

**RECKITT
BENCKISER**



Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
Научно-образовательный центр «Химия в интересах устойчивого развития – зеленая
химия»

Химический факультет и Научный парк
Компания «Рекитт Бенкизер»

M. V. Lomonosov Moscow State University
Scientific-Educational Center "Sustainable – Green Chemistry"
Science Park and Faculty of Chemistry
Reckitt Benckiser Company

СОВМЕСТНЫЙ СЕМИНАР

НОВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА БЫТОВЫХ ЧИСТЯЩИХ СРЕДСТВ

JOINT WORKSHOP

NEW CHEMICAL TECHNOLOGIES FOR HOUSEHOLD CLEANING

МОСКВА, МГУ 24, 25 мая 2007 г.
MOSCOW, MOSCOW STATE UNIVERSITY, May 24, 25, 2007

Организационный комитет:

В. В. Лунин, академик РАН, профессор, декан химического факультета МГУ, председатель

А. А. Бучаченко, д.ф.-м.н., заместитель декана химического факультета МГУ, зам. председателя

Е. В. Якубович, к.х.н., Научный отдел химического факультета МГУ, секретарь

О. В. Мовсесян, Научный Парк МГУ, генеральный директор

Е. С. Локтева, к.х.н., Научно-образовательный центр «Химия в интересах устойчивого развития – зеленая химия»

Малколм Мак-Кечни, доктор, Компания «Рекитт Бенкизер», менеджер по новым технологиям

Михаил Лачинов, специалист по науке и инновациям, Отдел науки, охраны окружающей среды и глобального партнерства Посольства Великобритании в РФ

Organizing Committee:

Prof. **Valery V. Lunin**, academician RAS, professor, Dean of the MSU Faculty of Chemistry, chairman

Dr. **Alexei A. Buchachenko**, Deputy Dean of the MSU Faculty of Chemistry, Vice chairman

Dr. **Ekaterina V. Yakubovich**, Scientific Department, MSU Faculty of Chemistry, Secretary

Dr. **Oleg V. Movsesyan**, MSU, Science Park CEO

Dr. **Ekaterina S. Lokteva**, Scientific-Educational Center "Sustainable – Green Chemistry"

Dr. **Malcolm McKechnie**, Reckitt Benckiser, Technology Sourcing Manager

Mr. **Mikhail Lachinov**, Science and Innovation Officer, Science, Environment and Global Partnership section, British Embassy

ПРЕДМЕТ И ФОРМАТ СЕМИНАРА

Основная цель семинара – презентация международной компании «Рекитт Бенкизер», мирового лидера в создании и производстве бытовых чистящих средств, и установление сотрудничества между компанией и представителями российской науки. Компания надеется как на приобретение готовых технологий, так и на развитие перспективных прикладных исследований, направленных на решение сформулированных ниже задач.

Первое заседание семинара пройдет 24 мая в Научном парке МГУ. В его программу включены презентации химического факультета, как основного первичного российского партнера компании, Британско-Российской инновационной сети, положившей начало сотрудничеству «Рекитт Бенкизер» и МГУ, самой компании, а также доклады российских ученых – экспертов и представителей научных групп, имеющих серьезный задел в решении объявленных задач.

Желающим принять участие в семинаре следует зарегистрироваться, прислав информацию о себе по адресам market@market.chem.msu.ru или alexei@classic.chem.msu.su до 22 мая.

Второй день семинара, 25 мая, представители компании проведут на химическом факультете МГУ (помещении деканата, 4ый этаж), где состоятся встречи и дискуссии с учеными – потенциальными партнерами компании. Предмет и время встречи согласуются заранее. Желающим необходимо до 24 мая выслать на адрес alexei@classic.chem.msu.su информацию о себе, включая электронный адрес и номер контактного телефона, и краткую аннотацию предложения для компании. Договориться о встрече можно будет и персонально после заседания семинара 24 мая.

Язык семинара – английский. При необходимости будет осуществляться перевод.

PURPOSE AND FORMAT OF THE WORKSHOP

The main purpose of the seminar is the presentation of the International Rikett Benckiser Company, the world leader in the development and manufacturing of the household cleaning products, and establishment of the partnership between the company and Russian scientists. The company seeks for new technologies as well as the perspective applied scientific research aiming the solution of actual problems formulated below.

The first session on May 24 will be held at Moscow State University Science Park. The program includes the presentations of Faculty of Chemistry, the primary Rikett Benckiser Russian scientific partner, British-Russian Innovation Network, that seeded the contacts between the Company and the University, the Company itself, as well as the reports of Russian scientists – leading experts and members of the scientific groups with significant experience in the topic.

Those who wish to participate are requested to register sending personal information to market@market.chem.msu.ru or alexei@classic.chem.msu.su before May 22.

The second day, May 25, the Company representatives will spend at the Faculty of Chemistry (Dean's office, 4th floor) They will be ready to meet the scientists – potential partners of the Company and discuss their proposals. The subject and time of the meeting should be fixed in advance. Those who wish to arrange a meeting are requested to send the personal information (including e-mail address and phone number) and short summary of their proposal to alexei@classic.chem.msu.su before May 24. The meeting can also be arranged on May 24 after the workshop session.

Workshop will be held in English. Translation will be offered if desirable.

ОСНОВНАЯ ПРОБЛЕМАТИКА

- Химическое разложение или снижение летучести газообразных и летучих компонентов
- Направленная очистка загрязнений
- Разделение несовместимых действующих веществ

MAIN TOPICS

- Chemical decomposition or de-volatilisation of gaseous/volatile components
- Stain targeting
- Segregation of incompatible actives

ЦЕЛИ КОМПАНИИ

- Поиск реагентов и методов их использования для снижения летучести или разрушения летучих химических веществ определенного состава (карбоксильных, азот- и серосодержащих нуклеофильных и некоторых электрофильных соединений) при комнатной температуре в газовой фазе или растворе.
- Увеличение эффективности действующих веществ моющих средств путем направленного транспорта и присоединения к загрязненным участкам.
- Совмещение двух действующих веществ с несовместимыми функциями и/или реагирующих друг с другом в едином продукте (например, общей емкости с водным раствором), предотвращающее их взаимодействие до момента применения.
- Предотвращение использования токсичных и неэкологичных реагентов.

