

**The Ministry of Education and Science of the Russian Federation
Federal Agency for Scientific Organizations
Russian Academy of Sciences
Academy of Sciences and Arts of the Republika Srpska
Ivanovo State University of Chemistry and Technology
G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of Russian Academy of Sciences
N. A. Nekrasov Kostroma State University
Voronezh State Technical University
A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis
Serbian Royal Academy of Scientists and Artists
Serbian Royal Academy of Innovation Sciences
University Union “Nikola Tesla”, Faculty of Business and Industrial Management**

4th International Conference

**«New Functional Materials
and High Technology»**

Abstracts

**4-9 July 2016
Tivat, Montenegro**

**Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное агентство научных организаций
Российская академия наук
Академия наук и искусств Республики Сербия
Ивановский государственный химико-технологический университет
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Костромской государственный университет им. Н.А. Некрасова
Воронежский государственный технический университет
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН
Сербская королевская академия наук и искусств
Сербская королевская академия инновационных наук
Университетский союз “Никола Тесла”, Факультет бизнеса и промышленного
менеджмента**

«Новые функциональные материалы и высокие технологии»

IV Международная научная конференция

Тезисы докладов

**4-9 июля 2016 г.
Тиват, Черногория**

УДК 001.8 : 544.6 (043.2)

«Новые функциональные материалы и высокие технологии» IV
Международная научная конференция, Тиват, Черногория, 4-9 июля 2016 г.:
тезисы докладов. – Иваново: Ивановский государственный химико-
технологический университет, 2016. 181 с.

ISBN 978-5-9616-0518-1

Редакторы: Парфенюк В.И., Лутовац М.

4th International Conference «New Functional Materials and High Technology»,
Tivat, Montenegro, 4-9 July 2016: Abstracts. – Ivanovo: Ivanovo State University of
Chemistry and Technology, 2016. – 181 p. - ISBN 978-5-9616-0518-1.

Editors: Parfenyuk V.I., Lutovac M.

ISBN 978-5-9616-0518-1

© «Ивановский государственный
химико-технологический университет», 2016

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

Проф. Парфенюк В.И.

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

Ученый секретарь:

К. т. н. Тесакова М.В.

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

Заместитель председателя:

Проф. Лутовац М. Университет «Унион», Белград, Сербия

Члены оргкомитета:

Проф. Базанов М.И., Россия Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Проф. Белкин П.Н., Костромской государственный университет им. Н. А. Некрасова, Россия

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

Чл.- корр. РАН Койфман О.И., Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Проф. Кривенко А.Г., Институт прикладной химической физики РАН, Черноголовка, Россия

Проф. Почивалов К.Н., Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

Проф. Шалимов Ю.Н., Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

Hon.D.Sc. Predrag Dašić, SaTCIP Publisher Ltd., Vrnjačka Banja (Serbia)

Acad. Prof. dr Rade Biočanin, University of Novi Pazar, Novi Pazar (Serbia)

Dr Nataša Bogavac, University Union "Nikola Tesla", Belgrade (Serbia)

Akademik Prof. dr Milka Đukić, University Union "Nikola Tesla", Belgrade (Serbia)

Acad. Prof. dr Gordana Gasmi, Institute of Comparative Law, Belgrade (Serbia)

Prof. dr Raycho Ilarionov, rector, Technical University of Gabrovo (Bulgaria)

Prof. dr Constantin Bungau, rector, University of Oradea, Oradea (Romania)

Prof. dr Vlatko Marušić, University of Osijek, Mechanical Engineering Faculty, Slavonski Brod (Croatia)

Acad. Prof. dr Tomislav Pavlović, Academy of Sciences and Arts of the Republic of Srpska (ANURS), Banja Luka (Republic of Srpska - Bosnia and Hercegovina)

Acad. Prof. dr Stane Pejocnik, Slovenian Academy of Sciences and Arts (SAZU), Ljubljana (Slovenia)

Acad. Prof. dr Džerald Polak, Washington University, Seattle (Washington - USA)

Prof. dr Adolfo Senatore, University of Salerno, Faculty of Mechanical Engineering, Fisciano (Italy)

Prof. dr Nikolaos Vaxevanidis, Institute of Pedagogical & Technological Education, N. Heraklion Attikis (Greece)

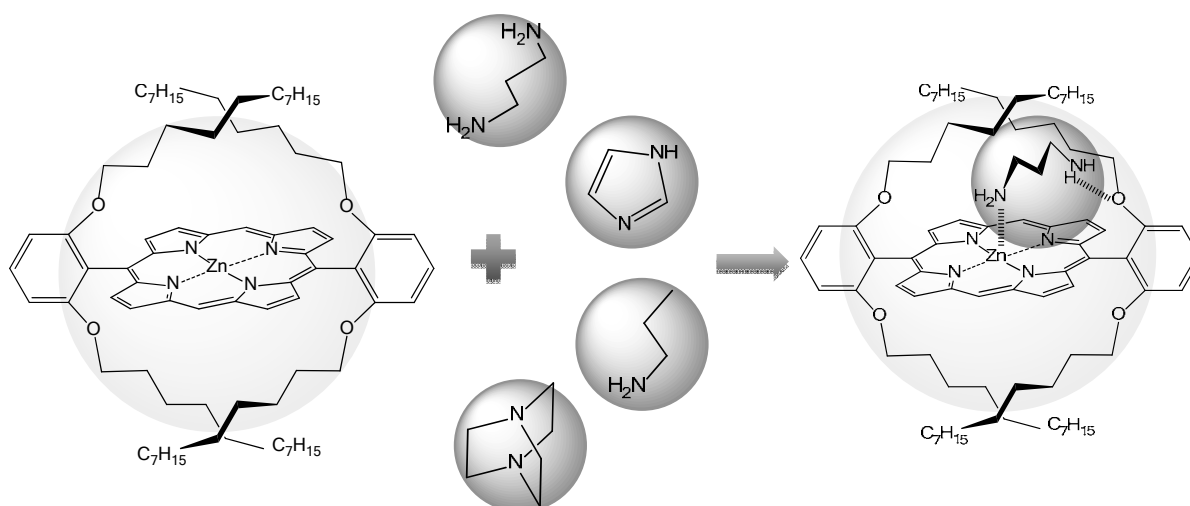
Prof. dr Igor Sergeevich Sazonov, rector, Belarusian-Russian University, Mogilev (Belarus)

