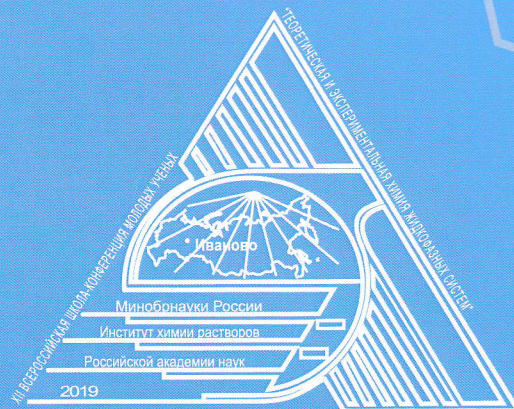


ХII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ



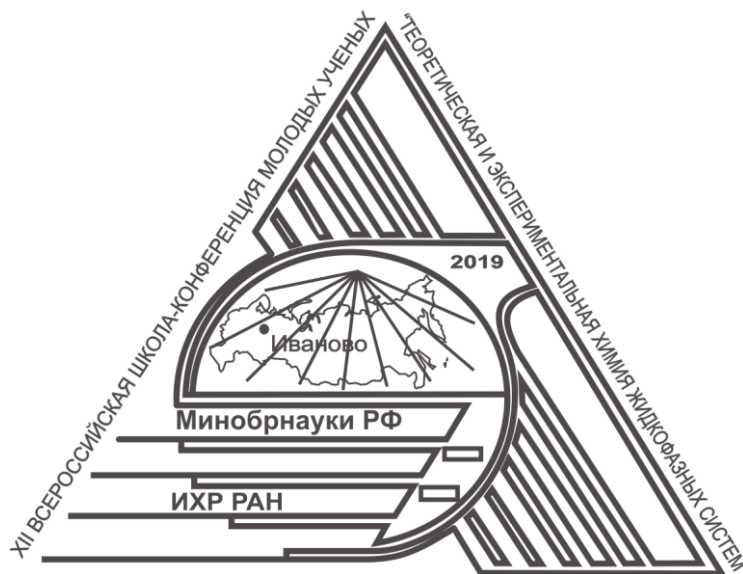
“ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ” (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

7 - 11 октября 2019 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ИВАНОВО

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук



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

**7 -11 октября 2019 г.
Иваново**

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ:

Председатель организационного комитета

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

Ученый секретарь:

Манин А.Н. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Члены организационного комитета:

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

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

Антина Л.А. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Бичан Н.Г. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Будков Ю.А. – д.ф.-м.н., доц. ИХР РАН, Иваново

Бурилов В.А. – к.х.н., КФУ, Казань

Бутман М.Ф. – д. ф.-м.н., проф., ИГХТУ, Иваново

Гамов Г.А. – к.х.н., ИГХТУ, Иваново

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

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

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

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

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

Ксенофонтов А.А. – ИХР РАН, Иваново

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

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

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

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

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

Одинцова Е.Г. – ИХР РАН, Иваново

Пидько Е.А. – к.х.н., проф., ИТМО, Санкт-Петербург

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

Рычков Д.А. – к.х.н., ИХТТМ СО РАН, Новосибирск

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

Суров А.О. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Терехова И.В. – д.х.н., доц., ИХР РАН, Иваново

Ходов И.А. – к.ф.-м.н., доц., ИХР РАН, Иваново

Чибиряев А.М. – к.х.н., доц., НИОХ СО РАН, Новосибирск

Чуев Г.Н. – д.ф.-м.н., ИТЭБ РАН, Москва

Члены локального оргкомитета:

