



ИХП РАН

IX Международная
научная конференция

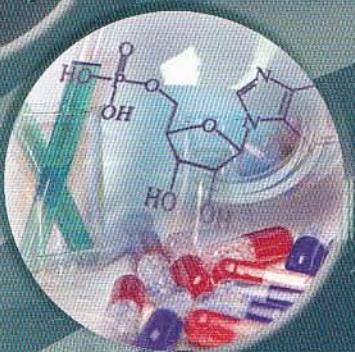
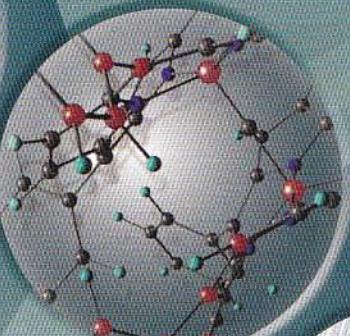
КИНЕТИКА и МЕХАНИЗМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ. *Кристаллизация и материалы будущего*

*IV Всероссийская школа молодых ученых
по кинетике и механизму кристаллизации*

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

13-16 сентября 2016 г.

г. Иваново, 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



**IX Международная научная конференция
"Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация и материалы будущего"**

13 - 16 сентября 2016 г.
г. Иваново, Россия

ОРГКОМИТЕТ

Председатель оргкомитета

чл.-корр. РАН Мелихов И.В. (МГУ, Москва)

Сопредседатели

проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Ученый секретарь

к.х.н. Алексеева О.В. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)

акад. РАН Алдошин С.М. (ИПХФ РАН, Черноголовка)

чл.-корр. РАН Алымов М.И. (ИМЕТ РАН, Москва)

д.ф.-м.н. Баграташвили В.Н. (ИПЛИТ РАН, Москва)

акад. РАН Банных О.А. (ИМЕТ РАН, Москва)

чл.-корр. Бачурин С.О. (ИФАВ РАН, Черноголовка)

д.х.н. Бердоносов С.С. (МГУ, Москва)

акад. РАН Бузник В.М. (ВИАМ, Москва)

чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (МГУ, Москва)

чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург)

чл.-корр. РАН Донцова О.А. (МГУ, Москва)

д.х.н. Душкин А.В. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)

акад. РАН Иевлев В.М. (МГУ, Москва)

акад. РАН Каблов Е. Н. (ВИАМ, Москва)

проф. Каманина Н.В. (ОАО "ГОИ им. С.И. Вавилова", С.-Петербург)

проф. Кесслер В. (Швеция)

чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)

д.х.н. Козик В.В. (ТГУ, Томск)

проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

акад. РАН Кузнецов Н.Т. (ИОНХ РАН, Москва)

проф. Кулов Н.Н. (ИОНХ РАН, Москва)

акад. РАН Лунин В.В. (МГУ, Москва)

акад. РАН Ляхов Н.З. (ИХТТМ СО РАН, Новосибирск)

проф. Наркевич И.А. (СПХФА Минздрава России, С.-Петербург)

проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Сырбу С.А. (ИГХТУ, Иваново)

проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)

проф. Федоров П.П. (ИОФ РАН, Москва)

д.т.н. Халиков С.С.(ИНЭОС РАН, Москва)

акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХЭ РАН, Москва)

акад. РАН Чурбанов М.Ф. (ИХВВ РАН, Н.Новгород)

проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

акад. РАН Шевченко В.Я. (ИХС РАН, С.-Петербург)

чл.-корр. РАН Шибаев В.П.(МГУ, Москва)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель программного комитета

проф. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Члены программного комитета:

проф. Агафонов А.В. (ИХР РАН, Иваново)

акад. РАН Бузник В.М. (ВИАМ, Москва)

проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)

чл.-корр. РАН Шибаев В.П. (МГУ, Москва)

ЛОКАЛЬНЫЙ ОРГКОМИТЕТ

Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)

Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)

Куликова Л.Б. (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)

Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)

Трусова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)

Секция 3

гистидинового фрагмента дипептида, а также неподеленной электронной пары атома азота во фрагменте бета-аланина на разрыхляющую орбиталь NH-связи гистидинового фрагмента дипептида. Указанные водородные связи стабилизируют структуру молекулы. Результаты теоретического исследования можно использовать в QSPR-моделях для оценки энталпии сублимации и определения показателей, характеризующих биоактивность данного соединения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 12-03-31758мол_а.

