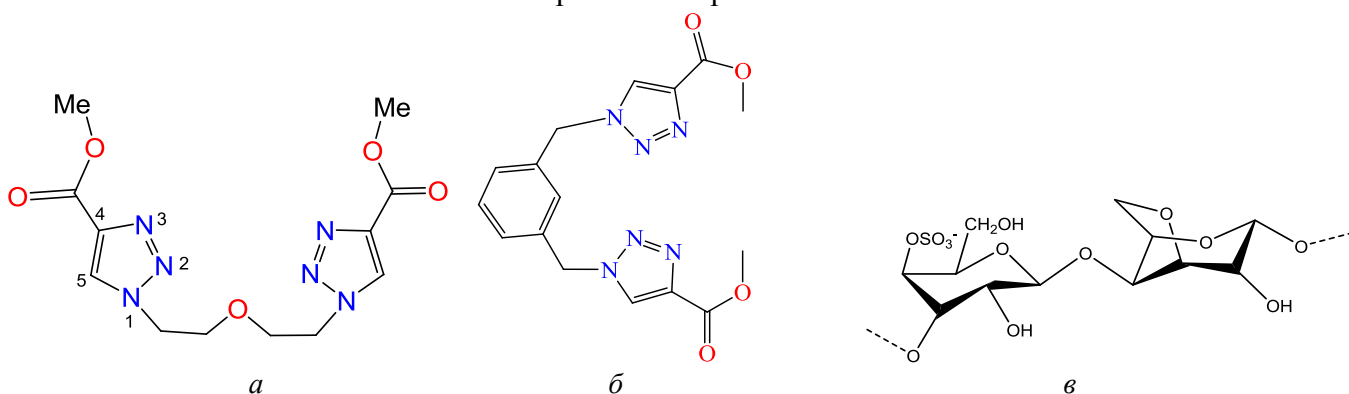


Рисунок 1 – Структурные формулы 1,2,3-триазолов (TR-1, TR-2) (а, б) и каппа-каррагинана (в)

Таким образом, полученные результаты демонстрируют высокий потенциал 1,2,3-триазолов в фармации и биомедицине.

[1] Селиванова Н.М., Химия и биологическая активность триазолов / ООО "45". 2025, с.95.

[2] Селиванова Н.М., *Вестн. технол. ун-та*, 2025, **12**, 18-24. DOI: 10.55421/3034-4689_2025_28_12_18

[3] N. Selivanova, M. Shulaeva, A. Voloshina, V. Semenov, *J. Mol. Liq.*, 2024, **415**, 126352. DOI: 10.1016/j.molliq.2024.126352

И.П. КОЛОМИЕЦ, А.А. КАРЕТНИКОВ, А.П. КОВШИК, Е.И. РЮМЦЕВ
Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СЛОЕВ С ОДИНАКОВЫМ И ПРОТИВОПОЛОЖНЫМ НАПРАВЛЕНИЕМ ПРЕДНАКЛОНА

Применение в электрооптических устройствах слоев нематических жидких кристаллов (НЖК) с неоднородной объемной ориентацией существенно увеличивает скорость оптического отклика на действие импульсного напряжения [1]. В докладе представлены результаты измерения двойного лучепреломления (ДЛП) света при комнатной температуре (20 ± 1) °С в слоях НЖК (**ЖК-1466**, **НИОПИК**) методом компенсации на длине волны 632.8 нм с использованием в качестве компенсатора четвертьволновой пластинки. НЖК находился в плоскопараллельном зазоре между гранями двух призм Дове, на поверхности которых нанесены электропроводящее и ориентирующее покрытия. Однородную ориентацию НЖК на поверхностях граней призм получали нанесением и высушиванием водного раствора поливинилового спирта с последующим натиранием полимерного покрытия в одном направлении хлопчатобумажной тканью. Однородность ориентации на поверхностях граней контролировали, используя поляризационный микроскоп. Угол преднаклона, измеренный поляриметрическим методом [2], имел значения в интервале от 1 до 2 градусов. Толщину слоя определяли из зависимости косинуса угла преломления обыкновенной волны от порядка интерференционного максимума. Сформированные генератором **АКИП-3409/3** и 15-кратно усиленные усилителем **Tabor electronics 9200** импульсы переменного напряжения с частотой 10 кГц поступали на измерительную ячейку с периодом 10 с. ДЛП измеряли в слоях с одинаковыми и противоположными направлениями натирания на границах. Из-за положительного знака диэлектрической анизотропии, электрическое поле ориентировало оптическую ось НЖК вдоль нормали к границам слоя, что вызывало уменьшение ДЛП. Длительность импульсов, прикладываемых к слою, устанавливали такой, чтобы ДЛП успевало достигнуть равновесного значения. Источником света служил *He-Ne* лазер, а фотоприёмником – фотодиод с постоянной времени 10^{-5} с. Для регистрации светового потока, измерения амплитуды импульсов и времени использовали осциллограф **GDS-73152**. В слоях с неоднородной, как в π -ячейках, ориентацией при воздействии импульсов с длительностью более 0.2 с и напряжением более 10 В было обнаружено возникновение доменов, которые, увеличиваясь в размерах и сливаясь, в течение одной, двух минут заполняли весь слой. В отсутствие напряжения это индуцированное полем состояние НЖК сохранялось в течение более 10 минут. Ранее в литературе [3] имели место сообщения о подобных переходах в π -ячейках. ДЛП в индуцированном состоянии измеряли, прикладывая к ячейке два последовательных импульса: первый с постоянной длительностью и напряжением, сохраняющий это состояние, второй пробный – для измерения свойств НЖК в индуцированном состоянии.

