

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ПИГМЕНТОВ С ИОНАМИ ВОДНЫХ ПРИМЕСЕЙ И ВОДЫ

К. В. Брянкин¹, В. С. Орехов², А. А. Дегтярев¹, А. И. Бельков¹

*Кафедры: «Химия и химические технологии» (1),
«Инжиниринг нанотехнологий» (2),
ФГБОУ ВО «ТГТУ»; nach_umu@nnn.tstu.ru*

Ключевые слова: водорастворимые примеси; квантово-химический расчет; моделирование; метод Хартри–Фока; молекулярная структура; пигменты; пигмент красный FGR; пигмент оранжевый Ж; пигмент желтый С; процесс сушки; энергия связи.

Аннотация: Определены факторы, определяющие формирование качественных характеристик органических пигментов. Отмечено, что при организации процесса сушки пигментов необходимо знать характер и величину связи целевого компонента с водой и имеющимися во влажной массе водорастворимыми примесями. Суть предлагаемого метода заключается в моделировании молекулярных структур и их расчета при использовании метода Хартри–Фока, базирующегося на основе квантовой химии. Предлагаемый метод реализован на примере пигментов красного FGR, оранжевого Ж и желтого С. Представлены наиболее вероятные модели присоединения к молекулам пигмента молекул воды и примесей, их энергетические и молекулярные характеристики.

Введение

К характеристикам, определяющим качество пигментов, относят такие показатели, как колористическая концентрация, прозрачность, интенсивность, укрывистость, блеск, чистота, оттенок. Производители офсетных красок предъявляют жесткие требования к показателям качества готовых выпускных форм пигментов. Оценка показателей качества пигментов осуществляется при диспергировании пигментов в связующем. На процесс формирования данных показателей качества оказывают влияние химический состав пигмента, форма и размер его частиц, их смачивание связующим – органическим лакообразующим и т.д.

Офсетные краски представляют собой гетерогенные системы, состоящие из красящего вещества – твердой фазы и связующего – жидкой среды. В качестве красящего вещества используют пигменты и лаки, в качестве связующего применяют коллоидные или истинные растворы твердых смол в минеральных и растительных маслах. В качестве красящего вещества используются органические пигменты. Наибольшее распространение получили пигменты, обеспечивающие весь спектр полноцветной печати.

К основным характеристикам пигмента, обеспечивающим получение высококачественных красок, можно отнести цвет, интенсивность (красящая сила), размер частиц, смачиваемость, маслосмолность, устойчивость к воздействию химических реагентов, света и тепла.

Повысить колористическую концентрацию офсетных красок возможно или повышением концентрации частиц пигмента в пленкообразующем, или снижением коэффициентов преломления и рассеивания при прохождении луча света через границу раздела фаз «пленкообразующее – частица пигмента».

Снизить коэффициенты преломления и рассеивания луча света можно удалением с поверхности частиц пигмента веществ, обладающих отличной от частиц пигмента оптической плотностью и пленкообразующего: неорганические соли, которые образуются на пигментах в суспензии стадии синтеза и не удаляются окончательно на заключительных стадиях. Наличие агломератов частиц пигмента в красках приводит к повышению рассеивания светового луча, формирование которого также зависит от наличия на поверхности частиц пигмента неорганических солей.

Для формирования требуемого цвета, оттенка, чистоты и светлоты пигмент, используемый для приготовления офсетных красок, не должен на своей поверхности содержать вещества, искажающие оптическую плотность продукта.

При формировании механизмов процессов удаления примесей из пигментов и их обезвоживании во втором периоде сушки необходимо:

- создать молекулярные структуры пигментов красного FGR, оранжевого Ж и желтого С, определить у них наличие активных центров присоединения ионов водорастворимых примесей;

- определить энергию связи активных центров молекул пигментов с ионами водорастворимых примесей и водой.

При образовании монослоя сорбированных на поверхности частиц пигмента ионов необходимо знать энергию связи сорбированных ионов с ионами, формирующими координационный слой или слой противоионов (Na^+); двойного электрического слоя – энергию связи ионов диффузионного слоя с ионами в областях потенциалоопределяющей и противоионов.