THE COMPANY AIMS AND INTERESTS

- The objective is to identify reagents and methods of their use that when used, react to de-volatilise or destroy certain volatile chemicals, like carboxylic acid compounds, amino/thio nucleophilic and some electrophilic compounds. The technology should work at room temperature either with vapourised solution or in liquid solution.
- Increasing the level of performance of actives by directing, targeting and locking onto the specific stain.
- Incorporation of the two incompatible and/or reactive ingredients into a single liquid aqueous formulation (i.e one bottle with a single chamber) and for the ingredients to be kept apart, and stable until the point of use.
- Prevention of use of toxic and ecologically harmful chemicals.

ПРОГРАММА

24 мая: Конференц-зал Научного Парка МГУ

- 9:30 Регистрация
- 10:00 Открытие
В. В. Лунин (академик РАН, профессор, декан химического факультета МГУ)
О. В. Мовсесян (Научный Парк МГУ)
А. А. Бучаченко (заместитель декана химического факультета МГУ)
- 10:30 Британо-Российская инновационная сеть как транснациональный инструмент поиска технологических партнеров
Г. Б. Пильнов (НП «Российская сеть трансфера технологий»)
- 11:00 Компания «Рекитт Бенкизер»
Малколм Мак-Кечни («Рекитт Бенкизер»)
- 11:45 Перерыв на кофе
- 12:15 Коллоидно-химические подходы в решении ряда технологических вопросов: медицина, фармакология, машиностроение, электроника
В. А. Левченко (Химический факультет МГУ, кафедра коллоидной химии)
- 13:00 Предсказание свойств и биологической активности органических веществ. Соотношения структура-свойство, молекулярное моделирование и виртуальный скрининг
В. А. Палюлин (Химический факультет МГУ, кафедра органической химии)
- 13:45 Комплексы полиэлектролитов и ПАВ как перспективные сорбенты и носители органических соединений
Ю. А. Захарова (Химический факультет МГУ, кафедра высокомолекулярных соединений)

25 мая: Химический факультет МГУ, деканат (4 эт).

- 11:00-14:00 Встречи с представителями компании «Рекитт Бенкизер»

PROGRAM

May 24: Conference-Hall, Science Park

- 9:30 Registration
- 10:00 Opening
Valery V. Lunin (academician, professor, Dean of the Faculty of Chemistry)
Oleg V. Movsesyan (MSU Science Park)
Alexei. A. Buchachenko (Faculty of Chemistry Deputy Dean)
- 10:30 British-Russian Innovation Network as an international tool for technology partner search
Gennady B. Pilnov (NP "Russian Technology Transfer Network")
- 11:00 Reckitt Benckiser
Malcolm McKechnie (Reckitt Benckiser)
- 11:45 Coffee break
- 12:15 Colloid-chemical approaches in the solution of some technological problems: Medicine, pharmacology, mechanical engineering, electronics
Vladimir A. Levchenko (Chair of Colloid Chemistry, Faculty of Chemistry)
- 13:00 Prediction of properties and bioactivity of organic compounds. QSAR/QSPR, molecular modelling and virtual screening
Vladimir A. Palyulin (Chair of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry)
- 13:45 Polyelectrolyte surfactant complexes as perspective sorbents and carriers for organic compounds
Julia A. Zakharova (Chair of High-Molecular Compounds, Faculty of Chemistry)

May 25: Faculty of Chemistry, Dean's Office (4th floor).

- 11:00-14:00
Meetings with Reckitt Benckiser representatives

БРИТАНО-РОССИЙСКАЯ ИННОВАЦИОННАЯ СЕТЬ КАК ТРАНСНАЦИОНАЛЬНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ПОИСКА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРТНЕРОВ

Геннадий Борисович Пильнов

НП «Российская сеть трансфера технологий», Исполнительный директор Британо-российская инновационная сеть (British-Russian Innovation Network, BRIN) была создана в 2005 г. компанией «Beta Technology LTD» (Великобритания) и НП «Российская сеть трансфера технологий, RTTN» (Россия) при финансовой поддержке Министерства иностранных дел и Содружества Великобритании через Global Opportunities Foundation Правительства Великобритании.

Целью проекта является создание, с использованием лучшей практики работы сетей RTTN и IRC, возможностей для установления сотрудничества российских и британских научно-исследовательских и производственных организаций в области научного и промышленного трансфера технологий.

Члены сети - британские Инновационные Релей-Центры (IRC) и российские организации, входящие в сеть RTTN: инновационные центры и Центры трансфера технологий, агентства регионального развития, технопарки и другие организации, занимающиеся поддержкой местного бизнеса, а также университеты и научно-исследовательские институты, заинтересованные в установлении технологических партнерств между Россией и Великобританией. Каждая организация работает с клиентами своего региона.

Для нахождения технологических партнеров используются форматы предложений технологий и запросов на технологии, которые совместимы с форматами, принятыми в Европейской сети Инновационных Релей-Центров.

<http://www.brin-net.ru>

Россия: Геннадий Пильнов

Russia: Gennady PILNOV

e-mail: rftn@rttn.ru

Тел. Tel.: (48439) 3-05-01, 6-84-92

Факс Fax: (484-39) 6-84-92

www.rftn.ru

<http://www.brin-net.ru>

Великобритания: Martyn Leat

UK: Martyn Leat

e-mail: mleat@betatechnology.co.uk

Тел. Tel.: 01302 322633

Факс: Fax: 01302 388800

www.betatechnology.co.uk

BRITISH-RUSSIAN INNOVATION NETWORK AS AN INTERNATIONAL TOOL FOR TECHNOLOGY PARTNER SEARCH

Gennady B. Pilnov

NP "Russian Technology Transfer Network", Chief executive

The British-Russian Innovation Network (BRIN) is aimed at associating the UK Innovation Relay Centres and Russian Innovation and Technology Transfer Centres, with the purpose of facilitating establishment of partnerships between British and Russian companies and R&D organisations in the area of technology transfer.

BRIN was started as a project funded by the UK Foreign and Commonwealth Office through the Global Opportunities Fund. Russia is a priority country for the GOF Economic Governance Programme. The BRIN project contributes towards promoting science and innovation collaboration with developed and emerging markets for the benefit of the UK's knowledge economy and to build S&I capacity to strengthen the global economy.

The founders of the BRIN are **Beta Technology Ltd.** (Doncaster, UK) and Nonprofit Partnership "Russian Technology Transfer Network, RTTN" (Obninsk, Russia).

Members of the network consist primarily of UK IRCs and member organisations of the RTTN. These are: consultancies and innovation centres that have technology-oriented customers, Universities and research centres and other intermediary organizations, high-tech companies of both countries. Each member works with technology-based clients in its region. Exchange of technology information (offers and requests of technologies) in the BRIN is based on formats adopted from the ones of EU Innovation Relay-Centres.

