

CONFERENCE CLUSTER  
SOLVATION  
CRYSTALLIZATION  
SMART MATERIALS  
2018

# КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018



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



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



Международный симпозиум  
«Умные материалы»

Летняя школа-конференция  
молодых ученых  
«Моделирование умных материалов»

## ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

1-6 июля 2018 г.  
Суздаль, Россия

**Федеральное агентство научных организаций  
Российский фонд фундаментальных исследований  
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН  
Российская академия наук  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
Ивановский государственный химико-технологический университет**

## **КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018:**

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

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

**Международный симпозиум «Умные материалы»**

**1 – 6 июля 2018 г.**

**г. Суздаль, Россия**

**Кластер конференций 2018 и Летняя школа-конференция молодых ученых «Моделирование умных материалов» проводятся при участии и поддержке:**



ФАНО России  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО  
НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

**Федеральное агентство научных организаций**



**Российский фонд фундаментальных исследований**

*Кластер конференций 2018 и Летняя школа-конференция молодых ученых «Моделирование умных материалов» проводятся при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований  
Проекты: № 18-03-20035,  
№ 18-33-10017 мол\_г*



**ИХР**

**Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН**



**Российская академия наук**



**Московский государственный университет  
им. М.В. Ломоносова**



**Ивановский государственный химико-  
технологический университет**



**ЗАО «ШАГ»**



**Компания Техноинфо Лтд.**



**ООО "СокТрейд Ко"**



**ООО "Фотокор"**



**ОАО «ИВХИМПРОМ»**

**INTERTECH Corporation**

**INTERTECH Corporation**

**Информационная поддержка**

Научно-практический журнал «Жидкие кристаллы и их практическое использование»  
Журнал «Известия высших учебных заведений. Серия «Химия и химическая технология»

## **КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018**

### **Организационный комитет**

**Председатель:** акад. РАН Лунин В.В. (МГУ, Москва)

**Сопредседатели:** д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бутман М.Ф. (ИГХТУ, Иваново)

**Ученые секретари:** к.х.н. Алексеева О.В., ИХР РАН, Иваново  
к.х.н. Волкова Т.В., ИХР РАН, Иваново

проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Антипа Е.В. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Антипин И.С. (ИОФХ РАН, Казань)  
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)  
проф. Бештер-Рогач М. (Университет Любляны, Словения)  
к.х.н. Будков Ю.А. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)  
акад. РАН Бузник В.М. (ВИАМ, Москва)  
проф. Бухнер Р. (Университет Регенсбурга, Германия)  
проф. Вацадзе С.З. (МГУ, Москва)  
проф. Викторов А.И. (СПбГУ, С.-Петербург)  
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)  
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)  
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С.-Петербург)  
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)  
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)  
проф. Идрисси А. (Университет Лилля, Франция)  
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Атлантики, Франция)  
проф. Каманина Н.В. (ГОИ им.С.И.Вавилова, С.-Петербург)  
проф. Козик В.В. (ТГУ, Томск)  
чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Корнышев А. (Имперский колледж, Великобритания)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Лу Т. (Тяньцзиньский Технологический Университет, Китай)  
проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Мартыанов О.Н. (ИК СО РАН, Новосибирск)  
чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)  
проф. Носков С. (Университет Калгари, Канада)  
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Родникова М.Н. (ИОНХ РАН, Москва)  
д.х.н. Румянцев Е.В. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Сафонова Л.П., (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Смирнова Н.А. (СПбГУ, С.-Петербург)  
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)  
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)  
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)  
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)  
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)  
проф. Щерблыкин И. (Университет г. Лунд, Швеция)

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

**Программный комитет**

**Председатель:** д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)  
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)  
проф. Дуров В.А. (МГУ, Москва)  
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Сафонова Л.П. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)  
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)  
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

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

**Программный комитет**

**Председатель:** чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)  
проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С-Петербург)  
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)  
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)  
проф. Мурашкевич А.Н. (БГТУ, Минск)  
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Усольцева Н. В. (ИвГУ, Иваново)  
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)  
проф. Шилова О.А. (ИХС РАН, С.-Петербург)

**Международный симпозиум «Умные материалы»**

**Программный комитет**

**Председатель:** проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Антина Е.В. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)  
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)  
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Антлантики, Франция)  
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)  
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)

**ЛОКАЛЬНЫЙ ОРГКОМИТЕТ**

Голубев В.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Дмитриева О.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)  
Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Каликин Н.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
Кручинин С.Е. (ИХР РАН, Иваново)  
Куликова Л.Б. (ИХР РАН, Иваново)  
Куликова О.М. (ИХР РАН, Иваново)

Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Носков А.В. (ИХР РАН, Иваново)  
Потемкина О.И. (ИХР РАН, Иваново)  
Пуховский Ю.П. (ИХР РАН, Иваново)  
Родионова А.Н. (ИХР РАН, Иваново)  
Трусова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)  
Юров М.Ю. (ИХР РАН, Иваново)