Эксперимент, результаты и обсуждение

Молекулярные структуры пигментов оранжевого Ж, красного FGR и желтого С рассчитывались при использовании метода Хартри–Фока с базисом 3–21G(d) (HF/3–21G(d)) [1] и строились на основе решения уравнения Шрёдингера при допущении, что каждая частица движется в некотором усредненном поле, создаваемом всеми остальными частицами системы.

В результате выполненных расчетов молекулярная структура пигмента оранжевого Ж дана с учетом наиболее вероятных величин энергии связи элементов, формирующих пигмент, согласно которой молекула имеет угол смещения в бензидиновом основании на $4,5^\circ$, азосоставляющие фенилметилпиразолона смещены относительно плоскости бензольного кольца, (основание молекула) на $2,5^\circ$ (рис. 1, а). Молекула развернута в бензидиновом основании по его оси на $48,71^\circ$ (торсионный угол между атомами C_{42} – C_{38} – C_{30} – C_{32}). Энергия молекулы пигмента оранжевого Ж составляет $-2715,604$ Хартри.

Молекулярная структура пигмента красного FGR представлена на рис. 1, б и дана с учетом наиболее вероятных величин энергии связи элементов формирующих пигмент, согласно которому плоскость бензольного кольца 2,4,5-трихлорфенил развернута относительно плоскости нафталинового кольца на 15° по азогруппе, плоскость бензольного кольца 2-метилфенила также находится под углом к нафталину на $8,9^\circ$, данный разворот осуществлен по C–N-связи. Энергия молекулы пигмента красного FGR составляет $-2596,526$ Хартри.

