
**TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

МАТЕРИАЛЫ

**XXIV Международной научно-практической
конференции студентов и молодых ученых**

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ В XXI ВЕКЕ ТОМ 1

ХХТ-2023

15 – 19 мая 2023 года, г. Томск

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФОТОФИЗИКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ БИС(АРИЛИДЕН)ЦИКЛОАЛКАНОНОВ

Р. О. Старостин, А. Я. Фрейдзон, С. П. Громов
Научный руководитель – к.х.н., доцент А. Я. Фрейдзон

Центр фотохимии РАН, ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
119421, Москва, ул. Новаторов 7А-1, star.roman-96@yandex.ru

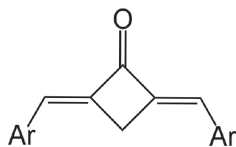
Благодаря своим фотохромным и флуоресцентным свойствам α,α' -бисарилиденные производные циклических кетонов (кросс-сопряжённые диеноны циклоалканонного ряда) имеют большой практический потенциал в качестве фотоинициаторов, как в процессах производства материаловедении [1], так и в рамках клинической терапии [2–3].

На основе анализа результатов теоретических исследований диенонов циклоалканонных серий, описанных в литературе [4–6] были рассмотрены способы модификации молекулярного каркаса красителей для создания новых представителей класса с потенциально полезными свойствами. Были установлены стабильные структуры модельных диенонов. Изучены закономерности переходов между основным и нижним, возбуждёнными состояниями, пути релаксации возбуждения.

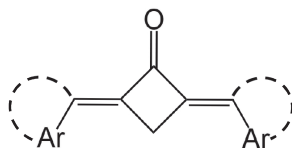
Кванто-химические расчёты проводились с использованием методов DFT и TDDFT с функционалом PBE0 в базисе 6-31+G(d,p) в программе Firefly. Влияние растворителя учитывалось с использованием континуальной модели.

Проанализировано влияние структуры ароматических и гетероароматических фрагментов и остатков на положение максимумов поглощения и излучения в расчётных спектрах исследуемых соединений, а также на механизм структурной релаксации, обусловленной вращением вокруг экзоциклических двойных связей. Были предложены модели диенонов, обладающие наиболее перспективными фотофизическими свойствами для практического применения.

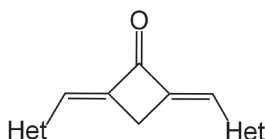
Работа была выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-13-00064).



Ar = C₆H₅, C₆H₄OCH₃, C₆H₃(OCH₃)₂, C₆H₄N(CH₃)₂,
C₆H₄SCH₃, 1-C₁₀H₈, 2-C₁₀H₈, 2-C₁₄H₁₀



Ar = Ph,  = -O-CH₂-, -S-CH₂-, -CH₂-CH₂-,
-CH₂-O-CH₂-



Het = 2-C₄H₄N, 3-C₄H₄N, 2-C₄H₃S, 3-C₄H₃S, 2-C₄H₃O, 3-C₄H₃O

Схема 1.

Список литературы

1. Nazir R., Bourquard F., Balciunas E., Smolen' S., Gray D., Tkachenko N.V., Farsari M., Gryko D.T. π -Expanded α,β -Unsaturated Ketones: Synthesis, Optical Properties, and Two-Photon-Induced Polymerization // *Chem. Phys. Chem.*, 2015. – Vol. 16. – P. 682–690.
2. Zou Q., Zhao H., Zhao Y., Fang Y., Chen D., Ren J., Wang X., Wang Y., Gu Y., Feipeng W. // *J. Med. Chem.*, 2015. – V. 58. – P. 7949–7958.
3. Lin Y.; Jiang X-F., Duan X., Zeng F.; Wu B.; Wu S. // *ACS Med. Chem. Lett.*, 2018. – V. 9. – № 1. – P. 23–27.
4. Vatsadze S. Z., Gavrilova G. V., Zyuz'kevich F. S., Nuriev V. N., Krut'ko D. P., Moiseeva A. A., Shumyantsev A. V., Vedernikov A. I., Churakov A. V., Kuz'mina L. G., Howard, J. A. K., Gromov S. P. // *Russ. Chem. Bull.*, 2016. – V. 65. – 1761.
5. Fomina M. V., Freidzon A. Ya., Kuz'mina L. G., Moiseeva A. A., Starostin R. O., Kurchavov N. A., Nuriev V. N., Gromov S. P. // *Molecules*, 2022. – V. 27. – № 21. – P. 7602–7625.
6. Fomina M. V., Vatsadze S. Z., Freidzon A. Ya., Kuz'mina L. G., Moiseeva A. A., Starostin R. O., Nuriev V. N., Gromov S. P. // *ACS Omega*, 2022. – V. 7. – № 12. – P. 10087–10099.

ЗАКОНОМЕРНОСТИ СОРБЦИИ СУЛЬФОПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОКСО- И АМИНО-НАФТАЛИНА НА АМИНИРОВАННОМ КРЕМНЕЗЕМЕ

А. А. Тимофеева

Научный руководитель – к.х.н., доцент С. Л. Дидух-Шадрина

Сибирский федеральный университет

Институт цветных металлов и материаловедения

Кафедра физической и неорганической химии

660041, Россия, г. Красноярск, пр. Свободный, 79, an.natm@yandex.ru

Несмотря на большое количество существующих сорбентов, применяемых в химическом анализе, и способов их получения, большая их часть остается недоступной для широкого использования. Для создания высокоселективных сорбентов предложен подход послойного модифицирования неорганических оксидов (НО) полиаминами и комплексообразующими органическими реагентами (ОР) [1]. Каждый нанесенный слой на поверхность НО сохраняет свои функциональные свойства. Данный подход позволяет предсказать физико-химические свойства сорбента в зависимости от природы закрепленного ОР. А возможность прогнозирования условий модифицирования аминированных НО комплексообразующими ОР в зависимости от природы и числа функциональных групп остается актуальной задачей. Поэтому целью данной работы являлось изучение закономерностей сорбции сульфопроизводных гидроксо- и амино-нафталины на аминированном кремнеземе.

В качестве модификаторов-полиаминов (ПА) выбраны полигексаметиленгуанидин (ПГМГ) и полидиметидиалиамония хлорид (ПДДА). Для определения массовой доли нанесенного полимера на кремнезем регистрирова-

лись термограммы исходного и модифицированного SiO_2 . Исходя из количества закрепленного ПА на поверхности сорбента (1,7 % для SiO_2 -ПГМГ и 1,8 % для SiO_2 -ПДДА) было рассчитано количество анионообменных центров (АОЦ) на поверхности сорбента, которое составило 120 мкмоль/г для SiO_2 -ПГМГ и 143 мкмоль/г для SiO_2 -ПДДА.

Содержание водорода, углерода и азота на поверхности SiO_2 -ПА определенное методом элементного анализа совпадают в пределах ошибки с расчетными значениями, исходя из данных ТГА.

В независимости от природы закрепленного ПА СЕМ-изображения имеют идентичный характер и свидетельствуют об аналогичных изменениях поверхности. После обработки кремнезема ПА на его поверхности образуется плотное покрытие, наблюдается более плотный контакт глобул и изменение их формы на менее сферическую, что приводит к уменьшению количества глубоких пор.

Нанесенные ПА, создают положительный заряд поверхности кремнезема, в результате этого они способны к электростатическому взаимодействию с отрицательно заряжен-