## THEORETICAL STUDY OF CO-NONSOLVENCY SUPPRESSION AT HIGH PRESSURES

Budkov Yu.A.<sup>1,2</sup>, Kolesnikov A.L.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> National Research University Higher School of Economics, Department of Applied Mathematics, Moscow, Russia

<sup>2</sup> G.A. Krestov Institute of Solution chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia

<sup>3</sup> Institut für Nichtklassische Chemie e.V., Universität Leipzig, Leipzig, Germany

[ybudkov@hse.ru](mailto:ybudkov@hse.ru)

Co-nonsolvency is an insolubility of a polymer in a binary mixture of good solvents [1] remains one of the most unexplored phenomena in physical chemistry of polymer solutions. Indeed, despite the great efforts of both the experimentalists [1-3] and the theoreticians [4-6] in the co-nonsolvency investigation, its microscopic mechanism and thermodynamic nature remain partially misunderstood till now. In the dilute polymer solutions co-nonsolvency manifests itself as the coil-globule transition at the certain value of the co-solvent mole fraction [1]. Importance of the co-nonsolvency is related to the fact that it is a generic physical phenomenon, taking place in both the solutions of biological macromolecules [2] and the solutions of synthetic polymers [3]. Nevertheless, polymer solutions exhibiting co-nonsolvency are a good example of smart (or environmentally driven) systems. Recently, the authors of present report formulated statistical theory based on the modern liquid-state theory of a flexible polymer chain in a mixed solvent and applied it to the co-nonsolvency description [7]. It was confirmed that co-nonsolvency could be obtained within the theory taking into account only the universal excluded volume and van der Waals intermolecular interactions. It has been confirmed, in addition, that the key microscopic parameter driving the co-solvent-induced polymer chain collapse is the difference between the energetic parameters of attractive interactions of 'polymer-solvent' and 'polymer-co-solvent'. Despite this mean-field model success in the co-nonsolvency description, the theoretical investigation of the pressure effect on co-nonsolvency has not been addressed up to present. In present report we will demonstrate an applicability of our theoretical model to description of early discovered in experiment [2] co-nonsolvency suppression at high pressure [8]. In addition we will demonstrate that theoretical prediction for the gyration radius of the flexible polymer chain in the mixture of two good solvents is in a good agreement with early obtained MD simulation results [5,6].

1. H.G. Schild, M. Muthukumar and D.A. Tirrell *Macromolecules*, 1991, **24**, 948.
2. C.H. Hofmann, S. Grobelny, M. Erlkamp, R. Winter and W. Richtering *Polymer*, 2014, **55**, 2000.
3. B.A. Wolf and M.M. Willms *Macromol. Chem*, 1978, **119**, 2265
4. Tanaka Fumihiko, Koga Tsuyoshi and Winnik F. M. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, **101**, 028302
5. Mukherji Debashish and Kremer Kurt *Macromolecules*, 2013, **46**, 9158
6. Mukherji D., Marques C. M. and Kremer K., *Nat. Commun.*, 2014, **5**, 4882
7. Yu. A. Budkov, A. L. Kolesnikov, N. N. Kalikin and M. G. Kiselev *Euro. Phys. Lett.*, 2016, **114**, 46004
8. Yu. A. Budkov and A. L. Kolesnikov *Soft Matter*, 2017, **13**, 8362

## МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ДИФFUЗИОННО-УПОРЯДОЧЕННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ DOSY В ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ

Ходов И.А.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

<sup>2</sup> Казанский федеральный университет, Казань, Россия

[ilya.khodov@gmail.com](mailto:ilya.khodov@gmail.com)

Спектроскопия ЯМР широко применяется в исследовании структуры и динамики молекул, макроциклических супрамолекулярных металлокомплексов на основе порфиринов, фталоцианинов, хлоринов и др. Применение современных методов ЯМР спектроскопии занимают особое место в исследовании особенностей образования межмолекулярных комплексов и ассоциатов, распознавания и реорганизации супрамолекулярных структур [1]. Существует ряд эффективных подходов в ЯМР спектроскопии для исследования межмолекулярных взаимодействий таких комплексов. К ним относятся как классические подходы, основанные на анализе химических сдвигов и времен релаксации, так и современные двумерные ЯМР методы, основанные на ядерном эффекте Оверхаузера и методы, основанные на диффузионно-упорядоченной спектроскопии DOSY. Среди подходов ЯМР более перспективным и активно развивающимся методом в оценке параметров межмолекулярного взаимодействия, является подход основанный анализе величин коэффициентов самодиффузии, полученный методом DOSY. Данный подход, в настоящее время, получил широкое распространение,

однако, только для качественных оценок межмолекулярного взаимодействия. Получения достоверных величин, которые могут использоваться для количественного анализа, является не простой задачей, так как существует большое число факторов, влияющих на конечный результат. К ним относятся, как и большое число экспериментальных параметров, которые необходимо контролировать с большой точностью (высота образца, однородность поля, форма импульса, оптимальная скорость потока газа и т.д.) так и большое число влияющих факторов, которые обусловлены химической структурой и внутримолекулярной подвижностью характеристических групп исследуемого соединения.

