

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»

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018

Организационный комитет

Председатель: акад. РАН Лунин В.В. (МГУ, Москва)

Сопредседатели: д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Бутман М.Ф. (ИГХТУ, Иваново)

Ученые секретари: к.х.н. Алексеева О.В., ИХР РАН, Иваново
к.х.н. Волкова Т.В., ИХР РАН, Иваново

проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Антипа Е.В. (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Антипин И.С. (ИОФХ РАН, Казань)
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)
проф. Бештер-Рогач М. (Университет Любляны, Словения)
к.х.н. Будков Ю.А. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)
акад. РАН Бузник В.М. (ВИАМ, Москва)
проф. Бухнер Р. (Университет Регенсбурга, Германия)
проф. Вацадзе С.З. (МГУ, Москва)
проф. Викторов А.И. (СПбГУ, С.-Петербург)
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С.-Петербург)
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)
проф. Идрисси А. (Университет Лилля, Франция)
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Атлантики, Франция)
проф. Каманина Н.В. (ГОИ им.С.И.Вавилова, С.-Петербург)
проф. Козик В.В. (ТГУ, Томск)
чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Корнышев А. (Имперский колледж, Великобритания)
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Лу Т. (Тяньцзиньский Технологический Университет, Китай)
проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Мартыанов О.Н. (ИК СО РАН, Новосибирск)
чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)
проф. Носков С. (Университет Калгари, Канада)
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Родникова М.Н. (ИОНХ РАН, Москва)
д.х.н. Румянцев Е.В. (ИГХТУ, Иваново)
проф. Сафонова Л.П., (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Смирнова Н.А. (СПбГУ, С.-Петербург)
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)
проф. Щерблыкин И. (Университет г. Лунд, Швеция)

**ХIII Международная научная конференция
«Проблемы сольватации и комплексообразования в растворах»**

Программный комитет

Председатель: д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Асланов Л.А. (МГУ, Москва)
проф. Галяметдинов Ю.Г. (КГТУ, Казань)
проф. Дуров В.А. (МГУ, Москва)
проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Сафонова Л.П. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Федотова М.В. (ИХР РАН, Иваново)
акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХ РАН, Москва)
проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

**Х Международная научная конференция
«Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация и материалы нового поколения»**

Программный комитет

Председатель: чл.-корр. РАН Мелихов И. В. (МГУ, Москва)
проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)
чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ РАН, С-Петербург)
проф. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)
чл.-корр. РАН Иванов В.К. (ИОНХ РАН, Москва)
проф. Мурашкевич А.Н. (БГТУ, Минск)
проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Усольцева Н. В. (ИвГУ, Иваново)
проф. Халиков С.С. (ИНЭОС РАН, Москва)
проф. Шилова О.А. (ИХС РАН, С.-Петербург)

Международный симпозиум «Умные материалы»

Программный комитет

Председатель: проф. Мамардашвили Н.Ж. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Антина Е.В. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Бурилов А.Р. (ИОФХ КНЦ РАН, Казань)
к.х.н. Виноградов В.В. (ИТМО, С.-Петербург)
проф. Калинин А. (Институт горного дела и телекоммуникаций Антлантики, Франция)
проф. Ломова Т.Н. (ИХР РАН, Иваново)
проф. Сырбу С.А. (ИХР РАН, Иваново)
д.х.н. Терехова И.В. (ИХР РАН, Иваново)

ЛОКАЛЬНЫЙ ОРГКОМИТЕТ

Голубев В.А. (ИХР РАН, Иваново)
Дмитриева О.А. (ИХР РАН, Иваново)
Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)
Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)
Каликин Н.Н. (ИХР РАН, Иваново)
Кручинин С.Е. (ИХР РАН, Иваново)
Куликова Л.Б. (ИХР РАН, Иваново)
Куликова О.М. (ИХР РАН, Иваново)

Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)
Носков А.В. (ИХР РАН, Иваново)
Потемкина О.И. (ИХР РАН, Иваново)
Пуховский Ю.П. (ИХР РАН, Иваново)
Родионова А.Н. (ИХР РАН, Иваново)
Трусова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)
Юров М.Ю. (ИХР РАН, Иваново)

ДВУХМЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ЯМР В ИССЛЕДОВАНИИ МЕХАНИЗМОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Ходов И.А.^{1,2}

¹ *Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия*

² *Казанский федеральный университет, Казань, Россия*

ilya.khodov@gmail.com

Механизмы кристаллизации малых молекул лекарственных соединений являются весьма сложными и многоступенчатыми. Известно, что получение новых кристаллических форм производят именно в жидкой фазе. Кристаллическая форма лекарственного соединения во многом определяется его молекулярной структурой в насыщенном растворе [1]. Было предсказано теоретически и показано экспериментально, что в насыщенном растворе содержатся все возможные преднуклеационные конфигурации. Однако известно [2], что в растворе может одновременно сосуществовать несколько энергетически стабильных конформаций молекул, что весьма усложняет исследование механизмов кристаллизации малых молекул лекарственных соединений в насыщенных растворах. Кроме того, как оказалось, различные конформеры могут провоцировать различную форму кристаллов; это явление называется конформационно-определяемым полиморфизмом. Суть данного феномена заключается в том, что полиморфные кристаллические формы различаются не только упаковкой (расположением) молекул в кристалле, но и пространственной геометрией молекул. Явление конформационного полиморфизма выявлено в ряде известных лекарственных нестероидных соединений противовоспалительного действия, таких, как тазофелон, ибупрофен, мефенаминовая кислота, и др. Несмотря на небольшое различие в кристаллической структуре конформационно определяющих полиморфов, зачастую наблюдается значительная разница в физико-химических (температура плавления, растворимость и др.) и фармацевтических характеристиках лекарственных препаратов. Важно отметить, что только ЯМР спектроскопия может дать прямую информацию о конфигурации молекул в растворе.

В данной работе будут обсуждены особенности методологии ЯМР применительно к исследованию малых молекул лекарственных средств в растворах. Представлены результаты ЯМР спектроскопии, а также их сравнение с квантово-химическими расчетами для ряда малых молекул. Будет приведен подробный сравнительный анализ полученных результатов ЯМР с данными рентгеноструктурного анализа, что позволит предположить возможные механизмы формирования кристаллов той или иной полиморфной формы.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 и в рамках государственного задания номер государственной регистрации: 01201260481.

1. A.J. Cruz-Cabeza, J. Bernstein. *Chem. Rev.*, 2014, **114**, 2170-2191.
2. C.P. Butts, C.R. Jones, J.N. Harvey. *Chem. Com.*, 2011, **47**, 1193-1195.

ВЛИЯНИЕ СОСТАВА РАСТВОРА НА МОРФОЛОГИЮ И РАЗМЕР ОСАЖДАЕМЫХ КРИСТАЛЛОВ ПРИ СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ АНТИСОЛЬВЕНТНОМ ОСАЖДЕНИИ

Воробей А.М.^{1,2}, Покровский О.И.¹, Устинович К.Б.¹, Паренаго О.О.^{1,2}, Лунин В.В.^{1,2}.

¹ *Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова Российской академии наук, Москва, Россия*

² *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Химический факультет, Москва, Россия*

vorobei@supercritical.ru

Сверхкритическое антисольвентное осаждение (SAS – Supercritical AntiSolvent) представляет собой метод получения микро-, субмикро- и наночастиц заданной морфологии с узким распределением по размеру. Данный метод аналогичен обычному антисольвентному осаждению, но в случае метода SAS в роли антирастворителя (осадителя) выступает сверхкритический флюид, чаще всего CO₂. Суть процесса SAS состоит в следующем: раствор вещества, нерастворимого в сверхкритическом CO₂ (СК-CO₂), через узкое сопло распыляют в сосуд, через который одновременно пропускают СК-CO₂. Смешение раствора со сверхкритическим флюидом приводит к пересыщению раствора и выпадению в осадок