

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»

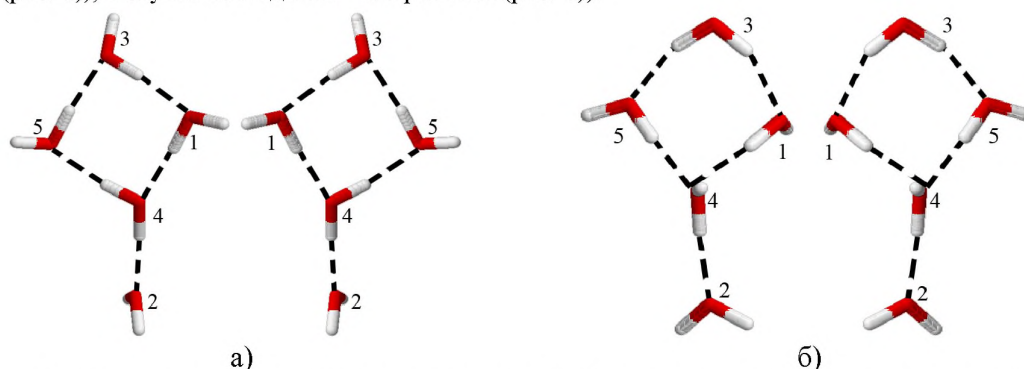
водной структуры является наличие в ней четырех связанных водородными связями молекул воды, расположенных не в одной плоскости.

Метод учета хиральности водной системы [2] основан на представлении ее в виде ориентированного графа: вершины – атомы кислорода, ребра – линии, соединяющие атомы кислорода взаимодействующих молекул воды, направление ребер – от атома кислорода молекулы акцептора к атому кислорода молекулы донора электрона, участвующих в водородной связи.

Затем проводится анализ взаимного расположения атомов кислорода и сетки водородных связей. Для этого в системе выделяются элементарные структуры из четырех связанных молекул воды (наименьшие возможные хиральные структуры). После чего, для начальной водной системы и ее зеркального образа строится матрица. В ней учитывается:

- 1) количество связанных молекул с первой молекулой из элементарной структуры;
- 2) номер молекулы из элементарной структуры, связанной с четвертой молекулой воды из элементарной структуры;
- 3) принадлежность элементарной структуры к правой или левой структуре.

В случае несовпадения матриц для исходной водной системы и для ее образа, структура считается хиральной (рис. а)), в случае совпадения – ахиральной (рис. б)).



Описанным методом проводился анализ водных систем без примесей (до 10 молекул воды) и с примесными центральными ионами  $K^+$  или  $Na^+$  при температуре 1 и 300 К. А так же наиболее вероятные водные оболочки (толщиной до 10 Å) молекулы валина ( $C_5H_{11}NO_2$ ), глицеральдегида ( $C_3H_6O_3$ ) и эритрозулы ( $C_4H_8O_4$ ). Выявлено, в выборках для них отсутствие преобладания правых или левых структур. Кроме того, обнаружено увеличение количества хиральных структур с увеличением количества молекул воды, входящих в систему.

1. В.И. Голданский, В.В. Кузьмин. *УФН*, 1989, **157**, 3-50.
2. А.В. Хахалин, О.Н. Градобоева. *Ж. структур. химии*, 2016, **57**, № 5, 971-977.

## ПОЛУЧЕНИЕ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ КОМПОЗИЦИИ ДЛЯ ПРИДАНИЯ ОГНЕСТОЙКОСТИ ТЕКСТИЛЬНЫМ МАТЕРИАЛАМ С ПРИМЕНЕНИЕМ СИЛИКАТА НАТРИЯ

Такей Е., Таусарова Б.Р.

*Алматинский технологический университет, г.Алматы, Казахстан*

Разработка материалов, обладающих качественно новыми свойствами, позволяющими реализовывать новые, недостижимые с позиций традиционной технологии показатели, является актуальной задачей. Качественный прорыв в данной области связан с развитием методов массового синтеза наноматериалов, обладающих необходимыми для практического применения свойствами. Наиболее интересным и перспективным подходом к созданию функциональных и умных наноматериалов является золь-гель технология. Данная технология базируется на реакциях гидролиза, полимеризации и поликонденсации в растворах с формированием системы золя и последующим ее переходом в гель. Золь-гель технология в настоящее время широко развивается и внедряется в производство получения огнестойких покрытий, волокон и других неорганических материалов [1-3].

Целью настоящего исследования является получение текстильных материалов с огнезащитными свойствами с применением золь-гель технологии.

В качестве объекта исследования в работе являлась: хлопчатобумажная ткань артикула 1030 и химические вещества, способные снизить горючесть текстиля и дымообразования токсичных продуктов горения.