152 ДВУМЕРНАЯ ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ НУКЛЕАЦИИ ПРИ НАЛИЧИИ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОЛИМОРФИЗМА

Ходов И.А.^{1,2}, Ефимов С.В.², Клочков В.В.², Киселев М.Г.¹

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

² Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, Россия
iakh@isc-ras.ru

Твердые вещества с одинаковым химическим составом, но различной структурой кристаллической решетки принято называть полиморфными формами, а явление отвечающее молекулярным механизмам, обусловливающим такое различие – полиморфизмом. Изменение полиморфной формы во время производства лекарственных средств может оказать негативное влияние на биодоступность и растворимость фармацевтических препаратов. Поэтому предсказание кристаллических форм лекарственных соединений является ключевой задачей современной кристаллохимии. Полиморфная решетка может определяться не только молекулярной упаковкой кристалла, но и различными конформациями молекул. Такое явление называют конформационным полиморфизмом. Присутствие различных конформеров молекул в насыщенном растворе вносит дополнительную степень сложности в механизмы кристаллизации полиморфов. Кристаллизации является процессом многоступенчатым, и ключевыми факторами, определяющими полиморфную форму, являются: степень пресыщенности, тип растворителя, наличие добавок и конформационный состав молекул в растворе.

Мощным методом, позволяющим производить контроль большинства вышеперечисленных параметров, является двумерная спектроскопия ЯМР. Современные методы двумерной спектроскопии ЯМР позволяют не только определять конформационный состав молекул, но и оценивать влияние растворителя на процесс нуклеации. В данной работе будут представлены современные подходы в ЯМР спектроскопии применительно к описанию процесса нуклеации лекарственных соединений из насыщенных растворов при наличии конформационного полиморфизма [1-3]. Будет представлена оценка возможности влияния негативных факторов (спиновая диффузия, релаксационный фактор, t₁-шум и др.) на точность оценки конформационного состава малых молекул в насыщенных растворах.

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 № 16-03-00640 и 16-53-150007) и гранта президента РФ по поддержке молодых ученых (МК-9048.2016.3).

1. I.A. Khodov, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, G.A. Alper, L.A.E. Batista de Carvalho, *Eur. J. Pharm. Sci.*, 2014, **65**, 65–73.
2. I.A. Khodov, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, L.A.E. Batista de Carvalho, M.G. Kiselev, *J. Mol. Struct.*, 2016, **1106**, 373–381.
3. S.V. Efimov, I.A. Khodov, E.L. Ratkova, M.G. Kiselev, S. Berger, V.V. Klochkov, *J. Mol. Struct.*, 2016, **1104**, 63–69.

156-1 ОСОБЕННОСТИ ГИДРАТАЦИИ И АССОЦИАЦИИ ПРОЛИНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ КСІ ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Федотова М.В.¹, Дмитриева О.А.¹, Чуев Г.Н.²

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

² Институт теоретической и экспериментальной биологии Российской академии наук, Пущино, Россия
hebrus@mail.ru

Пролин (Pro), протеиногенная аминокислота, относится к числу природных биопротекторов, проявляющих мощное защитное действие в живых организмах, находящихся в условиях различных абиотических стрессов, таких как повышенное содержание солей в среде или перепады температуры. Установлено [1], что в подобных неблагоприятных условиях в цитоплазме клеток происходит накопление Pro, что, в свою