Основные результаты. 1) Переход в индуцированное полем состояние наблюдалось только в слоях с противоположным направлением преднаклона на границах. 2) Равновесная величина ДЛП и быстродействие в индуцированном состоянии существенно больше, чем в исходном. 3) Спад ДЛП в индуцированном состоянии после окончания импульса имеет немонотонный характер.

[1] P.J. Bos and K.R. Koehler/Beran, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 1984, **113**, 329-339.

[2] Karetnikov A.A., Karetnikov N.A., Kovshik A.P., Rjuntsev Y.I. New method of determination of the tilt angle at a liquid crystal-glass interface. <https://arxiv.org/abs/0910.2162v1>

[3] Chang-Hun Lee, E.P. Raynes, S.J. Elston, *Appl. Phys. Lett.*, 2010, **97**, 153501.

А.И. КРАСНОПЁРОВ^{1,2}, С.М. ПЕСТОВ^{1,2}¹Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия²Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ – БИНАРНЫЕ РАСТВОРИТЕЛИ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОЙ ГРУППОВОЙ СХЕМЫ

Фенилбензоаты (ФБ) традиционно используются в качестве компонентов в жидкокристаллических материалах (ЖКМ) наряду с другими классами жидких кристаллов (ЖК). В качестве конечной стадии очистки ФБ обычно применяют многократную перекристаллизацию с помощью органического растворителя. На практике в качестве растворителя для очистки фенилбензоатов используют различные предельные углеводороды и одноатомные спирты, в которых у ФБ низкая растворимость [1]. Это приводит к тому, что качество очистки ЖК снижается, при этом увеличиваются затраты на регенерацию растворителя. Для увеличения эффективности очистки ФБ необходимо подобрать растворитель, который бы обладал хорошей растворимостью с ФБ, что можно сделать при помощи методов термодинамического моделирования.

В качестве объектов исследования были взяты фенилбензоаты одного гомологичного ряда ($R^1O-C_6H_4-COO-C_6H_4-OR^2$): PhBz-O6/O4 ($R^1 = C_6H_{13}$, $R^2 = C_4H_9$), PhBz-O6/O7 ($R^1 = C_6H_{13}$, $R^2 = C_7H_{15}$). Исследована растворимость выбранных ФБ в индивидуальных растворителях следующих классов: предельные и ароматические углеводороды, одноатомные спирты, кетоны, простые и сложные эфиры, хлоралканы. Наилучшая растворимость наблюдалась в хлоралканах и ароматических углеводородах.

Термодинамическое определение бинарного растворителя с наибольшей растворимостью ФБ проводилось при помощи треугольника Тиса. Дисперсионный (δ_d), полярный (δ_p), водородный (δ_h) составляющие параметра растворимости Хансена, были найдены с помощью предложенной нами модифицированной групповой схемы (ГС) на основе ГС Хуккерикара [2] и Стефаниса [3].

При моделировании растворимости тройных систем с помощью модифицированной групповой схемы по треугольнику Тиса наибольшей растворимостью обладали системы ФБ с бинарными системами, содержащие предельные углеводороды и алкилацетаты. В таблице 1 представлены данные по растворимости в двойных и тройных системах.

Таблица 1 – Растворимость ($\ln x_1$) PhBz-O6/O7 в индивидуальных растворителях и бинарных смесях при 298,15 К

Индивидуальные растворители		Бинарные смеси	
Название системы	$\ln x_1$	Название системы	$\ln x_1$
PhBz-O6/O7 – ацетон	-4,659	PhBz-O6/O7 – ацетон/метилэтилкетон (1:1)	-2,064
PhBz-O6/O7 – метилэтилкетон	-2,131	PhBz-O6/O7 – циклогексан/метилацетат (1:1)	-1,844
PhBz-O6/O7 – циклогексан	-2,681	PhBz-O6/O7 – циклогексан/метилацетат (2:1)	-1,886
PhBz-O6/O7 – метилацетат	-2,290	PhBz-O6/O7 – этилацетат/циклогексан (1:1)	-1,636
PhBz-O6/O7 – этилацетат	-2,220	PhBz-O6/O7 – <i>n</i> -гексан/метилацетат (1:1)	-1,608

Растворимость ФБ в бинарных смесях выше, чем в индивидуальных растворителях в среднем более чем на 25%.

[1] В.А. Молочко, С.М. Пестов, Фазовые равновесия и термодинамика систем с жидкими кристаллами. М.: ИПЦ МИТХТ, 2003. 242 с.

[2] A.S. Hukkerikar, B. Sarup, A.T. Kate, J. Abildskov, G. Sin, R. Gani, *Fluid Phase Equilibria*, 2012, **321**, 25-43. DOI: 10.1016/j.fluid.2012.02.010

[3] E. Stefanis, C. Panayiotou, *Int. J. Thermophys.*, 2008, **29**, 568–585. DOI: 10.1007/s10765-008-0415-z

О.С. ЛИНКЕР, Т.П. ДЬЯЧКОВА, Н.А. ЧАПАКСОВ, И.В. ГУТНИК
Тамбовский государственный технический университет, Тамбов, Россия

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ «УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ – ОКСИД ГРАФЕНА – ПОЛИАНИЛИН»

Одним из перспективных и востребованных направлений современной науки является создание гибридных материалов, которые смогут найти свое применение в различных областях электроники, энергетики и биомедицины. В частности, при сочетании углеродных наноструктур в единую систему часто проявляются эффекты синергетического взаимодействия, что благотворно отражается на свойствах конечных продуктов. В рамках настоящей работы осуществлялось исследование закономерностей формирования композитов «углеродные нанотрубки (УНТ) – оксид графена (ОГ) – полианилин (ПАНИ)». Нанесение проводящего полимера – ПАНИ – на наноуглеродные носители обусловлено необходимостью стабилизации его электропроводящих свойств, электрохимических характеристик и развития активной поверхности.

