



The Ministry of Education and Science
of the Russian Federation
Russian Foundation for Basic Research
Kazan Federal University



International Tomography Center Siberian Branch
of Russian Academy of Sciences

International symposium

***“Magnetic resonance:
from fundamental research
to practical application”***

book of abstracts

April, 21 - 23

Kazan, 2016

Министерство Образования и Науки РФ
Российский Фонд Фундаментальных Исследований
Казанский (Приволжский) федеральный университет
Международный томографический центр СО РАН

Международный симпозиум
«МАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС:
ОТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ К ПРАКТИЧЕСКИМ
ПРИЛОЖЕНИЯМ»

Сборник тезисов

Казань

21 – 23 апреля 2016 г.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Сопредседатели оргкомитета:

И.Р. Гафуров, профессор, д.э.н., ректор КФУ;

А.В. Аганов, академик РАН, профессор, д.х.н., заведующий кафедрой медицинской физики Института физики КФУ;

Р.З. Сагдеев, академик РАН, д.х.н., научный руководитель МТЦ СО РАН, первый зам. председателя Президиума СО РАН.

Заместители сопредседателей оргкомитета:

С.И. Никитин, к.ф.-м.н., доцент, директор Института физики КФУ;

В. В. Ключков, профессор, д.х.н., профессор кафедры медицинской физики Института физики КФУ, заведующий научной лабораторией ЯМР Института физики КФУ.

Ученый секретарь:

Л.Ф. Галиуллина, к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской физики Института физики КФУ, с.н.с. НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ.

Члены оргкомитета:

Р.М. Аминова, профессор, д.х.н., профессор кафедры химической физики Института физики КФУ;

Г.С. Бородкин, к.х.н., г.н.с., зав. лабораторией ЯМР НИИ ФОХ ЮФУ;

Н.И. Борисенко, д.х.н., заведующий лабораторией критических флюидных технологий НИИ физической и органической химии ЮФУ;

К.А. Ильясов, д.ф.-м.н., профессор кафедры медицинской физики Института физики КФУ;

Ф.Х. Каратаева, профессор, д.х.н., профессор кафедры органической химии Химического института им. А.М. Бутлерова КФУ;

С.Б. Орлинский, доцент, к.ф.-м.н., доцент кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ;

Ю.А. Пирогов, профессор, д.ф.-м.н., профессор кафедры фотоники и физики микроволн Физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова;

В.И. Польшаков, д.х.н., в.н.с. НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ;

Н.М. Сергеев, профессор, д.х.н., в.н.с. лаборатории физико-химических методов анализа строения вещества кафедры органической химии Химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова;

В.Д. Скирда, профессор, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой физики молекулярных систем Института физики КФУ;

М.С. Тагиров, профессор, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ;

П.М. Толстой, доцент, к.ф.-м.н., директор ресурсного центра «Магнитно-резонансные методы исследования» СПбГУ, доцент кафедры физической органической химии Института химии СПбГУ;

В.И. Чижик, профессор, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой квантовых магнитных явлений Физического факультета СПбГУ.

ИСПОЛНИТЕЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

В. В. Ключков, профессор, д.х.н., профессор кафедры медицинской физики Института физики КФУ, заведующий научной лабораторией ЯМР Института физики КФУ.

Члены исполнительного комитета:

О.В. Аганова, младший научный сотрудник НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ;

Д.С. Блохин, к.ф.-м.н., ассистент кафедры общей физики Института физики, м.н.с. НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ;

М.Р. Гафуров, к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской физики Института физики, с.н.с. НИЛ магнитной радиоспектроскопии и квантовой электроники им. С.А. Альтшулера кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ;

С.В. Ефимов, к.ф.-м.н., главный инженер проекта Федерального центра коллективного пользования физико-химических исследований веществ и материалов Приволжского федерального округа;

Э.А. Ключкова, младший научный сотрудник НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ;

Ю.В. Малинина, инженер кафедры медицинской физики, юрисконсульт Института физики КФУ;

Н.В. Поляков, заместитель директора Института физики КФУ;

Л.Е. Петухова, главный бухгалтер Института физики КФУ;

И.З. Рахматуллин, младший научный сотрудник НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ;

К.С. Усачев, к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской физики Института физики, с.н.с. НИЛ «Структурная биология» Института фундаментальной медицины и биологии КФУ;

Б.И. Хайрутдинов, к.ф.-м.н., ассистент кафедры медицинской физики Института физики, с.н.с. НИЛ «ЯМР-структура» Института физики КФУ, с.н.с. НИЛ «Структурная биология» Института фундаментальной медицины и биологии КФУ;

А.Р. Юльметов, к.ф.-м.н., доцент кафедры медицинской физики Института физики КФУ.