ОДНО- И ДВУХТОЧЕЧНОЕ СВЯЗЫВАНИЕ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ ОСНОВАНИЙ ZN[5,15-(ДИ-2,6-ДОДЕЦИЛОКСИФЕНИЛ)]ПОРФИРИНОМ

**Мальцева О.В., Лазовский Д.А., Ходов И.А., Мамардашвили Г.М.,
Мамардашвили Н.Ж.**

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия,
ovt@isc-ras.ru

Целью настоящей работы является исследование распознавательной способности молекулярного лиганда Zn-5,15-ди-(2,6-дидодецилоксифенил)порфирина (ZnP1) по отношению к различным органическим лигандам. Процессы комплексообразования ZnP1 с имидазолом, 1,3-диаминпропаном, 1-аминпропаном и диазабицикло[2,2,2]октаном были изучены методом спектрофотометрического титрования, ЯМР-спектроскопии и квантово-химических расчётов.



Наличие додецилоксизаместителей по обе стороны порфиринового макроцикла в орто-положениях двух диаметральных фенильных колец может, как повышать связывающую способность порфирина Zn(II) по отношению к малым органическим лигандам (аминам, имидазолу), так и препятствовать процессу его взаимодействия с более объемными лигандами, например, такими как 1,4-диазабицикло[2,2,2]октан.

Таблица 1.

Константы устойчивости (K_{ass}) аксиальных комплексов ZnP1 и ZnP2 с органическими лигандами в толуоле.

| L | ZnP | ZnP1 | ZnP2* |
|--------------|-----|-------|--------|
| имидазол | | 14000 | 8200 |
| пропиламин | | 17200 | 3800 |
| пропилдиамин | | 52200 | 3600 |
| DABCO | | 11000 | 167000 |

* Zn-5,15-(дифенил)порфирин [1]

Как показали квантово-химические расчёты, проведённые методом DFT, хорошее геометрическое соответствие размера внутримолекулярной полости размеру аксиального лиганда, обеспечивающее наиболее прочное связывание и алкильных аминов, и имидазола, достигается благодаря способности этой полости подстраиваться под размер молекулы, координирующейся на катионе цинка. Наиболее же прочные комплексы Zn-5,15-(ди-2,6-додецилоксифенил)порфирина образует с пропилдиамином, когда лиганд не только встраивается во внутримолекулярную полость, но и образует с её стенками – боковыми заместителями дополнительные водородные связи.

Для подтверждения данного предположения был разработан подход в двумерной ЯМР спектроскопии. Эксперименты псевдодвумерной диффузионно-упорядоченной спектроскопии DOSY подтвердили комплексообразование исследуемых соединений. В дополнении к этому, ZnP1 и его комплексы с лигандами были полностью охарактеризованы при помощи двумерной корреляционной спектроскопии (2D COSY), что позволило определить принадлежность сигналов в одномерном ЯМР эксперименте к характеристическим группам исследуемого соединения.

Результаты анализа данных ЯМР спектроскопии хорошо согласуются с экспериментальными данными спектрофотометрического титрования и структурами, полученными из квантово-химических расчетов.

Исследования процессов аксиальной координации органических оснований различной природы на алкоксифенилзамещённых порфиринах может дать научную основу для достижения более эффективного и долгоживущего разделения зарядов в надмолекулярных донорно-акцепторных комплексах, для выявления перспектив повышения эффективности и производительности DSSCs.

ЛИТЕРАТУРА

[1] О.М. Куликова, Н.Ж. Мамардашвили // Тез. XII Международной конференции «Синтез и применение порфиринов и их аналогов» (ICPC-12,) 2016 г., Иваново, с.58.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 14-13-00232.

ПРОТОЛИТИЧЕСКАЯ ДИССОЦИАЦИЯ АКСИАЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ Zn-ПОРФИРИНОВ С АЗОТСОДЕРЖАЩИМИ ОРГАНИЧЕСКИМИ ЛИГАНДАМИ

Мамардашвили Г.М.¹, Симонова О.Р.¹, Койфман О.И.^{1,2}

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

Иваново, Россия, E-mail: gmm@isc-ras.ru

²Институт химии макрогетероциклических соединений, Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Аксиальная координация дополнительных лигандов на порфиринах металлов лежит в основе важнейших биологических функций природных порфиринов и обуславливает практически полезные каталитические, электрохимические, сенсорные, рецепторные и т.д. свойства синтетических порфиринов. Порфириновый рецептор в таких молекулярных устройствах может выполнять роль детектора или транспортного средства для обнаружения