В качестве исходных материалов использовались: 1) УНТ «Таунит-М» (производство “Нанотехцентр”, Россия, Тамбов), состоящие из 4-8 графеновых слоев цилиндрической формы, диаметром 8-15 нм длиной более 2 мкм, $S_{уд} = 300-320 \text{ м}^2/\text{г}$; 2) оксид графена, состоящий из 1-3 слоев, содержащий до 40 мас. % кислорода и до 2 мас. % серы в виде 1%-ной водной суспензии; 3) реактивы солянокислый анилин, персульфат аммония и концентрированная соляная кислота квалификации «х.ч.». Для формирования композита смешивали УНТ и ОГ в массовом соотношении от 1:1 до 1:4, добавляли необходимое количество дистиллированной воды и озвучивали в течение 5 минут. Затем добавляли солянокислый анилин, соляную кислоту до $\text{pH} = 2$. Полученную смесь термостатировали до температуры 22 °С. Затем добавляли персульфат аммония и перемешивали полученную массу в течение 1 часа. С момента подачи окисляющего реагента регистрировали температуру и pH реакционной смеси. После проведения окислительной полимеризации оставляли смесь на ночь, на следующий день осадок отмывали на фильтре дистиллированной водой до нейтрального pH (контроль по лакмусовой бумаге), а затем изопропиловым спиртом до обесцвечивания фильтрата. Затем осадок высушивали на воздухе при 80 °С до прекращения потерь массы. Среднее содержание полианилина в полученных образцах составило 40 мас. %. Для готовых экспериментальных образцов регистрировались: 1) ИК-спектры на приборе Jasco FT/IR 6700 в режиме НПВО на кристалле алмаза; 2) спектры комбинационного рассеяния (КР) на приборе DXR Raman Microscope Thermo Scientific при $\lambda = 633 \text{ нм}$; 3) рентгеновские дифрактограммы на приборе ARL Equinox 1000; 4) ТГ/ДСК-кривые в атмосфере воздуха при скорости нагрева 10 К/мин в температурном интервале от 30 до 900 °С на приборе синхронного термического анализа STA 449 F3 Jupiter (Netzsch).

Проанализировано влияние состава наноуглеродной подложки на закономерности окислительной полимеризации анилина. Показано изменение скорости процесса и его теплового эффекта при увеличении содержания графенового компонента. На основании данных рентгенофазового и спектрального анализа показано закономерное влияние состава гибридной системы на совершенство структуры макромолекул полианилина и наличие олигомерных фрагментов в составе нанокompозита. По данным термогравиметрии показано синергетическое изменение термостабильности гибридных материалов.

На следующем этапе будут проведены исследования по определению значений удельной поверхности экспериментальных образцов, их электропроводящих и емкостных свойств, а также сенсорной чувствительности по отношению к газам. Полученные материалы планируется применяться в качестве электродных материалов суперконденсаторов, в составе огнеупорных, термостабильных и антистатических покрытий, а также в качестве чувствительных элементов газовых датчиков.

К.А. РОМАНОВА, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ(III) С КОНТРОЛИРУЕМЫМИ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Моделирование структурных, жидкокристаллических (ЖК) и фотофизических свойств комплексов лантаноидов(III) (Ln(III)), включающих различные центральные ионы Ln(III) , с замещенными β -дикетоновыми лигандами и основаниями Льюиса проводилось с помощью комплексного вычислительного подхода, сочетающего методы DFT и TDFFT, полуэмпирические модели (SMLC) и методы (RM1, ZINDO/S, CIS и др.), *ab initio* подходы (CASSCF, теория возмущений и др.), молекулярную динамику, моделирование на основе нейронных сетей и межатомных потенциалов машинного обучения. На основе полученных данных были систематически выявлены взаимосвязи между строением, структурой и свойствами молекул, включая геометрические характеристики, параметры надмолекулярной организации, координационных полиэдров и фазовых жидкокристаллических переходов. Было проведено сравнение результатов моделирования, полученных с помощью различных вычислительных подходов, и с доступными экспериментальными данными. В результате было продемонстрировано, что модели машинного обучения и графовые нейронные сети позволяют проводить моделирование ЖК комплексов Ln(III) с точностью *ab initio* методов. По результатам моделирования молекулярной геометрии и строения мезофаз были вычислены параметры анизотропии геометрии, которые преимущественно определяются длинными алкильными заместителями в основаниях Льюиса, что является ключевым фактором, ответственным за образование ЖК мезофаз [1]. Моделирование в периодических граничных условиях с учетом окружения приводит к дополнительному повышению параметра анизотропии и подтверждает необходимость учета межмолекулярных взаимодействий при выявлении особенностей ЖК поведения. Подробный анализ параметров полиэдров Вороного-Дирихле выявил систематические изменения в координационном окружении центральных ионов в ряду Ln(III) . Было установлено, что даже незначительные искажения в координационной сфере иона Ln(III) оказывают существенное влияние на фазовое поведение. Комплекс лантана(III), отличающийся более искаженной геометрией координационного полиэдра, уникальным образом демонстрирует в ряду смектическую мезофазу В. Изменения параметров коррелируют с экспериментально наблюдаемыми температурами фазовых переходов. В работе была подчеркнута центральная роль природы иона Ln(III) и геометрии его полиэдра не только в определении ЖК свойств комплексов Ln(III) , но и в настройке магнитной и оптической анизотропии функциональных материалов на их основе. Разработанный вычислительный подход представляет собой инструмент рационального проектирования новых функциональных материалов на основе Ln(III) с заданной надмолекулярной организацией и требуемыми оптическими свойствами. Он может быть расширен до комплексов переходных металлов и органических жидких кристаллов, понимание надмолекулярной организации которых имеет решающее значение для настройки целевых функциональных свойств. Полученные результаты могут помочь в разработке люминесцентных материалов следующего поколения, а предложенные подходы применения моделей машинного обучения и межатомных потенциалов использованы для других классов соединений с большим количеством атомов, где традиционные методы требуют значительных вычислительных ресурсов.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № 075-00021-26-00 от 12.01.2026 (FZSG-2026-0003).