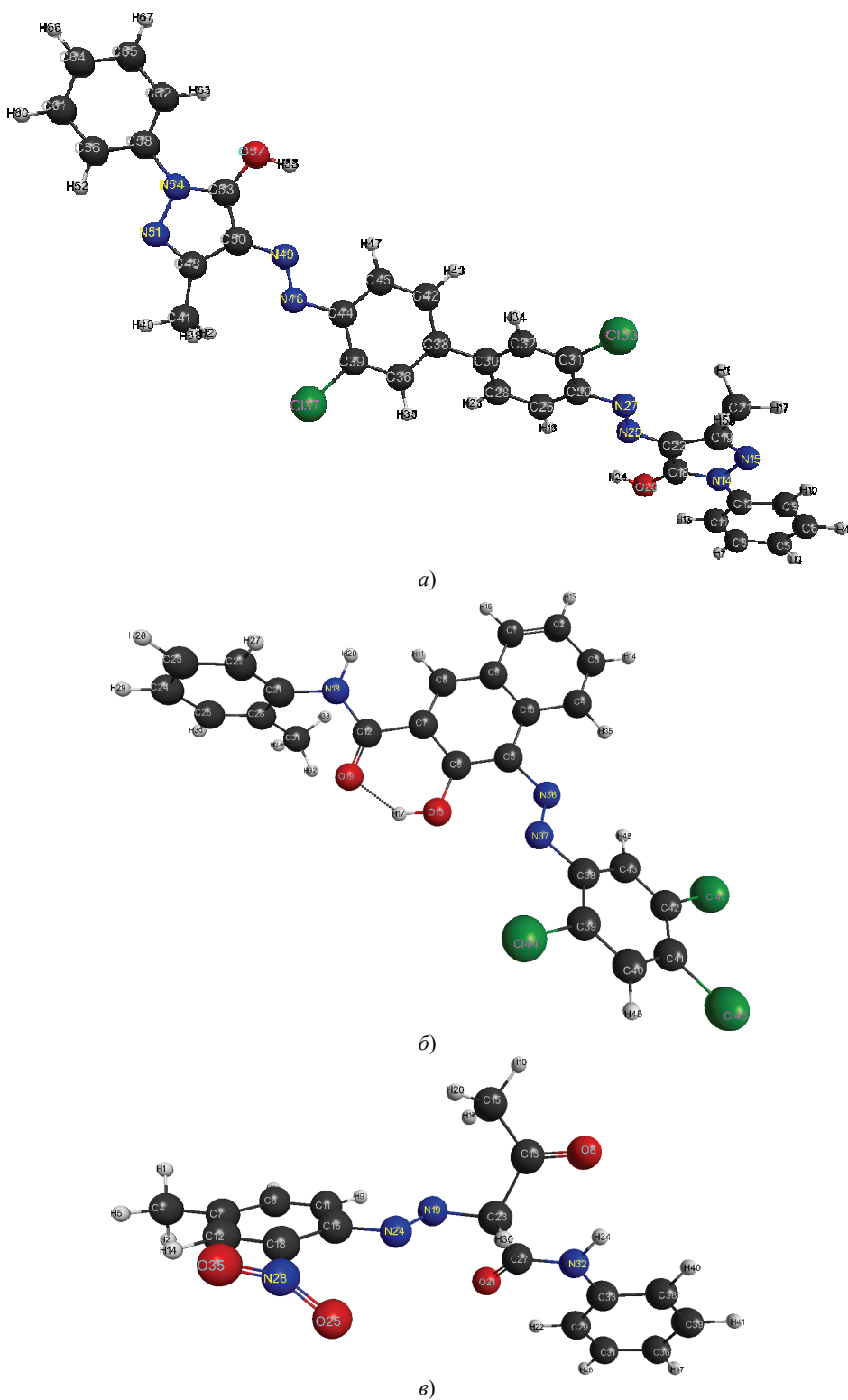


Рис. 1. Молекулярная структура пигмента оранжевого Ж (а), красного FGR (б) и желтого С (в)

Молекулярная структура пигмента желтого Ж дана с учетом наиболее вероятных величин энергии связи элементов формирующих пигмент, согласно которому плоскости бензольных колец 4-метил-2-нитрофенилазо- и N-фенил повернуты относительно друг друга на $14,3^\circ$ (рис. 1, в); 3-оксибутан выходит из плоскости относительно кольца 4-метил-2-нитрофенил. Молекула имеет угол смещения азодиазосоставляющей по азогруппе на $7,4^\circ$. Энергия молекулы пигмента желтого С составляет $-1163,574$ Хартри.

Модель присоединения к молекуле пигментов ионов водорастворимых примесей

При формировании монослоя сорбированных на поверхности ионов возможны следующие варианты:

- 1) молекула пигмента оранжевого Ж – анион хлора;
- 2) молекула пигмента оранжевого Ж – катион натрия;
- 3) молекула пигмента оранжевого Ж – молекула воды;
- 4) молекула пигмента красного FGR – анион хлора;
- 5) молекула пигмента красного FGR – сульфат-ион;
- 6) молекула пигмента красного FGR – молекула воды;
- 7) молекула пигмента красного FGR – катион натрия;
- 8) молекула пигмента желтого С – анион хлора;
- 9) молекула пигмента желтого С – ацетат-ион;
- 10) молекула пигмента желтого С – катион натрия;
- 11) молекула пигмента желтого С – молекула воды.

Для определения энергетических и молекулярных характеристик структур «пигмент – ион водорастворимой примеси» использовался метод GDHIS (определение геометрии методом прямого обращения в итерационном подпространстве) [2].

Начальное положение иона около молекулы пигмента выбиралось рядом с его потенциально активной функциональной группой.

Модель присоединения молекулы воды к молекуле пигмента оранжевого Ж

При определении молекулярной структуры «пигмент оранжевый Ж – молекула воды» предположительно приняты следующие варианты:

- 1) молекула воды присоединяется к ОН группой пигмента оранжевого Ж в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 2) молекула воды присоединяется к атому азота, присоединенному к бензольному кольцу в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 3) молекула воды присоединяется к N–N-группе вне плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 4) молекула воды располагается между N–N-группой и хлором вне плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 5) молекула воды располагается между плоскостями молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 6) молекула воды присоединяется к атому хлора в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж.