RECKITT BENCKISER

Malcolm McKechnie

Reckitt Benckiser, Technology Sourcing Manager

The presentation will introduce Reckitt Benckiser, its brands and product portfolio as well as highlighting the Research and Development organisation. This will lead into the technology platform areas of interest to the Company and how we look outside for new technologies of interest.

Reckitt Benckiser plc (RB) is the world's largest household cleaning products company (excluding laundry detergents) with a consumer-oriented vision, operations in 60 countries, sales in 180 countries, over 20,000 employees and is a FTSE 100 company headquartered in the UK.

The Company history goes back to the early 1800's with the establishment of a business by Isaac Reckitt in Hull, UK , a site still occupied today, and separately by the Benckiser family in Ludwigshafen. RB was formed in December 1999 from a merger of Reckitt and Colman with Benckiser NV. RB specialises in five core product categories: Fabric Care, Surface Care, Health & Personal Care, Automatic Dishwashing and Home Care (Air Care and Pest Control) and recorded revenues of £4.9 billion during the fiscal year ended December 2006.

The New Technology Group within the R&D organisation is based in Hull (UK), Tokyo (Japan), Mira (Italy) and Montvale (US). This group identifies emerging and transferable technologies from outside the RB research and development arena and household products sector and subsequently explores technologies that are the most relevant for transfer into RB products.

Product innovation and the provision of new consumer benefits through the use of such new technologies are critical to the continued growth of RB in the highly competitive FMCG sector. The areas of malodour destruction in the household environment, the segregation of reactive and incompatible actives in liquid formulations, and the delivery of cleaning agents specifically onto stains will be the focus areas for this workshop. These needs will be briefly reviewed again to set the scene for future discussions.

КОМПАНИЯ «РЕКИТТ БЕНКИЗЕР»

Малколм Мак-Кечни

Компания «Рекитт Бенкизер»

Презентация знакомит с компанией «Рекитт Бенкизер», ее марками и продуктами, а также дает представление об организации научно-исследовательской деятельности компании. Презентация дает представление об интересах компании в области технологий и поиске новых методов решения стоящих перед компанией задач.

Компания «Рекитт Бенкизер» (РБ) является мировым лидером в производстве бытовых моющих средств (за исключением средств для стирки). Ставя своей стратегической задачей наиболее полное удовлетворение нужд потребителей и располагая персоналом численностью более 20000 человек, компания ведет операции в более чем 60 странах, продажи – в 180 странах и входит в первую сотню индекса «Financial Times» для компаний, базирующихся в Великобритании.

История компании восходит к началу XIX века, когда свое дело независимо основали Исаак Рекитт в английском Гулле, где до сих пор располагается компания, и семья Бенкизер в Людвигсхафене. Собственно компания РБ образовалась в декабре 1999 г. в результате слияния «Рекитт и Колман» и «Бенкизер» и в декабре 2006 года достигла рекордного уровня дохода – 4.9 млрд. фунтов.

Группа новых технологий и научно-исследовательские отделы компании базируются в Гулле, Токио, Милане (Италия) и Монтвайле (США). В задачу группы новых технологий входит поиск возникающих или готовых технологий вне собственных научно-исследовательских отделов и производственных секторов и последующие оценка и внедрение наиболее подходящих и перспективных технологических решений.

Создание инновационных продуктов и предвидение новых запросов потребителей с использованием новых технологий является залогом непрерывного роста РБ на таком насыщенном секторе рынка, как товары повседневного спроса. Задачи уничтожения в доме неприятных запахов, создание продуктов, совмещающих активные вещества с несовместимыми функциями и направленная доставка чистящих агентов к местам загрязнения составят основную тему семинара. Мы надеемся, что наше видение этих проблем составит основу будущих обсуждений.

КОЛЛОИДНО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ В РЕШЕНИИ РЯДА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ВОПРОСОВ: МЕДИЦИНА, ФАРМАКОЛОГИЯ, МАШИНОСТРОЕНИЕ, ЭЛЕКТРОНИКА

В.А.Левченко, Н.В.Новоселова, В.Н.Матвеев

Химический факультет МГУ, кафедра коллоидной химии

Новый наноструктурированный углеродный полимер Одним из коллоидно-химических подходов в решении ряда технологических задач в области медицины, машиностроения и электроники заключается в разработке нанотехнологий управляемого синтеза углеродных наноструктурированных материалов нового класса, обеспечивающих конкурентоспособные свойства в указанных областях (в частности высокую биосовместимость, твердость, ориентационные, эмиссионные свойства и др.).

На основе ранее разработанной нанотехнологии, получен новый класс углеродных полимеров с линейно-амфорной структурой и уникальными физико-химическими свойствами. Полученные материалы обладают абсолютной биосовместимостью, ориентационными свойствами, твердостью близкой к алмазу и высокими эмиссионными свойствами. Наличие этих свойств позволяет им найти широкое применение в различных сферах. Одной из таких глобальных сфер может быть – машиностроение. Повышение работоспособности машин и механизмов является одной из основных задач всех без исключения отраслей гражданского и военного машиностроения (авто, авиа, кораблестроения, судостроения и др.). При этом важнейшим составной частью выполнения указанной задачи является повышение долговечности и надежности узлов трения, а также расширение диапазона их работоспособности по нагрузкам и температурам при одновременном снижении энергетических затрат при эксплуатации.

Перспективным путём повышения долговечности рабочих элементов узлов трения и снижения коэффициентов трения в фрикционных сопряжениях является разработка и создание износостойких покрытий с ориентационными свойствами, что позволит как улучшить долговечность узлов трения, так и повысить коэффициент полезного действия машин и механизмов. Основное требование, предъявляемое сегодня к таким покрытиям, в связи с тенденциями машиностроения к увеличению единичной мощности машин, быстроходности и производительности, состоит в увеличении их периода работоспособности, уменьшении затрат на их изготовление и ремонт.

Помимо этого, использование указанных покрытий позволяет существенно упростить рецептуру смазочных масел за счет снижения количества (вплоть до полного устранения) антифрикционных, противоизносных присадок и др. Поскольку указанные покрытия обладают антикоррозионным эффектом, они могут быть использованы также при работе узлов трения в агрессивных средах.

Второй сферой использования нового углеродного материала является – медицина. Являясь абсолютно биосовместимым, полученное новое полимерное покрытие имеет две основные области применения:

- покрытие имплантантов (искусственных сердечных клапанов, коленных суставов и т.д.);
- покрытие медицинских препаратов для заживления рубцов.