Каликин Н.Н. – ИХР РАН, Иваново

Белов К.В. - ИвГУ, Иваново

Соборнова В.В. - ИГХТУ, Иваново

Секция 1. Устные доклады

Рассчитаны коэффициенты активности CsI в ДМФА, ПК и их смесях при 283, 298, 303, 313 и 323 К по результатам измерения растворимости хлорида калия в двойных системах CsI–ДМФА и CsI–ПК, а также в тройной системе CsI–ДМФА–ПК для трех составов смешанного растворителя ДМФА:ПК (масс.%) – 75:25, 50:50 и 25:75. Температурный коэффициент растворимости хлорида калия в растворах CsI–ДМФА положителен, а в растворах CsI–ПК – отрицателен. Коэффициент активности иодида цезия монотонно убывает с увеличением его концентрации при 298 К. Для смесей, содержащих 50 мас.% ПК, коэффициент активности больше по значению, чем для смесей, содержащих 25 мас.% ПК, но меньше, чем в индивидуальном ДМФА. Таким образом, значения коэффициентов активности немонотонно изменяются с увеличением содержания ПК в смешанном растворителе. Этот факт можно объяснить изменением характера взаимодействия компонентов смешанного растворителя. Найденные значения коэффициентов активности позволили рассчитать ΔG° растворения иодида цезия в ДМФА, ПК и их смесях, с использованием литературных данных по энтальпиям растворения и значения ΔS° растворения в указанных системах.

НАБЛЮДЕНИЕ СКРЫТЫХ КОНФОРМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ СТРИХНИНА В ХЛОРОФОРМЕ МЕТОДОМ 2D NOESY

Соборнова В.В.¹, Белов К.В.^{2,3}, Еремеев И.Е.¹ Ходов И.А.^{2,4}

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

³Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

⁴Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

На сегодняшний день исследование особенностей структуры малых биологически активных молекул вызывает особый интерес среди ученых. В связи с тем, что конформационная лабильность исследуемых молекул влияет на их свойства, изучение подобных соединений является одной из актуальных задач современной физической и фармацевтической химии. Долгое время считалось, что у молекулы стрихнина существует только одна конформационная форма. В последних исследованиях [1-4] было показано, что существует ряд других «скрытых» конформаций, обусловленных различным пространственным расположением атомов кислорода и азота. В данной работе был произведен эксперимент 2D NOESY с целью определения преобладающего конформера стрихнина в хлороформе. Данный эксперимент позволил установить конформационно зависимые межъядерные расстояния и показал, что в хлороформе кроме первого низкоэнергетического конформера могут присутствовать и другие, дополнительные конформации.

В настоящем исследовании был произведен исчерпывающий литературный анализ по данному вопросу, и обнаружено согласие величин долей конформеров. Данная информация послужит научной основой для понимания процессов, происходящих в растворах на молекулярном уровне.

Работа выполнена на УНУ «Флюид-Спектр» при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-06008). Частичное финансирование производилось за счет гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук: МК-1409.2019.3

1. C. Butts, C. Jones, J. Harvey. *J. Chem. Commun.*, 2011, **47**, 1193–1195
2. G. Tomba, C. Camilloni, M. Vendruscolo. *J. Methods*, 2018, **148**, 4-8
3. M. Schmidt, F. Reinscheid, H. Sun, H. Abromeit, G. Scriba, F. Sönnichsen, M. John, U. Reinscheid. *Eur. J. Org. Chem.*, **2014**, 1147-1150
4. G. Bifulco, R. Riccio, G. Martin, A. Buevich, T. Williamson. *J. Organic Letters*, **2013**, 15(3), 654–657

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИРИНА А₃В-ТИПА

Солдатова К.М.¹, Смирнова А.И.¹, Ежов А.В.², Брагина Н.А.², Гиричева Н.И.¹, Усольцева Н.В.¹

¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

²Московский технологический университет, Москва, Россия

parrabola@mail.ru

Производные порфирина в последнее время рассматриваются как одни из перспективных материалов для органической оптоэлектроники. Тонкая настройка физических и физико-химических свойств при вариации природы заместителей в производных порфирина А₃В-типа делает их объектами интенсивных исследований. Для четырех производных порфирина (рис. 1) получены экспериментальные ЭСП в