Секретарь исполнительного комитета:

Н.Ф. Галиуллина, инженер кафедры медицинской физики Института физики КФУ.

И.А. Ходов, Д.А. Лазовский, О.В. Мальцева, Г.М. Мамардашвили, В.С. Ходова,
Н.Ж. Мамардашвили

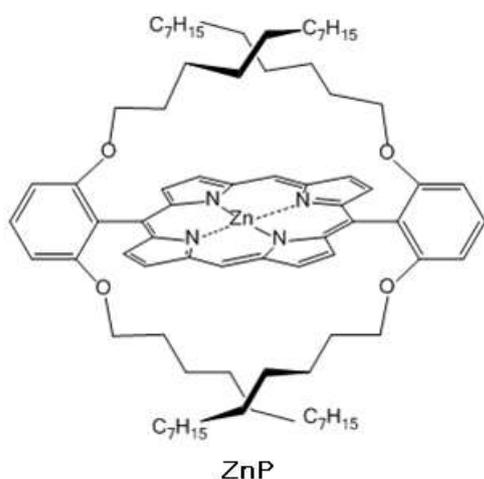
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии
растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново, Россия.

ilya.khodov@gmail.ru

ЯМР спектроскопия в исследовании координации молекул органических N- оснований порфириновым рецептором

Целью настоящей работы является исследование распознавательной способности молекулярного лиганда Zn-5,15-ди-(2,6-дидодецилоксифенил)порфирина (ZnP) по отношению к органическим молекулам [имидазол, пропиламин, пропилдиамин и DABCO] в среде инертного по отношению к реагентам толуола.

Для реализации данной задачи был разработан подход в двумерной ЯМР спектроскопии. Эксперименты двумерной диффузионно-упорядоченной спектроскопии (2D DOSY) подтвердили комплексообразование исследуемых соединений. В дополнении к этому, ZnP и его комплексы с лигандами были полностью охарактеризованы при помощи двумерной корреляционной спектроскопии (2D COSY), что позволило определить принадлежность сигналов в одномерном ЯМР эксперименте к характеристическим группам исследуемого соединения. Результаты анализа данных ЯМР спектроскопии хорошо согласуются с данными, полученными спектрофотометрическим титрованием.



Четыре додецилокси-заместителя, расположенные в *орто*-положениях двух диаметральных фенильных колец, размещаются над координационным центром, экранируя этот центр и образуют над и под порфириновой плоскостью внутримолекулярные полости (каналы) определённых размеров. Как показали наши исследования, значения константы устойчивости комплекса ZnP-DABCO по

сравнению с другими комплексами, значительно ниже. По-видимому, геометрические размеры внутримолекулярной полости у ZnP, образованной алкоксисаместителями, не соответствуют размеру DABCO. Размеры данного объёмного лиганда слишком большие, чтобы внутримолекулярная полость могла бы под них легко подстроиться. Можно предположить, что структура, которую принимает порфириновая молекула при координации DABCO, является слишком конформационно напряжённой и энергетически невыгодной, по сравнению с имидазольными и пропиламинными аксиальными комплексами, в результате чего комплекс ZnP-DABCO хоть и образуются, но с более низкими константами.

Интересные данные были получены для порфиринового рецептора с 1,3-диаминопропаном. В случае этого комплекса, внутримолекулярная полость не только находится в хорошем соответствии с размером лиганда, но и появляется дополнительные точки связывания между порфирином и лигандом за счет атомов кислорода. Комплекс с 1,3-диаминопропаном существенно более устойчив, очевидно, происходящие при этом конформационные изменения приводят к сближению группы NH_2 с фенильным фрагментом (-OPh) и образованию водородных связей. Образование комплекса с двумя точками связывания подтверждают и данные 2D DOSY.

Исследования процессов аксиальной координации органических оснований различной природы на алкоксифенилзамещённых порфиринатах может дать научную основу для достижения более эффективного и долгоживущего разделения зарядов в надмолекулярных донорно-акцепторных комплексах, для выявления перспектив повышения эффективности и производительности DSSCs.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 14-13-00232.