После хирургических операций, заживления ожоговых ран и т.п. образуются келоидные рубцы, которые в дальнейшем остаются или удаляются через некоторое время хирургическим путем, удалением при помощи лазера, криогенными методами и т.п. Разрастание рубцовой ткани происходит из-за плохого межклеточного обмена. Созданное покрытие полностью биосовместимо с тканями

человека и способствует устранению (недопущение образования) келоидных рубцов на стадии заживления раны (для рубцов).

Предлагаемое монокристаллическое углеродное нанопокрывание структурирует ткани раны при их росте в процессе заживления, улучшает микроциркуляцию и реологические свойства крови, повышает активацию энергосинтезирующих функций митохондрий и стабилизацию клеточных мембран, открывая тем самым доступ энергетического питания и кислорода к пораженным участкам ран. Эффект основан на том факте, что полимерное углеродное нанопокрывание является монокристаллическим и содержит активные центры, которые ориентируют и повышают упорядоченность молекул белков, организуя тем самым нормальные процессы метаболизма. Покрывание наносится на имплантаты и перевязочные средства в частности - хирургические повязки (бинты), губки, которые плотно прилегают к пораженному участку и в процессе регенерации тканей структурируют их рост.

Комплексы включения. Циклодекстрины (ЦД) относятся к циклическим олигомерам глюкозы. Их главной особенностью является способность к образованию комплексов включения типа "хозяин-гость" с различными органическими и неорганическими молекулами. В результате комплексообразования существенно изменяются физико-химические и химические свойства молекул «гостей». Использование маслорастворимых витаминов в промышленности сильно осложняется тем, что они не растворяются в воде и крайне неустойчивы к воздействию на них окружающей среды (света, кислорода воздуха и нагревания). Комплексообразование ЦД с витаминами позволяет устранить вышеуказанные проблемы, поэтому фундаментальные исследования в данной области имеют большое практическое значение. Кроме того, в нашей лаборатории впервые было показано, что ЦД являются слабыми поверхностно-активными веществами (ПАВ).

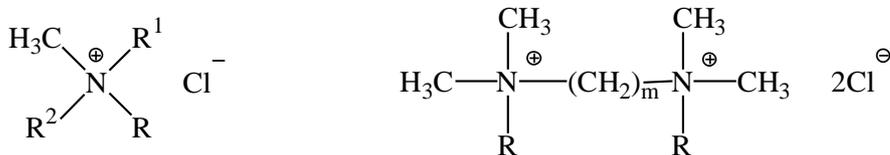
В работе было изучено взаимодействие β -ЦД и β -ЦДОП с витаминами К₃, D₃ и E-ацетат. Получены комплексы включения из водно-спиртового раствора и методом сухого перетирания компонентов. Проведена идентификация комплексов с помощью метода дифференциальной сканирующей калориметрии.

Фармацевтическая форма. Комплексы включения производных 1,2,5 – оксадиазол – 2 – оксида с полициклическими производными циклодекстрина позволяет получить фармацевтическую композицию, относящуюся к классу спазмолитических лекарственных препаратов, обладающих сосудорасширяющим и гипотензивным быстродействием, препятствующим агрегации тромбоцитов. (Патент № 2186782 RU).

Новые инклюзионные комплексы настоящей разработки являются эффективными донорами NO, а также генерируют его редокс-форму (нитроксил), образуют нитрозотиолы и активируют РГЦ, а также обладают сильным спазмолитическим, сосудорасширяющим и быстрым гипотензивным действием.

Влияние строения четвертичных аммониевых соединений и добавок электролита на вязкоупругие свойства их водных растворов. Было показано, что

некоторые ПАВ способны образовывать гели, особенно в присутствии небольших добавок неорганического электролита. В данной работе проведено изучение влияния строения ЧАС и добавок электролитов (неорганического и органического) на вязкоупругие свойства их водных растворов в расширенном ряду ЧАС, включающем соединения как с одним, так и с двумя гидрофобными углеводородными радикалами:



где $\text{R}^1 = -\text{CH}_3, -\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

$\text{R}^2 = -\text{CH}_2\text{CH}_3, -\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

$\text{R} = -\text{C}_{18}\text{H}_{37}, -\text{C}_{22}\text{H}_{45}, -\text{H}_2\text{C}_n(\text{H}_2\text{C}) \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ / \\ \text{H} \end{array} \text{(Z)} (\text{CH}_2)_n\text{CH}_3, -\text{H}_2\text{C}_n(\text{H}_2\text{C}) \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ / \\ \text{H} \end{array} \text{(E)} (\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$

$m = 2, 6, 8 \qquad n = 7, 11$

Реологические свойства (кривые течения и вязкости, частотные зависимости модулей упругости и вязкости, тиксотропные свойства) проводили с помощью ротационной вискозиметрии при различных концентрациях ЧАС (0,001-1 моль/л) и электролитов (NH_4Cl – до 10%, салицилат натрия – до 6% весовых) и температуре (20-90°C).

Полученные данные позволили нам выявить корреляцию между способностью ЧАС образовывать в воде дисперсные системы с высокими вязкоупругими свойствами и строением ЧАС (длина гидрофобного углеводородного радикала и их число, число гидроксогрупп, наличие ненасыщенной связи в углеводородном радикале и ее конформация). Показано существенное влияние добавок электролитов на вязкоупругие свойства водных растворов ЧАС.

В последнее время проводятся фундаментальные исследования разбавленных растворов катионных ПАВ, типичными представителями которых являются соли четвертичных аммониевых оснований. Их широкое применение определяется, прежде всего, высокой поверхностной активностью и бактерицидными свойствами. Однако, как следует из немногочисленных литературных данных, такие ПАВ обладают способностью организовывать цилиндрические мицеллы при достаточно малых концентрациях и даже существовать в виде гелей. При этом возможность гелеобразования и свойства образуемого геля определяются многими факторами: молекулярное строение ПАВ (как полярной группы, так и углеводородного радикала), температура, присутствие электролитов и полимеров. Изучение механизмов самоорганизации и влияния указанных выше факторов на реализацию фазовых переходов второго рода в водных растворах ПАВ позволит проводить целенаправленное регулирование их свойств и разработать принципы научного подбора композиций ПАВ с функциональными добавками для создания систем с заданными свойствами. Данные композиции могут использоваться, прежде всего, в нефтяной промышленности для создания регуляторов потоков воды и нефти, которые в воде организуют структуры (гели), а при поступлении углеводорода (нефти) разрушаются. Такие самоподстраивающиеся системы относятся к классу "умных систем" и работают на языке нефтяников как гидрозатвор.