Из шести предполагаемых вариантов три оптимизировались до положения молекулы воды рядом с ОН-группой пигмента (рис. 2, а), данное положение молекулы воды является самым энергетически сильным $-2791,226$ Хартри (энергия взаимодействия составляет $-94,84$ кДж/моль). В плоскости бензидинового основания молекулы пигмента оранжевого Ж, в результате образования водородной связи между водородом ОН-группы и кислородом молекулы пигмента, происходит разворот на $7,4^\circ$ относительно положения, изображенного на рис. 1, а.

Расстояние между кислородом воды и водородом гидроксильной группы 1.516 \AA , порядок связи (индекс Уайберга) $0,201$ [3]. Присоединение молекулы воды происходит к атому азота фенилметилпиразолон (молекуле пигмента). Энергия связи $48,57$ кДж/моль (рис. 2, б); для С–С-связи бензидинового основания энергия связи составляет $-39,74$ кДж/моль (рис. 2, в).

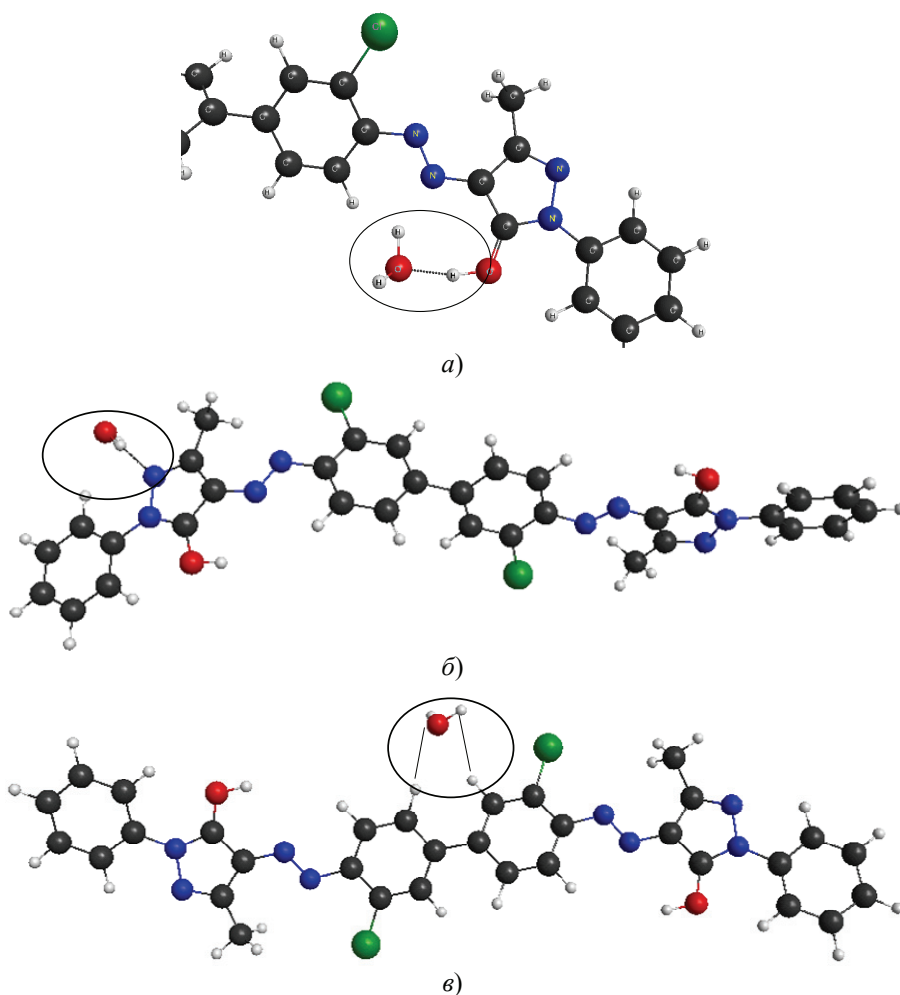


Рис. 2. Молекулярная структура «пигмент оранжевый Ж – молекула воды»:
a – точки присоединения молекулы воды к ОН-группе; *б* – присоединение к атому азота;
в – присоединение к бензидиновому основанию молекулы пигмента

Модель присоединения аниона хлора к молекуле пигмента оранжевого Ж

Моделирование и расчет молекулярных структур осуществлялись вышеуказанным способом. При определении молекулярной структуры «анион хлора – пигмент» приняты следующие варианты:

- 1) анион хлора присоединяется к азоту пятичленного цикла в плоскости молекулы пигмента;
- 2) анион хлора присоединяется к азоту азогруппы и водороду метильной группы в плоскости молекулы пигмента;
- 3) анион хлора располагается между азотом азогруппы и водородом гидроксильной группой в плоскости молекулы пигмента;
- 4) анион хлора находится рядом с азогруппой вне плоскости молекулы пигмента.

