

Учёные из Института химии растворов имени Г. А. Крестова РАН в Иваново разработали онлайн-инструмент SolvatoChrom, позволяющий быстро анализировать сольватохромные свойства красителей.

Портал Минобрнауки «Наука.рф» объясняет, что сольватохромизм — свойство красителей изменять цвет в зависимости от свойств растворителя. Сольватохромные красители широко используются в химических, биологических и физических исследованиях для окрашивания различных структур. Например, такими веществами маркируют лекарственные молекулы для отслеживания их поведения в организме.

Работа ивановских учёных важна тем, что разработка красителей с заданными свойствами, как правило, дорогостоящий процесс, требующий длительных исследований. Чтобы упростить этот процесс, специалисты создали онлайн-систему, способную прогнозировать результат на основе параметров красителя и растворителя.

В базе данных SolvatoChrom собраны 1060 параметров 76 растворителей, включая их общие физические свойства (плотность, вязкость, дипольный момент, показатели преломления), а также частные параметры, используемые для оценки и анализа сольватохромной чувствительности.

Чтобы использовать SolvatoChrom, необходимо ввести экспериментальные данные красителей: длину волны максимума поглощения и испускания света. Система быстро и удобно для пользователя собирает и сводит информацию о воздействии параметров растворителей на спектральные свойства соединения. SolvatoChrom определяет, и к какому параметру растворителя чувствителен конкретный образец.

«Мы собрали достаточно большой набор данных по параметрам растворителей и решили реализовать его в виде программы, которая упростит рутинную работу исследователей. Работать с сайтом максимально просто — пользователю необходимо только ввести данные исследуемого вещества, нажать на кнопку и получить результаты. Далее мы планируем расширить функционал SolvatoChrom в соответствии с обратной связью от коллег — сначала нужно понять, какие ещё параметры им будут необходимы и какие опции интересны», — отметил руководитель проекта, кандидат химических наук, старший научный сотрудник Института химии растворов имени Г.А. Крестова РАН Александр Ксенофонов.