[1] К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов, *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2022, **22**(4), 6-15. DOI: 10.18083/LCAppl.2022.4.6

А.А. САЛЬНИКОВА, М.А. ШПЫНЕВА, С.М. ПЕСТОВ
 Российский технологический университет МИРЭА, Москва, Россия

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СИСТЕМ ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ – РАСТВОРИТЕЛИ

Жидкие кристаллы (ЖК) широко применяются в разных областях современной техники: дисплеи, электрооптические устройства, сенсоры и датчики. На практике используют многокомпонентные смеси с добавками немезогенов, поэтому для создания новых материалов и для улучшения качества очистки ЖК необходимы данные о межмолекулярном взаимодействии компонентов в системах ЖК – немезоген.

В качестве ЖК объектов были выбраны нематики близкого строения ($C_4H_9-C_6H_4-M-C_6H_4-OC_2H_5$, C_6H_4 - *p*-фенилен): ЭББА ($M = -N=CH-$, температуры ($^{\circ}C$): К (кристаллы) 36,8 N (нематик) 79,1 Is (изотропная жидкость)), Az-4/2 ($M = -N=N-$, К 47,9 N 82,9 Is). Получены полимеры растворимости с растворителями разных классов в интервале температур от 0 до 30 $^{\circ}C$, данные представлены в виде линейной зависимости: $-\ln x_1 = a - b/T$, где x_1 – мольная доля ЖК в насыщенном растворе, T – температура [K], $b = (\Delta_p H/R)$. Рассчитаны энтальпии растворения ЖК ($\Delta_p H$).

Таблица 1 – Расчет энтальпии растворения

Система	a	b	$\Delta_p H$, кДж/моль
ЭББА – бензол	12,61	-3908,4	32,5
ЭББА – циклогексан	31,10	-9417,9	78,3
ЭББА – н-гексан	28,38	-8762,9	72,9
ЭББА – н-гептан	39,31	-12082,0	100,4
ЭББА – этилацетат	11,80	-3811,0	31,7
ЭББА – диоксан	17,87	-5462,6	45,4
ЭББА – метанол	31,96	-10503,0	87,3
ЭББА – пропанол-1	41,08	-12829,0	106,7
ЭББА – пропанол-2	30,56	-9777,9	81,3
Az-4/2 – н-гексан	35,97	-11051,0	91,9
Az-4/2 – этилацетат	13,46	-4275,5	35,5
Az-4/2 – ацетон	21,95	-6834,1	56,8
Az-4/2 – диизопропиловый эфир	17,41	-5503,4	45,8

Во всех системах рассчитанные энтальпии растворения намного больше энтальпии плавления (для ЭББА - 17,2 кДж/моль), коэффициенты активности больше 1. Наименьшая разница для $\Delta_p H$ и лучшая растворимость ЭББА наблюдалась в этилацетате. Параметры растворимости Гильдебранда и Хансена для растворителей взяты из [1]. В системах ЭББА с спиртами и алканами обнаружена широкая область расслаивания [2], что соответствует большой разнице в параметрах растворимости компонентов (для ЭББА $\delta_1 = 19,8 \text{ МПа}^{0,5}$, $\delta_2 = 14,9$ и $29,8 \text{ МПа}^{0,5}$ для н-гексана и метанола) и высокому значению $\Delta_p H$. Значения параметра растворимости для этилацетата ($\delta_2 = 18,6 \text{ МПа}^{0,5}$) близко к δ_1 и его можно использовать в качестве растворителя для очистки ЖК кристаллизацией из раствора. Также можно использовать треугольник Тиса [1] при выборе растворителя для очистки мезогенов кристаллизацией из раствора.

[1] Hansen solubility parameters: a user's handbook / ed.: С.М. Hansen– Boca Raton: CRC Press, 2007.

[2] В.А. Молочко, С.М. Пестов. Фазовые равновесия и термодинамика систем с жидкими кристаллами. М.: ИПЦ МИТХТ, 2003. 242 с.

Н.В. САУТИНА, К.В. КЛЕМЕНТЬЕВА, Ю.Г. ГАЛЯМЕТДИНОВ

Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ АОТ ДЛЯ ДОСТАВКИ ИНСУЛИНА

Жидкие кристаллы (ЖК) представляют собой организованные мезофазы, обладающие промежуточными свойствами между жидкостями и твердыми телами. В последние годы жидкокристаллические системы вызывают большой интерес как потенциальные системы доставки лекарственных средств благодаря высокому уровню биосовместимости, обусловленной структурным сходством лиотропных ЖК с липидными мембранами клеток. Также жидкие кристаллы обеспечивают контролируемое и пролонгированное высвобождение лекарственных и физиологически-активных веществ [1].

