



ИХР РАН

VIII Международная научная
конференция

КИНЕТИКА и МЕХАНИЗМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.

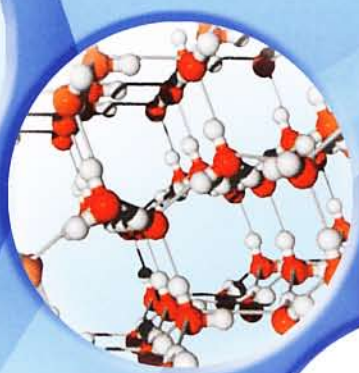
**Кристаллизация как форма
самоорганизации вещества**

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

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

24-27 июня 2014 г.

ИВАНОВО, Россия



Российская академия наук
Научный совет по химической технологии
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ивановский государственный химико-технологический университет
Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева



**VIII Международная научная конференция
"Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация как форма самоорганизации вещества"**

24 - 27 июня 2014
г. Иваново

Оргкомитет

Председатель оргкомитета

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

Сопредседатель

проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Ученый секретарь

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

проф. Абрамов Ю. (США)

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

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

чл.-корр. РАН Баринин С.М. (ИМЕТ РАН, Москва)

проф. Бауэр-Брендл А. (Дания)

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

д.х.н. Бердонос С.С. (МГУ, Москва)

чл.-корр. РАН Бойнович Л.Б. (ИФХЭ РАН, Москва)

проф. Велага С. (Швеция)

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

чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ИХС РАН, С.-Петербург)

акад. РАМН Егоров А.М. (МГУ, Москва)

проф. Идрисси А. (Франция)

акад. РАН Иевлев В.М. (ГТУ, Воронеж)

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

проф. Кесслер В. (Швеция)

д.х.н. Киселев М.Г. (ИХР РАН, Иваново)

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

д.х.н. Козик В.В. (ТГУ, Томск)

проф. Колесников А.А. (СПбГТИ (ТУ), С.-Петербург)

проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Кулов Н.Н. (ИОНХ РАН, Москва)

акад. РАН Лукин В.В. (МГУ, Москва)

д.х.н. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Рашкович Л.Н. (МГУ, Москва)

проф. Сейсенбаева Г. (Швеция)

акад. РАН Солнцев К.А. (ИМЕТ РАН, Москва)

проф. Сырбу С.А. (ИГХТУ, Иваново)

д.м.н. Трещалина Е.М. (ГУ РОНЦ, Москва)

проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)

проф. Федоров П.П. (ИОФ РАН, Москва)

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

чл.-корр. РАН Чекмарев А.М. (РХТУ, Москва)

чл.-корр. РАН Чернов А.А. (ИК 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)

Локальный оргкомитет

Волкова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)

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)

том числе физическая нагрузка, приводят у них к однотипным изменениям кристаллогенных свойств биожидкости, проявляющимся в умеренной активации кристаллогенеза, с одновременным упрощением формирующихся элементов и нарастанием деструктивных нарушений в них. Важно, что после периода отдыха данные сдвиги полностью нивелируются, что указывает на их метаболическую сопряженность с физической нагрузкой.

Также проведен сравнительный анализ особенностей дегидратационной структуризации сыворотки крови пациентов с ожогами и крыс с экспериментальной термической травмой. Установлено, что указанный патологический стрессор и в этом случае обуславливает некоторые типовые изменения характера свободной и инициированной кристаллизации биологической жидкости, включающие тенденцию к ингибированию структуризации, упрощению формирующихся структурных элементов фазии, резком нарастании степени деструкции последней и выраженном сужении краевой белковой зоны микропрепарата.

Закключение. Таким образом, на примере различных физиологических и патологических состояний удалось показать адаптивность реакции кристаллогенных свойств биологической жидкости (ее кристаллостаз) на воздействие стрессирующих факторов. Это позволяет рассматривать сдвиги кристаллостаза, индуцированные последними, как компонент общего адаптационного синдрома.

КОНФОРМАЦИОННОЕ СОСТОЯНИЕ ФЕЛОДИПИНА В ДМСО-Н₂O

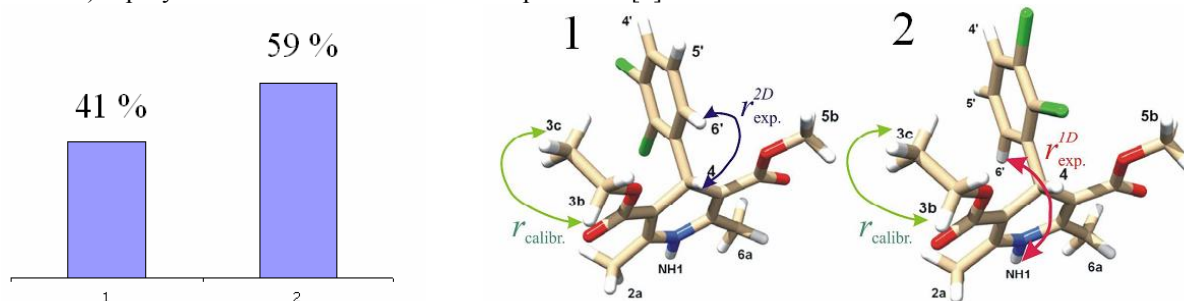
Ходов И.А.¹, Киселев М.Г.¹, Ефимов С.В.², Клочков В.В.²

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

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

Определение населенности конформационных состояний малых биологически активных молекул в растворах является приоритетной задачей в изучении процессов кристаллизации лекарственных соединений из насыщенных растворов. Существует два известных подхода к решению такого рода задачи. Первый основан на анализе остаточного диполь-дипольного взаимодействия между магнитными ядрами ¹³C и ¹H [1] в частично ориентированных в лиотропных жидкокристаллических системах. Второй подход основывается на согласованном анализе данных двумерной спектроскопии ЯМР (2D NOESY) и результатов квантово-химических расчетов [2].



С целью проверки соответствия результатов двух различных подходов были проведены эксперименты 2D NOESY в системе ДМСО-Н₂O (основа для лиотропных жидкокристаллических систем). Концентрация протонов в Н₂O много выше чем в дейтерозамещенном D₂O (110 М). Динамический диапазон сигнала спектра такого образца превышает 100000:1, что делает невозможным обнаружения сигнала исследуемого образца. Поэтому становится необходимым проведение экспериментов NOESY с использованием специальной импульсной последовательности, которая включает биномиальный фазовый набор для подавления сигнала растворителя (WATERGATE).

На основе анализа результатов двумерной спектроскопии ЯМР (2D WATERGATE NOESY) найдены доли конформеров фелодипина в смешанном растворителе близком к насыщению DMSO-Н₂O (см. рисунок).

Благодарности: Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (грант № 12-03-00775-а и 13-03-97041 р_поволжье а), а также международного гранта Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme PIRSES-GA-2009-247500. ЯМР исследования выполнены на оборудовании центра коллективного пользования "Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований".

1. V.V. Klochkov, A.V. Klochkov, C.M. Thiele, S. Berger. J. Magn. Res., 2006, **179**, 58–63.
2. I.A. Khodov, S.V. Efimov, M.Yu. Nikiforov, V.V. Klochkov, Nikolaj Georgi. J. Pharm. Sci., 2014, **103**, 392–394.