Из четырех вариантов – второй, третий и четвертый рассчитывались до положения аниона, присоединенного к ОН-группе пигмента, связь является самой энергетически сильной (энергия –3173,11 Хартри, энергия присоединения составляет –156,02 кДж/моль).

Значения заселенности по Малликену и Лоудину [4] показывают заряд на присоединенном анионе хлора $-0,86$ и $-0,83$, что может говорить о частичном переносе заряда. Расстояние между анионом хлора и водородом гидроксильной группы $1,957 \text{ \AA}$, порядок связи $0,199$. Первая конфигурация оптимизировалась до положения хлора, присоединенного к метильной группе (CH_3) -фенилметилпиразолона, энергия связи в данной точке составляет 20 кДж/моль .

Модель присоединения катиона натрия к молекуле пигмента оранжевого Ж

При определении молекулярной структуры «катион натрия – молекула пигмента» приняты следующие варианты:

- 1) катион натрия присоединяется к хлору бензидина в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 2) катион натрия располагается между азотом азогруппы и водородом метильной группы в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж;
- 3) катион натрия располагается между азотом азогруппы и гидроксильной группой в плоскости молекулы пигмента оранжевого Ж.

Из трех начальных молекулярных структур вторая и третья оптимизировались до положения катиона, присоединенного к ОН-группе пигмента, связь является самой энергетически сильной (энергия $-3173,11$ Хартри, энергия присоединения составляет $-114,76 \text{ кДж/моль}$). Первая структура оптимизировалась до положения натрия, присоединенного к хлору бензидинового основания; энергия связи в данной точке составляет $48,25 \text{ кДж/моль}$.

Модель присоединения молекулы воды к молекуле пигмента желтого С

При определении молекулярной структуры «молекула воды – молекула пигмента желтого С» приняты следующие варианты:

- 1) молекула воды присоединяется к нитрогруппе пигмента;
- 2) молекула воды присоединяется к карбоксиметильной группе пигмента;
- 3) молекула воды присоединяется к водороду амидной группы пигмента;
- 4) молекула воды присоединяется к кислороду амидной группы пигмента.

Наиболее энергетически сильным является связь воды с нитро- и аминогруппой ($-98,16 \text{ кДж/моль}$). Расстояние между атомами $\text{O}_{25}\text{-H}_{43}$ составляет $1,816 \text{ \AA}$, между атомами $\text{O}_{42}\text{-H}_{34}$ $1,718 \text{ \AA}$, порядки связей $0,139$ и $0,078$ соответственно.

Модель присоединения иона хлора к молекуле пигмента желтого С

При определении молекулярной структуры «ион хлора – молекула пигмента» приняты следующие варианты:

- 1) ион хлора располагается между карбоксиметильной группой и водородом амидной группы пигмента;
- 2) ион хлора присоединяется к кислороду амидной группы пигмента;
- 3) ион хлора присоединяется к нитрогруппе пигмента.

Наиболее энергетически надежным является связь иона хлора с водородом амидной группы ($92,32 \text{ кДж/моль}$). Расстояние между атомами $\text{Cl}_{42}\text{-H}_{34}$ составляет $2,176 \text{ \AA}$, порядок связи $0,129$. Величины заселенности по Малликену и по Лоудину показывают заряд на ионе хлора $-0,88$ и $-0,87$ соответственно, что может говорить о частичном переносе заряда.