Литература

1. Levchenko V.A., Matveenko V.N., Buyanovsky I.A., Ignatieva Z.V. "Influence of carbon coatings on lubricating properties of boundary layers". *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Journal of Engineering Tribology*, Part J, 2004, v.218, NJ6, pp.485-493

2. Levchenko V.A., Buyanovsky I.A., Ignatieva Z.V., Matveenko V.N. Effect of Coatings-Orientants on Antifriction Properties of Lubricants in Tribounits under Boundary Lubrication. *Journal of ASTM International*, v.3, N5, 2005
3. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, N.V. Novosyolova, V.N. Matveenko. Synthesis of Superhard Nanostructural Carbon Coatings with a Set of Tribological Properties. Book of Abstracts of International Conference on Nanoscience and Technology. Basel, Switzerland, July 30 – August 4 / 2006. P. 168.
4. Левченко В.А., Раков Д.Л., Матвеенко В.Н., Самоорганизация эпитропных жидкокристаллических слоев белков на поверхности монокристаллического углерода. Материалы VI международной конференции по лиотропным жидким кристаллам, Иваново, Россия, 17-21 октября 2006, с. 69
5. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, V.N. Matveenko. Multipurpose medical coating: « CARBON POLYMER. International Venturing Seminars 'Russian Technologies for Industry' Saint-Petersburg, 1-3 November 2006, p. 43
6. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, V.A. Matveenko. "New nanocarbon biomaterial for medical application". International Conference on NanoBiotechnologies "NANO BIO'2006", Saint-Petersburg, 27-29 November 2006, p. 84
7. Левченко В.А., Новоселова Н.В., Раков Д.Л., Матвеенко В.Н. Разработка новых энергосберегающих материалов на основе углерода с одномерной высокоориентированной структурой. Материалы 5-го Международного совещания по проблемам энергосбережения. Москва, 6-8 декабря, 2006
8. В.А. Левченко, В.Н. Матвеенко, Д.Л. Раков. Индуцированное эпитропное жидкокристаллическое упорядочение белков поверхностью углерода. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново, 2007 (в печати).
9. Новосёлова Н.В., Анисимов А.В., Бобылёва А.А., Луковская Е.В., Матвеенко В.Н. // Материалы 7-й Межд. науч. конф. "Молекулярная биология, химия и физика гетерогенных систем". Плес, 2003. С. 279-283.
10. Новосёлова Н.В., Анисимов А.В., Бобылёва А.А., Луковская Е.В., Матвеенко В.Н. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново: ИвГУ, 2003. Вып. 3. С. 9-21.
11. Новосёлова Н.В., Матвеенко В.Н. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново: ИвГУ, 2004. Вып. 2. С. 66-73.
12. Новосёлова Н.В., Бобылёва А.А., Сумцова Е.А., Матвеенко В.Н., Анисимов А.В., Теренин В.И. // Структура и динамика молекулярных систем. Сб. статей. Казань: КГУ, 2004. Вып. XI. Ч. I. Т. 1. С. 193-198.
13. S.R. Derkatch, S.M. Levachov, A.N. Kuhkushkina, N.V. Novosyolova, A.E. Kharlov, V.N. Matveenko. Rheological properties of concentrated emulsions stabilized by globular protein in the presence of nonionic surfactant // *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2007. V. 298. P.P. 225-234.

Патенты:

1. В.Н.Матвеенко, Ю.В. Хропов, А.Я.Коц, А.Б.Постников, Н.Г.Богданова, И.Л.Волчкова. Комплексы включения производных 1,2,5-оксадиазол-2-оксида с полициклическими производными глюкопиранозы, способ их получения, фармацевтическая композиция. Патент № 2186782. 10.08.2002.
2. В.А.Левченко, Ю.Н. Дроздов, И.А. Буяновский, И.М. Петрова, З.В. Игнатъева, В.Н.Матвеенко. Алмазоподобное антифрикционное покрытие. Патент 52956, RU, 27.04. 2006.
3. В.А.Левченко, В.Н.Матвеенко, Ю.Н. Дроздов, И.А. Буяновский, И.М. Петрова, З.В. Игнатъева. Антифрикционное покрытие. Патент 32217, RU, 2003.
4. Левченко В.А., Дроздов Ю.Н., Буяновский И.А., Петрова И.М., Игнатъева З.В., В.Н.Матвеенко. Антифрикционное покрытие. Патент 2230238, RU, 2004.

COLLOID-CHEMICAL APPROACHES IN THE SOLUTION OF SOME TECHNOLOGICAL PROBLEMS: MEDICINE, PHARMACOLOGY, MECHANICAL ENGINEERING, ELECTRONICS

V.A. Levchenko, N.V. Novoselova, V.N. Matveenko

Chair of Colloid Chemistry, Faculty of Chemistry, Moscow State University

New nanostructured polymer. One of the approach of colloid chemistry for a number of technological problems in medicine, mechanical engineering and electronics is the development of the nano-technologies for a guided synthesis of the new nano-structured carbon materials, that provide the competitive properties required in the corresponding fields (in particular, high biocompatibility, hardness, orientation and emission properties, etc.).

Using the nano-technology developed previously, we obtained a new class of carbon polymers with linear-amorphous structure and unique physical and chemical properties. The materials are absolutely biocompatible, possess anisotropic and emission properties, as well as hardness comparable to that of diamond. These features promise the new materials the wide applications in different areas. One of such global are is the mechanical engineering, where the problem of increasing the working capacity is crucial in all respects, including the increase of durability and reliability of the friction compartments, the broadening of the range of allowable load and temperature regimes and diminishing of energy consumption.

Increase of durability and reliability of the friction compartments can be attained by developing of the resisting coating with certain orientation properties. In addition, the use of such coating allows one to simplify the formulas of lubricating oils, resistive and antifriction additives.

Another field is the medicine. Being absolutely biocompatible, new polymer has two main application perspectives, namely, the coating of implants and seam healing. The seams after surgery usually originate from reduced inter-cell exchange and should be removed by laser or cryogenic methods. The new nano-coating prevents the formation of seams facilitates the structuring of the tissues, improves the blood microcirculation and rheology, activates the energy synthesis in mitochondria, stabilizes the cell membranes and promotes the supply of damaged tissues by oxygen and energy. These effects are the consequence of the monocrystal structure of the coating. Its active sites orient and order the protein molecules to promote the normal metabolic processes. The coating can be deposit on implants as well as surgery materials like bandage.

