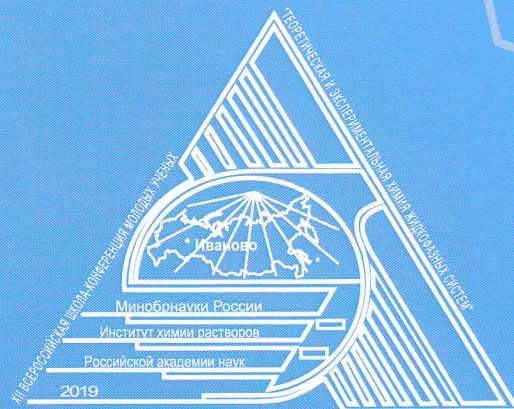


# ХII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ



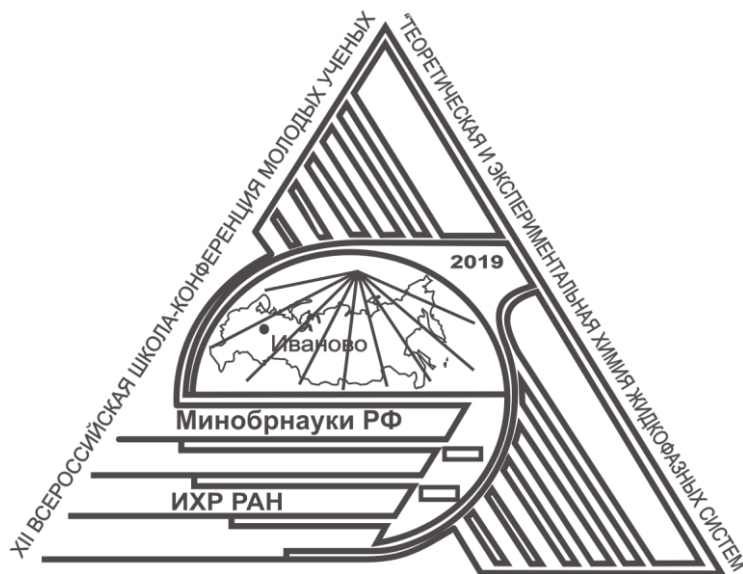
## “ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ” (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

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  $\Delta G^\circ$  растворения иодида цезия в ДМФА, ПК и их смесях, с использованием литературных данных по энтальпиям растворения и значения  $\Delta S^\circ$  растворения в указанных системах.

### НАБЛЮДЕНИЕ СКРЫТЫХ КОНФОРМЕРОВ МОЛЕКУЛЫ СТРИХНИНА В ХЛОРОФОРМЕ МЕТОДОМ 2D NOESY

Соборнова В.В.<sup>1</sup>, Белов К.В.<sup>2,3</sup>, Еремеев И.Е.<sup>1</sup> Ходов И.А.<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

<sup>2</sup>Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

<sup>3</sup>Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

<sup>4</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

[iakh@isc-ras.ru](mailto: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 А<sub>3</sub>В-ТИПА

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

<sup>1</sup>Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

<sup>2</sup>Московский технологический университет, Москва, Россия

[parrabola@mail.ru](mailto: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 А<sub>3</sub>В-типа делает их объектами интенсивных исследований. Для четырех производных порфирина (рис. 1) получены экспериментальные ЭСП в