Модель присоединения ацетат-иона к молекуле пигмента желтого С

При определении конфигураций комплекса «молекула пигмента – ацетат-ион» приняты следующие варианты:

- 1) ацетат-ион присоединяется к карбоксиметильной группой пигмента;

- 2) ацетат-ион присоединяется к нитрогруппе пигмента;
- 3) ацетат-ион располагается между диазо- и амидогруппами пигмента;
- 4) ацетат-ион присоединяется к NH-амидной группе пигмента.

В результате квантово-химических расчетов получены четыре конфигурации. Энергетически надежным является связь ацетат-иона с водородом амидной группы ($-206,65$ кДж/моль). Расстояние между атомами $O_{43}-H_{34}$ составляет $1,547$ Å, порядок связи $0,24$. Анализы заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на ацетат-ионе $-0,74$ и $-0,75$ соответственно, что может говорить о частичном переносе заряда.

Модель присоединения иона натрия к молекуле пигмента желтого С

При определении молекулярной структуры «ион натрия – молекула пигмента желтого С» приняты следующие варианты:

- 1) ион натрия присоединился к карбоксиметильной группе и водороду амидогруппы;
- 2) ион натрия присоединился к диазогруппе и кислороду амидогруппы;
- 3) ион натрия присоединился к нитрогруппе.

Наиболее энергетически сильной является связь иона натрия с кислородом нитрогруппы, кислородом амидной группы и диазогруппой ($-269,19$ кДж/моль). Расстояние между атомами $O_{25}-Na_{42}$ составляет $2,072$ Å, порядок связи $0,252$, между атомами $O_{21}-Na_{42}$ составляет $2,078$ Å, порядок связи $0,311$, между атомами $N_{24}-Na_{42}$ составляет $2,594$ Å, порядок связи $0,127$. Результаты заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на ионе натрия $0,61$ и $-0,12$ соответственно, что может говорить о частичном переносе заряда.

Модель присоединения молекулы воды к молекуле пигмента красного FGR

При определении молекулярной структуры «вода – пигмент красного FGR» приняты следующие варианты:

- 1) молекула воды присоединилась к водороду амидогруппы;
- 2) молекула воды присоединилась к атому хлора, находящемуся в ортоположении к диазогруппе пигмента;
- 3) молекула воды присоединилась к атому кислорода гидроксильной и амидогрупп;
- 4) молекула воды присоединилась к атому хлора в пара- и метаположениях к диазогруппе.

Наиболее энергетически сильной является связь молекулы воды с водородом амидогруппы ($-66,26$ кДж/моль). Расстояние между атомами $O_{49}-H_{20}$ составляет $1,874$ Å, порядок связи $0,109$.

Модель присоединения иона хлора к молекуле пигмента красного FGR

При определении молекулярной структуры «ион хлора – молекула пигмента красного FGR» приняты следующие варианты:

- 1) ион хлора присоединяется к водороду амидогруппы;
- 2) ион хлора присоединяется к водороду гидроксигруппы;
- 3) ион хлора присоединяется к диазогруппе;
- 4) ион хлора присоединяется к метильной группе.

Наиболее энергетически сильной является связь иона хлора с водородом амидогруппы и α -водородом нафтольного фрагмента пигмента ($-162,17$ кДж/моль). Расстояние между атомами $C_{149}-H_{11}$ составляет $2,341$ Å, порядок связи $0,089$, между атомами $Cl_{49}-H_{20}$ составляет $2,390$ Å, порядок связи $0,084$. Величины заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на ионе хлора $-0,88$ и $-0,87$ соответственно, что может говорить о частичном переносе заряда.

Модель присоединения сульфат-иона к молекуле пигмента красного FGR

При определении молекулярной структуры «сульфат-ион – молекула пигмента красного FGR» приняты следующие варианты:

- 1) сульфат-ион присоединяется к атомам кислорода амидной и гидроксигрупп пигмента;
- 2) сульфат-ион присоединяется к атому хлора в пара- и метаположении диазогруппы пигмента;
- 3) сульфат-ион присоединяется к водороду амидогруппы пигмента;
- 4) сульфат-ион присоединяется к метильной группе пигмента;
- 5) сульфат-ион присоединяется к нафтольным фрагментам пигмента.

