

Квантово-химическое обоснование выбора Нильского Красного для индикации полярности масляной фазы косметических и лекарственных средств

© Тихонова*⁺ Татьяна Владимировна, Нойкина Мария Николаевна
Кафедра технологии химико-фармацевтических и косметических средств. Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева. ул. Героев Панфиловцев, 20. г. Москва, 125480. Россия. Тел.: +7 (495) 495-24-26. E-mail: gluktv@mail.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полярность, масляная фаза, косметические и лекарственные средства, сольватохромный краситель, Нильский Красный, квантово-химический расчет.

Аннотация

В статье освещаются вопросы, обосновывающие применение сольватохромного красителя Нильского Красного в качестве индикатора полярности масляных компонентов, используемых в производстве косметических и лекарственных средств. Полярность как показатель качества масляной фазы, является значимым параметром при разработке жидких, мягких лекарственных и косметических форм в виде эмульсий. Поэтому контроль качества поступаемых на предприятие ингредиентов имеет ведущее значение для защиты продукции и потребителя от потенциальных рисков. Разработка простого и доступного метода анализа масляных ингредиентов значительно облегчит работу отделов контроля качества предприятий, частных лабораторий и дистрибьютеров сырья, столкнувшихся с разрывом логистических цепочек и необходимостью смены производителей и поставщиков значительного числа производственных компонентов. В данной работе проведен квантово-химический расчет молекулы красителя Нильского Красного, с помощью которого количественно оценены порядок связей и суммарный заряд фрагментов молекулы красителя в основном и возбужденном состояниях, что позволило оценить направление смещения электронной плотности на донорной и акцепторной частях молекулы (по абсолютной величине): для перехода $S_0 \rightarrow S_2$ больше, чем для перехода $S_0 \rightarrow S_1$. Выявлено, что вторая (коротковолновая) полоса интенсивности поглощения красителя более чувствительна к полярности растворителя, чем первая (длинноволновая). Подтвержденные в результате квантово-химического расчета положения коррелируют с полученным в предыдущих работах данными электронных спектров поглощения красителя в растворителях и маслах с различной полярностью, что доказывает применимость Нильского Красного для контроля широко используемых в фармацевтической и косметической промышленности масляных ингредиентов.

Выходные данные для цитирования русскоязычной версии статьи:

Тихонова Т.В., Нойкина М.Н. Квантово-химическое обоснование выбора Нильского Красного для индикации полярности масляной фазы косметических и лекарственных средств. *Бутлеровские сообщения*. 2022. Т.71. №9. С.18-23. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-9-18

или

Tatyana V. Tikhonova, Maria N. Noykina. Quantum-chemical rationale of the Nile Red choice for indication of the polarity of cosmetics and medicines oil phase. *Butlerov Communications*. 2022. Vol.71. No.9. P.18-23. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/22-71-9-18. (Russian)