Инсулин является пептидным гормоном, состоящий из 51 аминокислотного остатка, и имеет молекулярную массу около 5,7 кДа. Его основное применение – лечение сахарного диабета. Основным путем введения его в организм является подкожный, инъекционный путь.

Целью данной работы являлось исследование кинетики массопереноса инсулина из жидкокристаллической системы вода / АОТ / изопропилмирикат через полупроницаемую мембрану, выступающую в качестве модели кожного барьера.

Получены жидкие кристаллы состава вода / АОТ / изопропилмирикат [2,3]. Методом поляризационно-оптической микроскопии исследована текстура, установлено, что разработанные системы имеют обратную гексагональную структуру. Определена область нахождения ЖК на фазовой диаграмме. Методом дифференциально-сканирующей калориметрии выявлена температура фазового перехода 45-55 °С. Показано, что введение инсулина несколько изменяет структуру гексагональной фазы, однако не разрушает ее. Это сказывается на температуре фазового перехода, которая увеличивается до 51-60 °С.

Исследование массопереноса инсулина из жидкокристаллической системы в физиологический раствор (раствор Рингера) проведено методом равновесного диализа через полупроницаемую модельную мембрану с использованием ячейки Франца. Определена концентрация действующего вещества и его количество, высвободившееся из ЖК и прошедшее через единицу площади поверхности мембраны за время t . Установлено, что высвобождение инсулина происходит постепенно в течение 7 часов. Проведена оценка кинетики высвобождения инсулина из жидкокристаллических систем с применением методов математического моделирования диффузионных процессов. На основании расчетов установлено, что наилучшая аппроксимация экспериментальных данных достигается при использовании модели Хигучи.

Полученные результаты могут быть применены для прогнозирования и регулирования процессов транспорта инсулина из жидкокристаллических систем.

Работа выполнена за счет гранта, предоставленного Академией наук Республики Татарстан образовательным организациям высшего образования, научным и иным организациям на поддержку планов развития кадрового потенциала в части стимулирования их научных и научно-педагогических работников к защите докторских диссертаций и выполнению научно-исследовательских работ (Соглашение №10/2025-ПД-КНИТУ от 22.12.2025).

[1] J. Mo, G. Milleret, M. Nagaraj, *Liq. Cryst. Rev.*, 2017, **5**, 69–85. DOI: 10.1080/21680396.2017.1361874

[2] Н.В. Саутина, А.И. Рыбакова, А.Т. Губайдуллин, Ю.Г. Галяметдинов. *Жидк. крист. и их практич. использ.*, 2020, **20** (2), 91-99. DOI:10.18083/LCAppl.2020.2.91

[3] Н.В. Саутина, Э.М. Мифтахова, К.В. Силахина, Ю.Г. Галяметдинов, *Изв. вузов. Химия и хим. технология*, 2019, **62** (5), 24-30. DOI: 10.6060/ivkkt.20196205.5772

НАДМОЛЕКУЛЯРНАЯ СТРУКТУРА ПРИ ЗАСТУДНЕВАНИИ РАСТВОРОВ ПОЛИАМИДБЕНЗИМИДАЗОЛА В ДИПОЛЯРНЫХ АПРОТОННЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

В последние годы особое внимание уделяется композитным материалам на основе армирующих волокон третьего поколения. К числу таких волокон относятся п-арамидные СВМ и армос, отличающиеся высокой прочностью и формируются из сернокислотных растворов полиамидбензимидазола ПАБИ в жидкокристаллическом состоянии. В данной работе изучаются фазовые превращения и надмолекулярная структура при коагуляции растворов ПАБИ в диполярных апротонных растворителях. Это важно для понимания процессов структурообразования и управления свойствами будущих волокон. Исследуется студнеобразование в растворах ПАБИ в N-метилпирролидоне (N-МП), диметилацетамиде (ДМАА) и диметилсульфоксиде (ДМСО) при различных температурно-концентрационных условиях.

Исследование поляризационно-оптическими методами студней ПАБИ в N-МП показывает сходство с низкомолекулярными холестерическими жидкими кристаллами. Структура полученных студней существенно различается в зависимости от концентрации полимера и времени застудневания. Студни проявляют значительную оптическую анизотропию, выражающуюся в изменении картин рассеяния света, особенно заметную в высококонцентрированных растворах. Структура сферолитов жесткоцепных полимеров типа ПАБИ значительно отличается от сферолитов гибкоцепных полимеров, что связано с различием в термодинамической предпочтительности формы макромолекул при переходе в конденсированное состояние.

Установлено, что растворы в системах ПАБИ-ДМАА и ПАБИ-ДМСО устойчивы при комнатной температуре и образуют студни при нагревании до 150 °С. Скорость застудневания увеличивается с ростом содержания воды. Полученные данные позволяют предположить, что морфологические различия обусловлены изменением жесткости полимерных цепей при изменении концентрации и температуры.