По энергетическим характеристикам наиболее надежной является связь сульфат-иона с гидроксигруппой ($-526,64$ кДж/моль) либо с амидогруппой ($-508,11$ кДж/моль), то есть там, где имеется водород с высокополяризованной связью, способствующей его переходу в сульфат-ион.

Для комплекса с гидроксигруппой имеем расстояние между атомами $O_{53}-H_{17}$ $0,985$ Å, порядок связи $0,653$, между атомами $O_{13}-H_{17}$ $1,744$ Å, порядок связи $0,102$. Результаты заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на сульфат-ионе с присоединенным атомом водорода $-0,93$ и $-0,96$ соответственно.

Для комплекса с амидогруппой имеем расстояние между атомами $O_{52}-H_{20}$ $0,989$ Å, порядок связи $0,637$, между атомами $N_{18}-H_{20}$ $1,824$ Å, порядок связи $0,112$. Величины заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на сульфат-ионе с присоединенным атомом водорода $-0,91$ и $-0,98$ соответственно, то есть в обоих случаях наблюдается переход атома водорода на сульфат-ион с преобразованием его в ион HSO_4^- .

Модель присоединения иона натрия к молекуле пигмента красного FGR

При определении конфигураций комплекса «ион натрия – молекула пигмента красного FGR» приняты следующие варианты:

- 1) ион натрия присоединяется к кислороду амидной и гидроксильной групп;
- 2) ион натрия присоединяется к атому хлора в пара- и метаположениях диазогруппы;
- 3) ион натрия присоединяется к атому хлора в ортоположении диазогруппы и кислороду гидроксильной группы;
- 4) ион натрия присоединяется к диазогруппе.

Наиболее энергетически сильной является связь иона натрия с атомом хлора в ортоположении диазогруппа и кислородом гидроксильной группы ($310,84$ кДж/моль). Расстояние между атомами $O_{13}-Na_{49}$ составляет $2,083$ Å, порядок связи $0,25$, между атомами $C_{144}-Na_{49}$ составляет $2,762$ Å, порядок связи $0,078$, между атомами $N_{37}-Na_{49}$ составляет $2,286$ Å, порядок связи $0,178$. Величины заселенности по Малликену и Лоудину показывают заряд на ионе натрия $0,75$ и $-0,02$ соответственно, что может говорить о частичном переносе заряда.

Выводы

Разработаны модели молекул пигментов оранжевого Ж, желтого С и красного FGR на основании выполненных методом Хартри–Фока квантово-химических расчетов. По результатам квантово-химического моделирования молекулярных структур пигментов с ионами водорастворимых солей и молекулами воды можно получить величины энергии связей воды с пигментами и присоединенными солями, что позволит формировать кинетику процесса сушки пигментов во втором периоде, гарантируя сохранность целевого продукта.

Предложенный метод определения формы и величины связи влаги с высушиваемым материалом дает возможность организовать оптимальный температурный режим процесса термической сушки, обеспечивающий сохранность целевого компонента и достижение заданного значения конечного влагосодержания.

Список литературы

1. Leach, A. *Molecular Modelling. Principles and Application* / A. Leach. – Pearson education limited, 2001. – 773 p.
2. Farkas, O. *Methods for Optimizing Large Molecules. Part III. An Improved Algorithm for Geometry Optimization Using Direct Inversion in the Iterative Subspace (GDIIIS)* / O. Farkas, B. Schlegel // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2002. – No. 4. – P. 11 – 15.
3. Апостолова, Е. С. *Квантово-химическое описание реакций* / Е. С. Апостолова, А. И. Михайлюк, В. Г. Цирельсон. – М. : Изд-во РХТУ, 1999. – 61 с.
4. Степанов, Н. Ф. *Квантовая механика и квантовая химия* / Н. Ф. Степанов. – М. : Мир, 2001. – 519 с.

Quantum-Chemical Modeling of the Molecular Structure of Pigments with Ions of Water Impurities and Water

K. V. Bryankin¹, V. S. Orekhov², A. A. Degtyarev¹, A. I. Belkov¹

*Departments of Chemistry and Chemical Technologies (1),
Nanotechnology Engineering (2), TSTU, nach_umu@nnn.tstu.ru*

Keywords: modeling; molecular structure; pigments; water-soluble impurities; FGR red pigment; G orange pigment; C yellow pigment; binding energy; Hartree – Fock method; quantum chemical calculation; drying process.