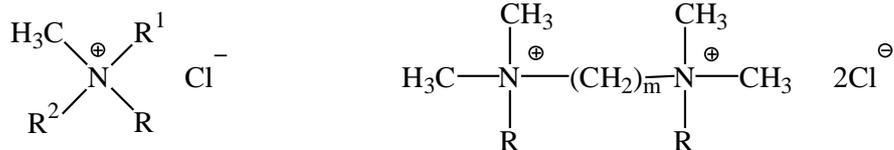
Inclusion complexes. Cyclodextrins (CD) are the cyclic glucose oligomers. Their main feature is the ability to form so-called "host-guest" inclusion complexes with various organic and inorganic molecules. The complexation can significantly alter the properties of host molecule. For example, the use of poorly soluble vitamins is complicated by their instability. The CD complexes of such vitamins allows one to alleviate this problem and, therefore, has the great practical potential. In addition, as it was first shown in our laboratory, CD exhibit weak surface activity (detergent properties). In particular, we studied the β -CD complexes with K₃ and D₃ vitamins, as well as with E-acetate.

Pharmaceutical formula. Inclusion complexes of 1,2,5-oxadiazol-2-oxide with the polycyclic CD derivatives allow one to obtain the spasmolytic pharmaceutical composition that exhibits high vasorelaxant, hypotension and platelet anti-aggregation activities (Patent № 2186782 RU)

New inclusion complexes are also efficient NO donors, generate nitroxyl, form nitrosothiols, etc.

The effect of structure of quaternary ammonium compounds (QAC) and electrolyte additions on the viscoelastic properties of aqueous solutions. We have shown that some detergents are capable to form gels, in particular, in the presence of small additions of inorganic electrolyte. We have studied the role of QAC structure, as well as the additions

of organic and inorganic electrolytes, in the viscoelastic properties of aqueous solutions for different QAC with one and two hydrophobic alkyl radicals:



где $\text{R}^1 = -\text{CH}_3, -\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

$\text{R}^2 = -\text{CH}_2\text{CH}_3, -\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

$\text{R} = -\text{C}_{18}\text{H}_{37}, -\text{C}_{22}\text{H}_{45}, -\text{H}_2\text{C}_n(\text{H}_2\text{C}) \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array} (\text{Z}) (\text{CH}_2)_n\text{CH}_3, -\text{H}_2\text{C}_n(\text{H}_2\text{C}) \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \diagdown \\ \text{C} \\ \diagup \\ \text{H} \end{array} (\text{E}) (\text{CH}_2)_n\text{CH}_3$

$m = 2, 6, 8 \qquad n = 7, 11$

The study revealed the correlation between the ability of QAC to form dispersed systems with high viscoelastic properties and the QAC structure (the length and number of hydrophobic radicals, number of hydroxy-groups, the existence and conformation of double-bonds in the radicals). The additions of electrolytes significantly affect the properties of aqueous QAC solutions.

We are carrying out the fundamental studies of the diluted solutions of the cationic surfactants including QAC. Their applied potential is determined, first of all, by the surface activity and antibacterial properties. However, few literature data reveals that such surfactants are able to form cylindrical micelles and even gels. Such abilities depend on many factors - molecular structure, temperature, presence of electrolytes and polymers. Understanding of the self-organization and phase transitions in aqueous solutions will allow us to tune their properties and prepare the systems with the desirable functions. Such "clever" systems have high potential for oil production, as the regulators for oil and water fluxes, so called molecular hydraulic lock.

References

1. Levchenko V.A., Matveenko V.N., Buyanovsky I.A., Ignatieva Z.V. "Influence of carbon coatings on lubricating properties of boundary layers". *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers. Journal of Engineering Tribology*, Part J, 2004, v.218, NJ6, pp.485-493
2. Levchenko V.A., Buyanovsky I.A., Ignatieva Z.V., Matveenko V.N. Effect of Coatings-Orientants on Antifriction Properties of Lubricants in Tribounits under Boundary Lubrication. *Journal of ASTM International*, v.3, N5, 2005
3. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, N.V. Novosyolova, V.N. Matveenko. Synthesis of Superhard Nanostructural Carbon Coatings with a Set of Tribological Properties. Book of Abstracts of International Conference on Nanoscience and Technology. Basel, Switzerland, July 30 – August 4 / 2006. P. 168.
4. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, N.V. Novosyolova, V.N. Matveenko Самоорганизация эпитропных жидкокристаллических слоев белков на поверхности монокристаллического углерода. Материалы VI международной конференции по лиотропным жидким кристаллам, ваноно, Россия, 17-21 октября 2006, с. 69
5. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, V.N. Matveenko. Multipurpose medical coating: « CARBON POLYMER. International Venturing Seminars 'Russian Technologies for Industry' Saint- Petersburg, 1-3 November 2006, p. 43
6. V.A. Levchenko, D.L. Rakov, V.A. Matveenko. "New nanocarbon biomaterial for medical application". International Conference on NanoBiotechnologies "NANO BIO '2006", Saint- Petersburg, 27-29 November 2006, p. 84
7. Левченко В.А., Новоселова Н.В., Раков Д.Л., Матвеев В.Н. Разработка новых энергосберегающих материалов на основе углерода с одномерной

- высокоориентированной структурой. Материалы 5-го Международного совещания по проблемам энергосбережения. Москва, 6-8 декабря, 2006
8. В.А. Левченко, В.Н. Матвеев, Д.Л. Раков. Индуцированное эпиторпное жидко-кристаллическое упорядочение белков поверхностью углерода. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново, 2007 (в печати).
 9. Новосёлова Н.В., Анисимов А.В., Бобылёва А.А., Луковская Е.В., Матвеев В.Н. // Материалы 7-й Межд. науч. конф. "Молекулярная биология, химия и физика гетерогенных систем". Плес, 2003. С. 279-283.
 10. Новосёлова Н.В., Анисимов А.В., Бобылёва А.А., Луковская Е.В., Матвеев В.Н. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново: ИвГУ, 2003. Вып. 3. С. 9-21.
 11. Новосёлова Н.В., Матвеев В.Н. // Жидкие кристаллы и их практическое использование. Иваново: ИвГУ, 2004. Вып. 2. С. 66-73.
 12. Новосёлова Н.В., Бобылёва А.А., Сумцова Е.А., Матвеев В.Н., Анисимов А.В., Теренин В.И. // Структура и динамика молекулярных систем. Сб. статей. Казань: КГУ, 2004. Вып. XI. Ч. I. Т. 1. С. 193-198.
 13. S.R. Derkach, S.M. Levachov, A.N. Kuhkushkina, N.V. Novosyolova, A.E. Kharlov, V.N. Matveenko. Rheological properties of concentrated emulsions stabilized by globular protein in the presence of nonionic surfactant // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2007. V. 298. P.P. 225-234.