Важным шагом является дальнейшее изучение механизмов формирования мезофаз холестерического типа при изменении условий среды (растворителей и температуры). Проведенные исследования открывают перспективные направления для изучения процессов структурообразования и кинетики застудневания полужесткоцепных полимеров, к которым относится ПАБИ. Это важно для понимания фундаментальных аспектов поведения полимеров с различной жесткостью макромолекул при переходе в конденсированное состояние.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
--------------------	---

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

Бурмистров В.А. Макрогетероциклические индукторы спирали в нематических жидких кристаллах	6
Безбородов В.С., Михалёнок С.Г., Кузьменок Н.М., Лапаник В.И. Роль функционализированных анизотропных веществ и упорядоченных поверхностей в создании новых материалов и устройств	7
Баленко Н.В., Павлов С.Н., Шibaев В.П. Стимул-чувствительные полимер-диспергированные холестерические жидкие кристаллы	8
Галяметдинов Ю.Г., Князев А.А., Безруков А.Н., Галеева А.И., Романова К.А. Получение и актуальные фотофизические исследования гибридных жидкокристаллических систем	9
Каманина Н.В., Лихоманова С.В., Федорова Л.О., Тойкка А.С., Кужаков П.В. Влияние процесса наноструктурирования на базовые свойства тонкопленочных поляризаторов света, как ключевых элементов ЖК-электрооптических устройств	10
Савилов С.В., Бенько Е.М., Мамлеева Н.А., Кузнецова Н.Н. Современные материалы на основе компонентов из возобновляемого сырья	11
Пасечник С.В., Харламов С.С., Коновалова А.А. Поля и поверхности в реологии жидких кристаллов	12
Глуховской Е.Г., Каратышова Т.Я., Усольцева Н.В., Смирнова А.И., Ткачев Д.В. Возможности методов формирования слоёв амфифильных веществ на границах раздела	13
Емельяненко А.В. Фракталы в сегнетоэлектрических нематиках	14
Pikina E.S., Muratov A.R., Kats E.I., Lebedev V.V. Pattern formation in nonlinear dynamics of nematic liquid crystals above the flexoelectric instability threshold	15
Chigrinov V.G. Photoaligned azodye nanolayers: new trends for liquid crystal devices	16

СЕКЦИОННЫЕ ДОКЛАДЫ

Бакеева Р.Ф., Назарова Р.И., Косачева Э.М., Гармонов С.Ю. Полимер коллоидная система на основе <i>n</i> -децилпиридиний хлорида и полиэтиленimina для спектрофотометрического определения фуразидина в лекарственных препаратах при использовании методологии поверхности отклика и планов Бокса-Бенкена	18
--	----

Бугаков С.Д., Дериков Я.И., Карпов О.Н., Ежов А.А., <u>Гальрозе Р.В.</u>	19
Фотоиндуцированное управление пространственным распределением квантовых точек в нематической жидкокристаллической матрице	
Буданова А.А., Новиков И.В., Александрийский В.В., Бурмистров В.А.	20
Хиральная индукция спирали в смесях алкоксицианобифенилов с никелевым комплексом камфорозамещенного тетрапиразинопорфирина	
Бузько М.М., Сулова Е.В., Шашурин Д.А., Медведев О.С.	21
Синтез и свойства композитов Pd/SiO ₂ для биомедицинского применения	
Вдовый Т.В., Сулова Е.В., Шашурин Д.А., Шелков Г.А.	22
Разработка новых йодсодержащих контрастных агентов для компьютерной томографии	
Глушко А.Н., Бессарабов А.М., Холодова Е.А., Приорова Е.М.	23
Системные исследования температуры кристаллизации противообледенительных жидкостей для авиации	
Голубева Д.М., Набасов А.А., Галанин Н.Е.	24
5,6-дифеноксид-1,3-бис(хиолин-2-илметил)изоиндолина и его бордифторидный комплекс. Синтез и спектрально-люминесцентные свойства	
Спириденко Н.А., Долганов П.В., Долганов В.К.	25
Нестабильность Рэлея-Плато в жидких кристаллах	
Долганов П.В., Максимов Е.А., Спириденко Н.А.	26
Многоуровневые жидкокристаллические структуры. Формирование трехмерных, двумерных и одномерных упорядоченных структур из топологических дефектов	
Герцель И.С., Жаркова Г.М.	27
Исследование влияния допирующих добавок на чувствительность холестерических жидких кристаллов к механической деформации	
Зорин И.М., Кадников М.В., Сеньчукова А.С., Фетин П.А.	28
Полимерные пав для мицеллярного катализа	
Климович М.А., Г.А. Крусанов, А.В. Белоусов, М.А. Колыванова, В.Н. Морозов	29
Пространственно-упорядоченные ансамбли биомолекул как модельные системы для различных задач радиобиологии	
Коновалова А.А., Пасечник С.В., Захаров А.В.	30
Оптический отклик гибридного жидкокристаллического слоя, ориентированного магнитным и электрическим полями на воздействие осциллирующего потока Пуазейля	
Кудряшов М.Ю., Носикова Л.А., Сергеенкова А.А., Кочетов А.Н., Кудряшова З.А.	31
Мезоморфизм антикоагулянтных родентицидов второго поколения	
Кузнецов Н.А., Суворова Ю.В.	32
Исследование состава и свойств пигмента красного для нитроцеллюлозных систем	
Манукян А.С., Кустова Т.В.	33
Живая вода растений: уникальные свойства гидролатов	