Abstract: The factors determining the formation of qualitative characteristics of organic pigments are determined. It is noted that when organizing the process of drying pigments, it is necessary to know the nature and magnitude of the connection of the target component with water and water-soluble impurities in the wet mass. The essence of the proposed method of analysis is the modeling of molecular structures and their calculation using the Hartree–Fock method based on quantum chemistry. The proposed method is realized using the example of the FGR red, G orange and C yellow pigments; the most probable models of adding molecules of water and impurities to pigment molecules, their energy and molecular characteristics are presented.

References

1. Leach A. *Molecular Modelling. Principles and Application*, Pearson education limited, 2001, 773 p.
2. Farkas O., Schlegel B. *Methods for Optimizing Large Molecules. Part III. An Improved Algorithm for Geometry Optimization Using Direct Inversion in the Iterative Subspace (GDIIIS)*, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2002, no. 4, pp. 11-15.
3. Apostolova E.S., Mikhailiuk A.I., Tsirel'son V.G. *Kvantovo-khimicheskoe opisanie reaktsii* [Quantum-chemical description of the reactions], Moscow: RKhTU, 1999, 61 p. (In Russ.)
4. Stepanov N.F. *Kvantovaya mekhanika i kvantovaya khimiya* [Quantum mechanics and quantum chemistry], Moscow: Mir, 2001, 519 p. (In Russ.)

Quantenchemische Modellierung der molekularen Struktur der Pigmente mit den Ionen von Wasserinhaltsstoffen und Wasser

Zusammenfassung: Es sind die Faktoren bestimmt, die die Bildung qualitativer Eigenschaften von organischen Pigmenten identifizieren. Es ist darauf hingewiesen, dass es bei der Organisation des Trocknungsprozesses von Pigmenten erforderlich ist, die Art und Größe der Verbindung der Zielkomponente mit Wasser und wasserlöslichen Beimengungen zu kennen, die in der feuchten Masse verfügbar sind. Das Wesen der vorgeschlagenen Analyseverfahren ist die Simulation von Molekülstrukturen und deren Berechnung mit der auf der Quantenchemie basierenden Hartree–Fock-Methode. Die vorgeschlagene Methode ist am Beispiel von roten FGR-, orangen G- und gelben C-Pigmenten implementiert. Die wahrscheinlichsten Modelle für die Zugabe von Wassermolekülen und ihren Zusatzstoffen zu den Pigmentmolekülen, sowie deren energetische und molekulare Eigenschaften sind vorgestellt.

Modélisation quantique-chimique de la structure moléculaire des pigments avec les ions des impuretés d'eau et de l'eau

Résumé: Sont définis les facteurs de la formation des caractéristiques de qualité des pigments organiques. Est noté que lors de l'organisation du processus de séchage des pigments est nécessaire de connaître la nature et la valeur du lien du composant cible et des impuretés présentes dans la masse humide soluble. L'essence de la méthode de l'analyse proposée consiste dans la modélisation des structures moléculaires et de leur calcul avec l'utilisation de la méthode de Hartree–Fock, basée sur les fondements de la chimie quantique. La méthode proposée est mise en œuvre à l'exemple des pigments rouges FGR, oranges G et jaunes S. Sont présentée les plus probables modèles de l'adhésion aux molécules des pigments des molécules d'eau et des impuretés, leurs caractéristiques énergétiques et moléculaires.

Авторы: *Брянкин Константин Вячеславович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Химия и химические технологии», начальник учебно-методического управления; *Орехов Владимир Святославович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Инжиниринг нанотехнологий»; *Дегтярев Андрей Александрович* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Химия и химические технологии»; *Бельков Артем Игоревич* – аспирант кафедры «Химия и химические технологии», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.

Рецензент: *Гатапова Наталия Цибиковна* – доктор технических наук, профессор, заведующая кафедрой «Технологические процессы, аппараты и технологическая безопасность», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.