Patents:

1. V.N. Matveenko et al. Inclusion complexes of 1,2,5-oxadiazol-2-oxide with the polycyclic glucopyranose derivatives: synthesys and pharmaceutical formula. Patent № 2186782. 10.08.2002.
2. V. A. Levchenko et al. Dimond-like antifriction coating. Patent 52956, RU, 27.04. 2006.
3. V. A. Levchenko et al. Antifriction coating Patent. 32217, RU, 2003.
4. V. A. Levchenko et al. Antifriction coating. Patent 2230238, RU, 2004.

PREDICTION OF PROPERTIES AND BIOACTIVITY OF ORGANIC COMPOUNDS. QSAR/QSPR, MOLECULAR MODELLING AND VIRTUAL SCREENING

Vladimir A. Palyulin, Nikolai S. Zefirov

Chair of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Moscow State University

vap@org.chem.msu.su

QSAR/QSPR (Quantitative structure-activity/property relationships) approaches can be considered as universal techniques for the modeling and prediction of nearly any properties of chemical compounds and many properties of materials. These approaches are based on the automatic analysis of structures and property values for a series of known chemical compounds with known properties, the chemical structures being described numerically with a series of parameters (descriptors). The structure-property relationships are usually evaluated using artificial neural networks. After creation of structure-property model it can be used for the prediction of properties for new chemical compounds for which these properties were never studied or compounds themselves were never synthesized. Good results of modeling had been obtained for the **diffusion coefficients** of small molecules in some polymers.

A large number of properties was modeled for various organic compounds basing on their structural formulas, e.g. **density, boiling points, viscosity, surface tension, magnetic susceptibility, lipophilicity (octanol-water distribution coefficient), critical temperature, flash points, polarizability, enthalpy of evaporation**, etc.

For the prediction of **biological activity** we have used both QSAR approaches and molecular modeling of ligand-receptor interactions, the structures of receptors themselves had been also modeled on the basis of homology. More than 20 receptors had been modelled and virtual screening system had been developed. Molecular Field Topology Analysis had been suggested and successfully used in quantitative structure-activity relationships studies for more than 100 different datasets.

ПРЕДСКАЗАНИЕ СВОЙСТВ И БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ. СООТНОШЕНИЯ СТРУКТУРА-СВОЙСТВО, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ

В. А. Палюлин, Н. С. Зефирова

Химический факультет МГУ, кафедра органической химии

Методы количественных соотношений структуры и свойств (QSAR/QSPR – Quantitative structure-activity/property relationships) можно рассматривать как универсальную технику моделирования и предсказания практически любых свойств органических веществ и многих свойств материалов. Подходы этого типа основаны на автоматическом анализе структур, задаваемых набором параметров-дескрипторов, для серии химических соединений с известными свойствами. Соотношения структура-свойство обычно устанавливаются при помощи алгоритмов искусственных нейронных сетей. Найденные соотношения используются для предсказания свойств новых, еще не исследованных и даже не синтезированных веществ. Возможности такого подхода иллюстрируются на примерах **коэффициентов диффузии** малых молекул в некоторых полимерах, а также множества других свойств, в частности, **плотности, температуры кипения, вязкости, поверхностного натяжения, магнитной восприимчивости, поляризуемости, критических температур** и многих других.

Для предсказания **биологической активности** применяются как соотношения структура-активность, так и молекулярное моделирование взаимодействия лиганда и рецептора, причем структура самого рецептора моделируется гомологическими методами. Нами были построены модели более 20 рецепторов и создана система виртуального скрининга. Предложенный нами метод анализа топологии молекулярного поля (MFTA) успешно использовался для исследования соотношений структура-активность в более чем сотне различных наборов данных.

POLYELECTROLYTE SURFACTANT COMPLEXES AS PERSPECTIVE SORBENTS AND CARRIERS FOR ORGANIC COMPOUNDS

Victor A. Kasaikin, Alexander B. Zezin, Julia A. Zakharova

Chair of High-Molecular Compounds, Faculty of Chemistry, Moscow State University

Polyelectrolyte-surfactant complexes (PSCs) can be easily synthesized in aqueous solutions by mixing of the components. Formation of intracomplex micellar phase able to solubilize organic substances of different chemical nature is the general feature of PSCs. Possibility of obtaining PSCs in soluble or in solid (insoluble) state makes such system rather perspective as the sorbents or carriers for organic compounds.

КОМПЛЕКСЫ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ И ПАВ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СОРБЕНТЫ И НОСИТЕЛИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В. А. Касаикин, А. Б. Зезин, Ю. А. Захарова

Химический факультет МГУ, кафедра высокомолекулярных соединений

Комплексы полиэлектролитов и ПАВ легко образуются в водном растворе при смешивании компонентов. Основной особенностью этих систем является способность к образованию мицелл, солюбилизирующих органические вещества различной химической природы. Возможность получения комплексов полиэлектролитов и ПАВ в растворенном или твердом (нерастворимом) виде делает их очень перспективными системами в качестве сорбентов или носителей органических соединений.

Основная информация о компании «Рекитт Бенкизер»

