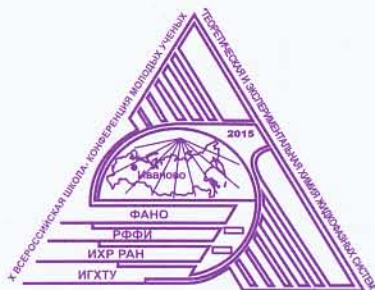


**X Всероссийская
школа-конференция
молодых ученых**



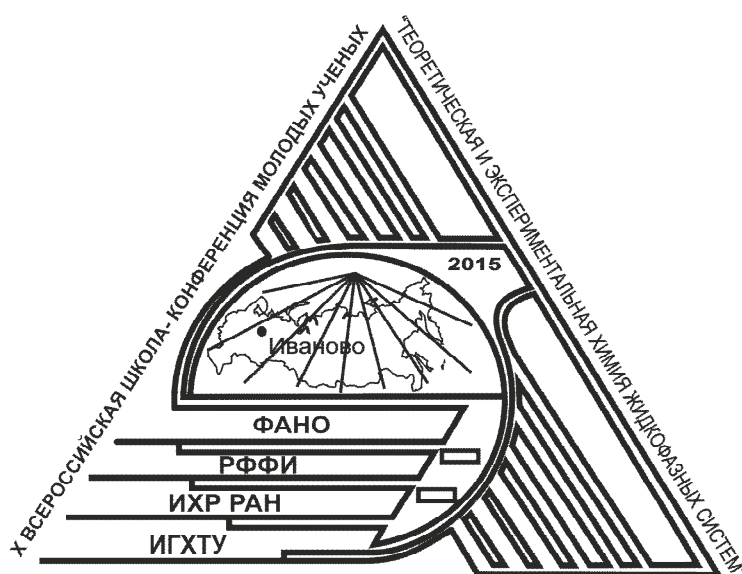
**«Теоретическая и
экспериментальная химия
жидкофазных систем»
(Крестовские чтения)**

26-30 октября 2015 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Иваново

**Федеральное агентство научных организаций
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова
Российской академии наук
Ивановский государственный химико-технологический университет**



**X ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА - КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
"ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ
ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ"
(КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)**

**26-30 октября 2015 г.
Иваново**

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ:

Председатель:

Захаров А.Г. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Ученый секретарь:

Кудрякова Н.О. – к.т.н., ИХР РАН, Иваново

Члены оргкомитета:

Агафонов А.В. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Алексеева О.М. – к.б.н., ИБХФ РАН, Москва

Вацадзе С.З. – д.х.н., проф., МГУ, Москва

Виноградов А.В. – к.х.н., ИТМО, С.-Петербург

Груздев М.С. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Добровольский Ю.А. – д.х.н., проф., ИПХФ РАН, Черноголовка

Дуров В.А. – д.х.н., проф., МГУ, Москва

Иванов В.К. – д.х.н., проф., ИОНХ РАН, Москва

Киселев М.Г. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Козик В.В. – д.т.н., проф., НИ ТГУ, Томск

Койфман О.И. – чл.-корр. РАН, ИГХТУ, Иваново

Колкер А.М. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Крылов Е.Н. – д.х.н., проф., ИвГУ, Иваново

Лебедева Н.Ш. – д.х.н., ИХР РАН, Иваново

Ломова Т.Н. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Мамардашвили Н.Ж. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Пророкова Н.П. – д.т.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Сафонова Л.П. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

Шарнин В.А. – д.х.н., проф., ИГХТУ, Иваново

Локальный оргкомитет:

Бичан Н.Г. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Дудина Н.А. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Ефремова Л.С. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Иванов К.В. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Куликова О.М. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Макаров Д.М. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Манин А.Н. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Потемкина О.И. – ИХР РАН, Иваново

Суров А.О. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Фадеева Ю.А. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Червонова У.В. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

*Конференция проводится при поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
(грант РФФИ № 15-33-10410)*

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ В 2D DOSY ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К МАЛЫМ МОЛЕКУЛАМ

Белов К.В.¹, Ходова В.С.¹, Ходов И.А.^{2,3}

¹*Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

²*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*

³*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
iakh@isc-ras.ru*

Оптимизация экспериментальных параметров в спектроскопии ЯМР является одной из важных задач для получения надежных результатов, имеющих четкий физический смысл. Оптимизация данных параметров способствует более конкретному и точному определению наиболее важных физико-химических свойств исследуемого соединения, таких как коэффициент самодиффузии молекул. Решающую роль в данном вопросе могут играть нежелательные обменные процессы, затрудняющие однозначную интерпретацию экспериментальных результатов.

В представленной работе было рассмотрено влияние экспериментальных параметров ЯМР 2D DOSY на результаты эксперимента по определению коэффициента самодиффузии на примере малых молекул. На точность определения необходимых параметров могут влиять множество нежелательных факторов, таких как: токи Фуко, градиент температуры в образце, неточность в определении длины радиочастотного импульса, время задержки между импульсами, недостатки в конструкции ЯМР спектрометра, и рассматриваемые нами обменные процессы между растворителем и растворенным веществом. Существует ряд способов для предотвращения данных негативных факторов: преобразование импульсной последовательности, усреднение температурного показателя, математическая обработка полученных данных и многие другие. В ходе научной работы была разработана программы по устранению данных нежелательных эффектов, и проведены эксперименты с её использованием. Кроме того, были учтены погрешности, ранее наблюдаемые в ЯМР спектрах, связанные с обменными процессами. В докладе представлен ход и данные выполненной работы, которые указывают на значительное увеличение точности определяемого коэффициента самодиффузии, с применением специальной разработанной импульсной программы.

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. ЯМР исследования выполнены на оборудовании центра коллективного пользования «Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований».

1. I.A. Khodov, G.A. Alper, G.M. Mamardashvili, N.Zh. Mamardashvili. Journal of Molecular Structure, 2015, 174-180.
2. I.A. Khodov, M.Yu. Nikiforov, G.A. Alper, G.M. Mamardashvili, N.Zh. Mamardashvili, O.I. Koifman. Journal of Molecular Structure, 2015, 426-430.

СОСТАВ И УСТОЙЧИВОСТЬ ТИРОНАТОВ ТИТАНА(IV) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Кузякин Д.В.¹, Безрядин С.Г.¹, Чевела В.В.², Иванова В.Ю.², Айсувакова О.П.³

¹*Оренбургский государственный аграрный университет, Оренбург, Россия*

²*Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань, Россия*

³*Оренбургский государственный педагогический университет, Оренбург, Россия
dart.kuziackin@yandex.ru*

В литературе практически отсутствуют сведения о константах образования тиронатных комплексов титана(IV). В данной работе приведены результаты исследования особенностей образования комплексов титана(IV) с динатриевой солью 4,5-диоксибензол-