Морозов В.Н., Климович М.А., Дементьева О.В., Рудой В.М., Колыванова М.А.	34
Инкорпорирование наночастиц золота в частицы оптически активных жидкокристаллических дисперсий ДНК: Scio me nihil scire	
Моторина Е.В., Ломова Т.Н., Качур А.И.	35
Влияние координационного окружения центрального атома на комплексообразующие электронные и оптические свойства порфириновых комплексов Молибдена(V)	
Николенко С.К., Архипова Е.А., Леонов А.А., Иванов А.С.	36
Транспортные свойства неводных электролитов на основе бис(трифторметансульфонил)-имида магния	
Овчинников Т.А., Петров Д.А.	37
Электрооптический отклик жидкокристаллических суспензий углеродных нанотрубок	
Осмнин А.Э., Амбарцумян А., Устинов Г.Э., Алтунян М., Рафаелян М., Муравьев А.А., Швецов С.А., Орлова Т.	38
Новый хиральный-азо-молекулярный фотопереключателъ для программируемой генерации солитонных структур в светоуправляемых жидких кристаллах	
Пересторонина А.В., Хазимуллин М.В.	39
Топологические дефекты в нематических мостиках: коллапс кольцевой дисклинации в точечный дефект	
Петухова Е.А., Данилова Е.А.	40
Синтез и свойства азот- и серосодержащих соединений с бис(2-хлорэтил) аминогруппой и макрогетероциклов на их основе	
Платонова Я.Б., Кириллова В.А., Тарасов З.А.	41
Гетерогенные катализаторы на основе тетра-(п-карбокси)-феноксифталоцианина палладия(II) для реакции Соногаширы	
Рассолова А.Е., Майзлиш В.Е.	42
Синтез и спектральные свойства тетра-4-[(2'/3'-метоксифенокси)-5-хлор]фталоцианина меди, кобальта	
Свидан О.А., Захарова П.С., Уманский Б.А., Пасечник С.В., Дубцов А.В.	43
Фотоиндуцированные фазовые переходы в сильно хиральных фоточувствительных нематических жидких кристаллах	
Уткин М.А., Хазимуллин М.В., Макаров Д.В.	44
Влияние формы и геометрического фактора на конфигурации директора в жидкокристаллических мостиках	
Федулова С.А., Кустова Т.В.	45
Гомо- и гетерозамещенные фталоцианины с 4-(1-метил-1-фенилэтил)феноксигруппами. Синтез и свойства	
Филиппов А.А., Федоров М.С.	46
Влияние длины алкильного заместителя на строения и свойства комплексов с водородной связью на основе 4-замещенных бензолсульфокислот и производных пиридина	

Фомин Н.С., Кручинина Д.К., Кустова Т.В.	47
Моделирование противоопухолевой ФДТ с использованием монокатионных хлориновых фотосенсибилизаторов	
Хазимуллин М.В.	48
Устойчивые конфигурации директора в цилиндрических каплях нематического жидкого кристалла	
Ышыкдемир С.Р., Захарова П.С., Уманский Б.А., Прохоров Д.И., Пасечник С.В., Дубцов А.В.	49
Влияние водных растворов белков на пленки нематической смеси допированной дихроичным красителем	
Яковлев С.В., Осипов Н.И., Сулова Е.В.	50
Получение композитных полимерных наполнителей SiO ₂ -поливинилимидазол для антикоррозионных покрытий	
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	
Александров А.И., Пащикова Т.В., Груздев М.С.	52
Исследование структуры поли(пропилениминового)дендримера третьей генерации	
Балабанов Р.Д., Дьячкова Т.П.	53
Влияние давления прессования на свойства углеродных композитов, модифицированных оксидом графена	
Битков Г.А., Мерекалов А.С., Тальрозе Р.В.	54
Диэлектрические характеристики ЖК-матриц с фотохромными добавками	
Галеева А.И., Безруков А.Н., Галяметдинов Ю.Г.	55
Гибридные жидкокристаллические системы на основе сурфактантов с люминофорами для транспорта лекарственного средства	
Гиричева Н.И., Лапыкина Е.А., Салькова А.М., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.	56
Изменение люминесцентных свойств производных тристриазолотриазина при образовании супрамолекулярных комплексов	
Ельникова Л.В.	57
Квантовые линдбладианы в физике активных жидких кристаллов	
Ершова Е.А., Петухова Е.А., Кочетова А.А., Данилова Е.А.	58
Создание новых огнезащитных покрытий для пожароопасных древесных материалов	
Жарникова Н.В., Бумбина Н.В., Акопова О.Б., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.	59
Синтез и свойства производных 1,2,4,5-тетракис(1,3,4-оксадиазолил)бензола как полифункциональных материалов	
Калугин А.Г.	60
Об экспериментальной оценке дивергентной константы в энергии Франка нематических жидких кристаллов	