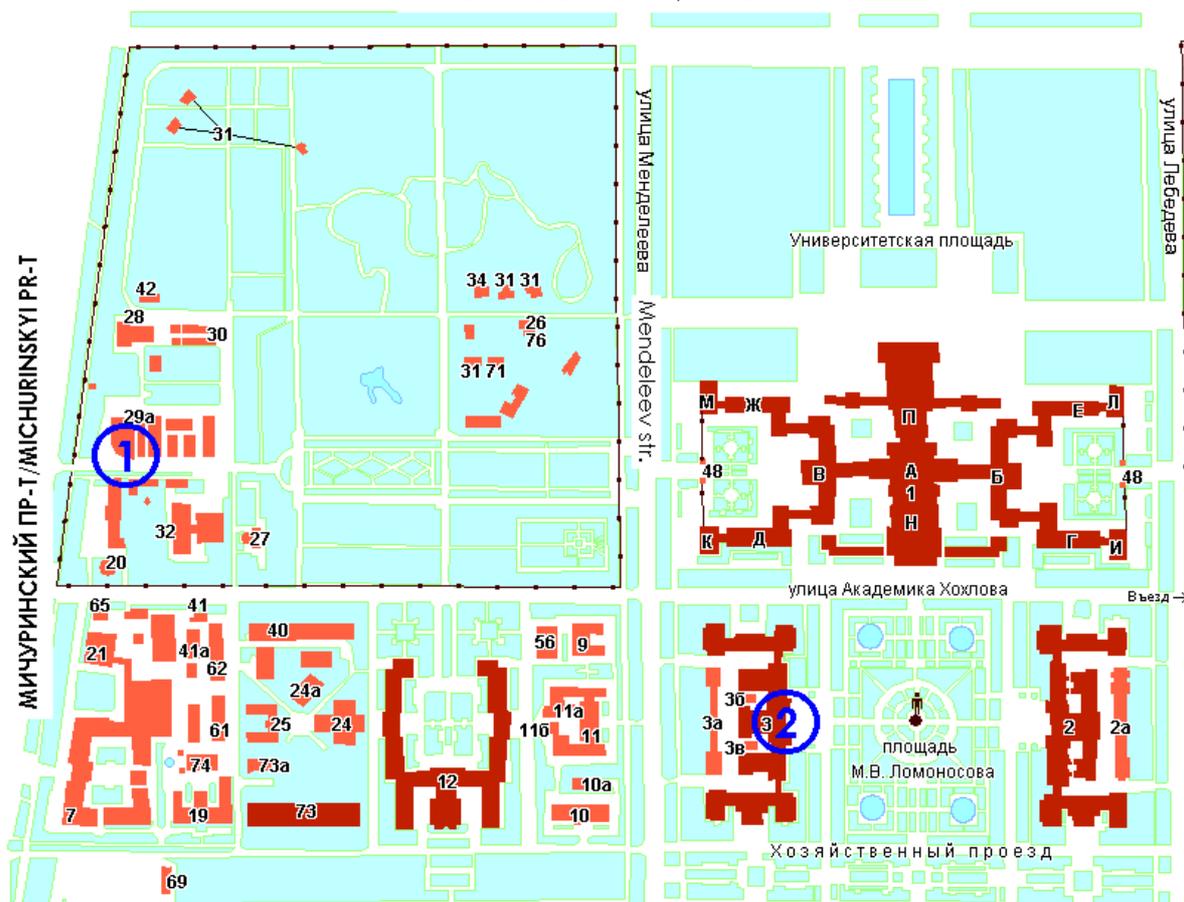
- «Рекитт Бенкизер» – мировой лидер в производстве бытовых моющих средств (за исключением средств для стирки).
- Компания ведет операции в более чем 60 странах, продажи – в 180 странах.
- В 2005 г. доход компании составил 4.2 млрд. фунтов, чистая прибыль – 669 млн. фунтов.
- Компания располагает 47 заводами во всем мире.
- На компанию работает около 22400 человек: 10400 в Европе, 3200 в Северной Америке, Австралии и Новой Зеландии, 8800 в других странах.
- Со времени образования в 1999 году в результате слияния «Рекитт и Колман» и «Бенкизер», компания демонстрирует устойчивый индустриальный рост; за 6 лет объем продаж вырос с 3 до 4 млрд. фунтов.
- Три четверти дохода компании приносят продукты, занимающие первое-второе места на соответствующих рынках.
- 40% дохода компании приносят продукты, разработанные за три предыдущих года.
- Более половины дохода компания получает на европейском рынке, 30% - на рынках Северной Америки, Австралии и Новой Зеландии, 18% - на развивающихся рынках.
- Компания имеет пять главных отделений: здравоохранение и личная гигиена, чистка тканей, чистка поверхностей, средства для мытья посуды и дома.
- На сегодня рыночная цена компании превышает 14.5 млрд. фунтов (при цене в момент слияния 4.5 млрд.); компания входит в первую тридцатку индекса «Financial Times».
- В феврале 2006 г. компания приобрела «Бутс Хелскэа Интернейшнэл» за 1.6 млрд. фунтов, добавив к своим продуктам такие брэнды, как Нурофен, Степсилс и Клерасил.
- Компания поистине интернациональна: среди 40 менеджеров высшего звена - представители 12 национальностей, среди 400 – 40 национальностей.
- Компания ежегодно инвестирует в рекламу своих продуктов в среднем 12% чистой прибыли.
- В 2006 году компания внесла 1.6 млн. фунтов в различные общественные проекты во всем мире, включая движения «Врачи без границ» и «Спаси ребенка», ряд проектов по ликвидации последствий цунами. Компания прилагает усилия, чтобы ее бизнес становился все более экологичным и более социально ответственным. С 2000 года тепловая эмиссия компании сократилась на 11%, а количество вредных отходов – на 40%, в расчете на единицу продукции.



Key Reckitt Benckiser Company Facts

- Reckitt Benckiser is the world leader in household cleaning (excluding laundry).
- We have operations in over 60 countries and sales in 180 countries.
- In 2005, we had net revenues of £4.2 billion and net income of £669 million.
- We have 47 manufacturing facilities worldwide: 10,400 in Europe, 3,200 in North America, Australia and New Zealand and 8,800 in Developing Markets.
- Since the formation of Reckitt Benckiser in 1999 from the merger of Reckitt & Colman and Benckiser, we have delivered 6 straight years of above industry average growth. Our sales have increased from £3 billion to £4 billion.
- Three quarters of our net revenues comes from brands that are number 1 or number 2 in their market.
- 40 per cent of our net revenues come from products launched in the prior 3 years.
- More than half of our revenue comes from European markets; 30 per cent from North America, Australia and New Zealand, and 18 per cent from in Developing Markets.
- Reckitt Benckiser has five core categories: Health and Personal Care, Fabric Care, Surface Care, Dishwashing and Home Care.
- Today the company is valued by the stock market at over £14.5 billion (from £4.5 billion at the time of merger) placing us in the top 30 of FTSE 100 companies.
- In February 2006, we completed the acquisition of Boots Healthcare International for £1.6 billion, adding leading brand Nurofen, Stepsils and Clerasil to our stable of brands.
- We are truly international company with 12 different nationalities represented in our Top 40 executives and 40 nationalities amongst the Top 400.
- We invest on average 12 per cent of our net revenues every year in media investment to support our brands.
- In 2005, we donated £1.6 million to community projects including Médecins sans Frontières, Save the Children, Home-Start UK and a number of tsunami relief projects. We are working to make our business more environmentally sustainable and socially responsible. Since 2000, we have reduced our global warming emissions by 11 per cent and our hazardous waste by 40 per cent, per unit of production.

УНИВЕРСИТЕТСКИЙ ПР-Т/UNIVERSITETSKYI PR-T



ЛОМОНОСОВСКИЙ ПР-Т/LOMONOSOVSKI PR-T

1 Научный Парк МГУ
MSU Science Park

2 Химический факультет МГУ
MSU Faculty of Chemistry