Образцы хлопчатобумажной ткани полотняного переплетения обрабатывают водным раствором силиката натрия, катализатор гидролиза  $CH_3COOH(70\%)$  пропитка при 25-30°C в течении 1 минуты, далее на двух вальной плюсовке с последующим отжимом со степенью 90%. Затем ткань подвергли

сушке при температуре 75<sup>0</sup>С в течении 8-10 минут. Далее обработанная ткань подвергалась термообработке при 110, 130, 150<sup>0</sup>С в течении 1 минуты, на второй стадии пропитывают водным раствором антипирена, после отжима 90%, высушивание при 75<sup>0</sup>С в течении 3 мин в термошкафу, с последующей промывкой в дистиллированной воде и высушивался при комнатной температуре.

Исследования показали, что используемые составы в оптимальных концентрациях обеспечивают высокий эффект огнезащиты ткани. Длина обугленного участка предлагаемой композиции варьируется 98-136мм, так когда длина обугленного участка необработанной ткани составляет 220 мм. Согласно электронно-сканирующей микроскопии и проведенному энергодисперсионному микроанализу чистая хлопковая ткань содержит С - 69.95% О – 30.05%. После модификации на поверхности обработанной ткани образуются частицы: Si- 6.91%, P – 4.25%, S-2.26% которые распределены достаточно неравномерно. Показано, что с повышением концентрации антипирена в модифицирующем составе в обработанных образцах содержание фосфора и серы возрастает до 6.16% и 3.73.% соответственно.

Разработан состав на основе силиката натрия, и антипирена для придания текстильным материалам огнезащитных свойств. Показано, что у целлюлозных материалов, модифицированных предлагаемыми композициями, повышаются огнезащитные свойства.

1. WanNorfazilahWanIsmail. *J Sol-Gel Sci Technol.* 2016. 78. 698–707.
2. YuanlinRen, Yue Zhang, YetongGu, Qian Zeng. *Progress in Organic Coatings.* 2017. 112. 225–233.
3. D. Zhang et al. *Journal of Colloid and Interface Science.* 2017. 505. 892–899

### ВЛИЯНИЕ КАТИОННОГО СОСТАВА НА СТАБИЛЬНОСТЬ КОМПЛЕКСОВ Zr-O-F И Al-O-F

Воробьев А.С., Галашев А.Е., Суздальцев А.В.

*Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург, Россия  
alex2006-91@mail.ru*

В настоящее время, широкое распространение получили сплавы алюминия со многими металлами, в том числе и цирконием. Одним из способов получения сплавов Al-Zr является восстановление оксида ZrO<sub>2</sub> алюминием в условиях электролиза оксидно-фторидного расплава [1]. Для полного представления необходимы данные относительно ионного состава таких расплавов. Ранее [2] было показано, что циркониевые комплексы обладают меньшей энергией связи нежели аналогичные алюминиевые комплексы. Однако рассмотренная в работе [2] модель не учитывает присутствие в системе свободных катионов, например Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>.

В данной работе рассмотрен случай добавления положительно заряженных катионов в ряд наиболее стабильных соединений X<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F<sub>y</sub><sup>z-</sup>, где X – Al или Zr, а z – заряд получившегося соединения, y – количество атомов фтора. Расчеты были выполнены в программном пакете Siesta. Геометрическая оптимизация была проведена с использованием обобщенного градиентного приближения в форме Perdew-Burke-Ernzerhof, без закрепления координат.

В результате, можно сделать несколько выводов: добавление катионов уменьшает энергию связей алюминиевых и циркониевых комплексов; энергия связей циркониевых комплексов меньше энергии связей алюминиевых комплексов для аналогичных соединений; наименьшей энергией связи в соединении M<sub>2</sub>X<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, где M – атом Li, Na, K обладают соединения содержащие литий.

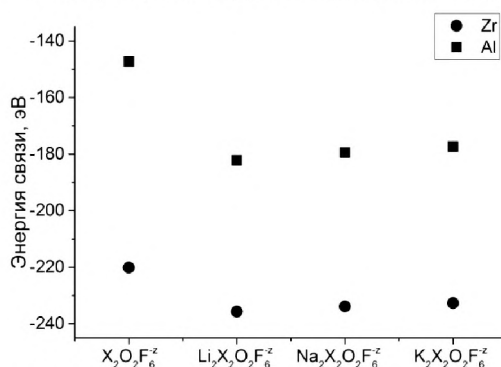


Рис. Энергия связи комплексов X<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F<sub>y</sub><sup>z-</sup> при добавлении катионов Li, Na, K, взятая в эВ, где X – Zr или Al, z – заряд комплекса

1. Filatov A.A., Pershin P.S., Suzdaltsev A.V., Nikolaev A.Yu., Zaikov Yu.P. *J. Electrochemical Society*, 2018, Vol. 165(2) E28-E34.
2. Воробьев А.С., Галашев А.Е., Суздальцев А.В. Тезисы XI-ой Всероссийской школы-конференции молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем (Крестовские чтения)», 2017, с. 56-57.