- Коновалова А.А., Гиричева Н.И., Лапыкина Е.А., Абромайтис З.А.** 61
Геометрическое строение и электронные спектры поглощения соединений фенил-трис-оксадиазолов с -Ph и -Ph(OCH₃)₂ заместителями
- Королёв П.В., Шилов М.А., Дьячкова Т.П., Смирнова А.И., Усольцева Н.В.** 62
Триботехнические характеристики вазелина, модифицированного углеродными нанотрубками и их функциональными производными
- Кузьмина А.А., Буданова А.А., Новиков И.В., Бурмистров В.А.** 63
Индукция хиральной нематической фазы в смесях СВ-2 под действием пирофеофорбида никеля: мезоморфные, оптические и диэлектрические свойства
- Курилов А.Д., Краснов П.А., Зубков С.А.** 64
Потенциал современных жидкокристаллических дисплеев для субмикронной визуализации газовых потоков
- Курилов А.Д., Таратонкина У.И., Губарева А.В., Чекулаев И.С.** 65
Моделирование поляризационно-оптических изображений топологических дефектов в нематических жидких кристаллах
- Мозгова В.А., Бичан Н.Г., Овченкова Е.Н., Ксенофонтов А.А., Ломова Т.Н.** 66
Диады на основе (5,10,15,20-тетра(1-нафтил)порфириinato)цинка(II) и фуллеро[60]пирролидинов: самосборка, спектральные, электрохимические и фотовольтаические свойства
- Мишукова О.В., Марченкова М.А., Набатов Б.В., Казак А.В.** 67
Оптические свойства пленок Ленгмюра-Шеффера производного субфталоцианина C₃₆H₃₈BCIN₆
- Салькова А.М., Гиричева Н.И., Лапыкина Е.А.** 68
Квантово-химические расчеты электронных спектров поглощения тристриазолотриазина в растворителях различной полярности
- Свидан О.А., Уманский Б.А., Пасечник С.В., Дубцов А.В.** 69
Фоточувствительные термотропные кубосомы на основе голубых фаз жидких кристаллов в водных средах
- Семенова П.С., Федоров М.С.** 70
Прочность Н-связи в потенциально мезогенных комплексах в системах с пиридиновыми, гидроксильными и цианогруппами по данным квантово-химических расчетов
- Стаканова В.А., Суворова Ю.В.** 71
Исследование состава Лака фиолетового для водных флексографских красок
- Терентьев В.В., Жовниренко З.А., Тютюкин С.А., Акопова О.Б.** 72
Применение никелевого комплекса фталоцианина для улучшения противоизносных характеристик полимерного композиционного материала
- Шагалов Е.В., Майзлиш В.Е., Завалишин М.Н.** 73
Синтез гетерилзамещенных фталонитрилов

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

- Авдеенков В.А., Беляев В.В.** 75
Моделирование характеристик органических полупроводников для электронных устройств
- Барнаш Я.В., Каманина Н.В.** 76
Влияние нанотрубок MoS₂ и WS₂ на динамику переключения жидкокристаллических ячеек на основе 5СВ
- Бутузов А.В., Лебедева Ю.Е., Серкова Е.А., Семина А.В., Кукушкина Е.А.** 77
Влияние синтактного жертвенного наполнителя на реологию фотоотверждаемой керамической пасты для технологии SLA
- Бызов Д.П., Миргалеев Г.М., Шилова С.В.** 78
Наночастицы альбумина как перспективная система доставки кортикостероидного препарата дексаметазона
- Глинов К.А., Вермейчик Я.В., Галева А.И., Галяметдинов Ю.Г.** 79
Получение и свойства лиотропных жидкокристаллических систем для адресной доставки нового сульфонида с включением фрагмента (L)-тирозина
- Ёров М.Н., Рахимова У.Дж., Эгамов М.Х.** 80
Температурная зависимость порогового напряжения для полимерно-жидкокристаллических композитов
- Делев В.А., Тимиров Ю.И.** 81
Новый сценарий образования шевронов в закрученных нематиках
- Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.** 82
Термочувствительная люминесценция мезогенных комплексов Европия(III)
- Исхаков А.Ф., Романова К.А., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.** 83
Сравнительный анализ предобученных свёрточных нейронных сетей для распознавания текстур мезофаз комплекса Европия(III)
- Капралова Т.С., Кураева Ю.Г., Онучак Л.А.** 84
Газохроматографическая сорбция органических соединений сорбентами на основе нематического жидкого кристалла и модифицированных β-циклодекстринов
- Клименко Д.Д., Селиванова Н.М.** 85
Биомедицинское применение гидрогелей на основе каппа-каррагинана и неионных ПАВ
- Коломиец И.П., Каретников А.А., Ковшик А.П., Рюмцев Е.И.** 86
Электрооптические и динамические свойства жидкокристаллических слоев с одинаковым и противоположным направлением преднаклона
- Краснопёров А.И., Пестов С.М.** 87
Термодинамическое моделирование систем жидкие кристаллы – бинарные растворители с помощью модифицированной групповой схемы

<i>Линкер О.С., Дьячкова Т.П., Чапаксов Н.А., Гутник И.В.</i>	88
Исследование процесса формирования гибридных систем «углеродные нанотрубки – оксид графена – полианилин»	
<i>Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.</i>	89
Многомасштабное моделирование жидкокристаллических комплексов лантаноидов(III) с контролируруемыми люминесцентными свойствами	
<i>Сальникова А.А., Шпынева М.А., Пестов С.М.</i>	90
Термодинамическое описание систем жидкие кристаллы – растворители	
<i>Саутина Н.В., Клементьева К.В., Галяметдинов Ю.Г.</i>	91
Жидкокристаллические структуры на основе АОТ для доставки инсулина	
<i>Ханчич О.А., Шутов А.И.</i>	92
Надмолекулярная структура при застудневании растворов полиамидбензимидазола в диполярных апротонных растворителях	
<i>СОДЕРЖАНИЕ</i>	93

Сетевое издание

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

**СБОРНИК ТЕЗИСОВ ДОКЛАДОВ
ВСЕРОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ
совместно со Школой молодых ученых**

Россия, Иваново, 19–20 мая 2026 г.

[12+]

Выпускается в авторской редакции и оформлении

Директор издательства *Л.В. Михеева*

Дата размещения на сайте 06.06.2026.
Уч.-изд. л. 5,5. Объем 4,3 Мб.

Издательство «Ивановский государственный университет»
✉ 153025 Ивановская обл., г. Иваново, ул. Ермака, 39
☎ (4932) 93-43-41. E-mail: publisher@ivanovo.ac.ru