В данной работе будут представлены результаты анализа двух различных подходов в ЯМР спектроскопии для получения коэффициентов самодиффузии на примере хорошо известных в литературе металлокомплексов [2]. Будет продемонстрированы особенности влияния обменных взаимодействий на количественные характеристики коэффициентов самодиффузии, а также на точность их определения.

*Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 и в рамках государственного задания номер государственной регистрации 01201260481.*

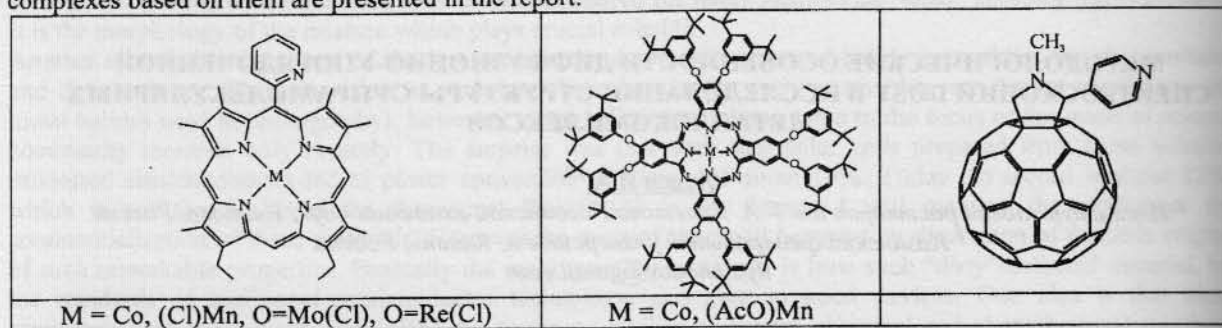
1. S. Durot, J. Taesch, V. Heitz. *Chem. Rev.*, 2014, **114**, 8542-8578.
2. I.A. Khodov. *Macroheterocycles*, 2017, **10**, 313-316.

## STUDY OF THE PHOTORESPONSE OF A TITANIUM ANODE MODIFIED WITH FILMS BASED ON PORPHYRIN/PHthalOCYANINE d-METAL COMPLEXES

Bichan N.G., Ovchenkova E.N., Kudryakova N.O., Mozgova V.A., Lomova T.N.  
G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russia  
bng@isc-ras.ru

The research in the field of preparation and study of donor-acceptor ensembles capable of photoinduced transfer of energy and electrons are actively conducting the last decades [1]. As components of the abovementioned ensembles, the porphyrin/phthalocyanine complexes of *d*-metals attract great interest due to high chemical, electro- and photochemical stability and large coordination ability of a metal-ion, which promotes wide possibilities of compound modifications via metal-ligand axial coordination.

The data on photoelectrochemical characteristics of a titanium electrode with natural oxide film (NOF) modified by the Mn/Co/Mo/Re porphyrins/phthalocyanines, pyridyl substituted [60]fulleropyrrolidine and donor-acceptor complexes based on them are presented in the report.



It was found that these films are photosensitive. The influence of the macrocycle chemical structure, metal ion type and supramolecule composition on photoelectrochemical characteristics is discussed in the report. So, the photocurrent ( $j_{ph}$ ) increases in the numbers O=Re(Cl)P < O=Mo(Cl)P < (Cl)MnP < Co<sup>II</sup>P (where P - 5-(2-pyridyl)-2,3,7,8,12,18-hexamethyl-13,17-diethyl-21H, 23H-porphyrin [2]) and CoPc < (AcO)MnPc (where Pc - octakis(3,5-di-*tert*-butylphenoxy)phthalocyanine).

The best results were obtained for the supramolecular triad (PyC<sub>60</sub>)<sub>2</sub>Co<sup>II</sup>P (where PyC<sub>60</sub> - 1'-N-methyl-2'-(pyridin-4-yl)pyrrolidino[3',4':1,2][60]fullerene). The value of  $j_{ph}$  for (PyC<sub>60</sub>)<sub>2</sub>Co<sup>II</sup>P is higher by factors of 2.5 and 3 than those for individual Co<sup>II</sup>P and PyC<sub>60</sub> components of donor-acceptor system, respectively.

The maximum IPCE value of (PyC<sub>60</sub>)<sub>2</sub>Co<sup>II</sup>P approaching 70 % at  $\lambda_{exc}$  365 nm is significantly larger than that of the Co<sup>II</sup>P and PyC<sub>60</sub>. An increase of the cell parameters indicates the effect of the photoinduced charge separation between the Co<sup>II</sup>P donor and the PyC<sub>60</sub> acceptor in supramolecular triad.