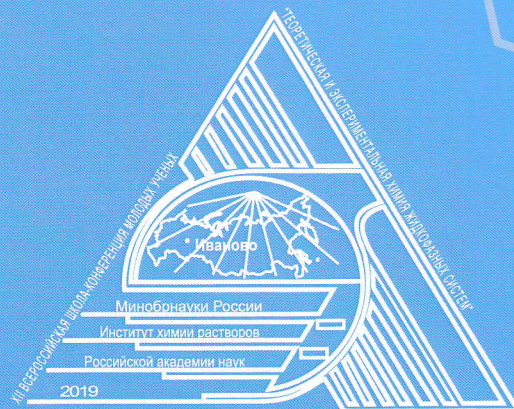


ХII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ



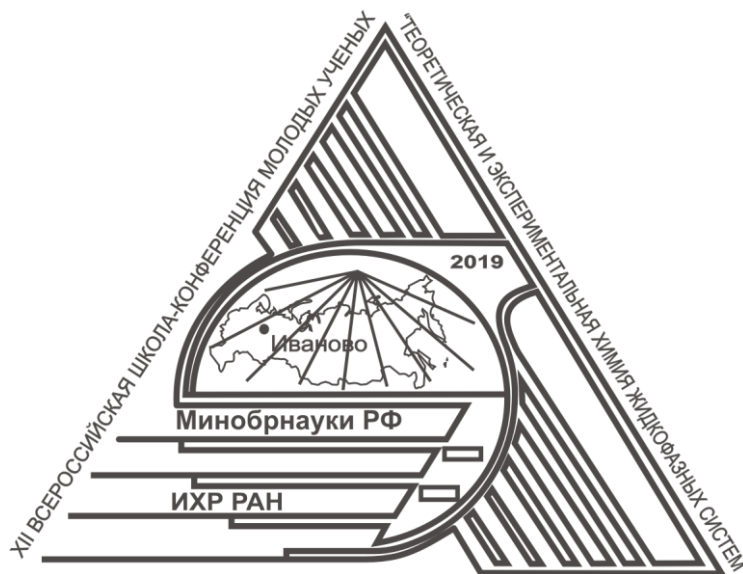
“ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ” (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

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

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЫ КАРБАМАЗЕПИНА С ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕЙ МЕТОДОМ ЯМР

Еремеев И.Е.¹, Белов К.В.^{2,3}, Ходов И.А.^{3,4}, Дышин А.А.³, Киселев М.Г.³

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Ивановский государственный университет, биолого-химический факультет, Иваново, Россия

³Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

⁴Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

В настоящее время медицина обладает широким спектром лекарственных средств, полученных, как синтетически, так и методом экстракции из природного сырья. Однако большое количество данных препаратов обладают ярко выраженным побочным действием на организм человека. Поэтому необходима разработка методов пролонгированной подачи лекарственного средства в малых дозах, для поддержания концентрации соединения в крови и минимизации побочных реакций. Одной из попыток создания подобных методов является разработка систем по типу «полимер-лекарство» известных еще с середины прошлого века.

На сегодняшний день, одной из актуальных проблем в современной физической и фармацевтической химии является инкапсулирование биологически активных соединений в полимерные матрицы. В данной работе было выбрано модельное соединение карбамазепин, которое обычно применяется в медицине при лечении острых форм эпилепсии, однако принцип действия данного препарата все еще не до конца изучен.

Целью настоящей работы является обсуждение и последующая апробация метода ядерного магнитного резонанса (ЯМР) в изучении особенностей импрегнации молекулы карбамазепина в полимерную матрицу.

Работа выполнена на УНУ «Флюид-Спектр» за счёт средств федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 (Номер проекта: 14.616.21.0097).

1. I.A Khodov, M.Y. Nikiforov, G.A. Alper, D.S. Blokhin, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, N. Georgi, J. *Molecular Structure*, **2013**, 1035, 358-362.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДЕПРОТОНИРОВАНИЯ ОРТО-АМИНОБЕНЗОЛСУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЫ В ГИДРАТНЫХ КОМПЛЕКСАХ РАЗНОГО СОСТАВА

Ершова А.О., Федоров М.С.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

В данной работе выполнено теоретическое исследование (DFT(B3LYP)/cc-pVTZ) структуры и энергетики гидратных комплексов молекулы орто-аминобензолсульфоновой кислоты (2-АБСК), а также энергий депротонирования 2-АБСК. Гидратные комплексы 2-АБСК:*n*H₂O строились путем последовательного добавления молекул воды (*n* = 1-6) к фрагментам молекулы 2-АБСК с потенциальными акцепторами и донорами протонов, при этом выполнялась геометрическая оптимизация и расчет частот колебания.

Предварительные расчеты по изучению конформационных свойств свободной молекулы 2-АБСК позволили выявить структуру наиболее энергетически выгодного конформера, которая использовалась при построении исследуемых комплексов. При добавлении одной молекулы воды к 2-АБСК удалось получить три различные структуры комплекса 2-АБСК:1H₂O. В наиболее энергетически выгодном комплексе молекула воды располагается между –SO₃H и –NH₂ группами, при этом образуется две межмолекулярные водородные связи O–H...O (*r* = 1.672 Å) и O–H...N (*r* = 1.944 Å). В них молекула воды находится либо у –SO₃H, либо у –NH₂ группы, при этом образуется по одной водородной связи. Моделирование комплексов 2-АБСК:2H₂O проводилось на основе наиболее энергетически выгодного комплекса 2-АБСК:1H₂O. В результате были получены 4 варианта геометрического строения 2-АБСК:2H₂O. Комплексу с минимальной энергией соответствует структура, в которой вторая молекула воды образует межмолекулярную водородную связь с первой молекулой воды. Аналогично для комплексов 2-АБСК:3H₂O, 2-АБСК:4H₂O и 2-АБСК:6H₂O были использованы наиболее энергетически выгодные структуры предыдущего шага. Были получены различные варианты строения комплексов, среди которых комплексы с минимальной энергией имеют строение, характеризующееся образованием водородных связей между молекулами воды. Таким образом, каждая последующая молекула воды образует водородные связи с другими молекулами воды, находящимися в комплексе, это наиболее