

**VII ВСЕРОССИЙСКАЯ  
ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ  
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**



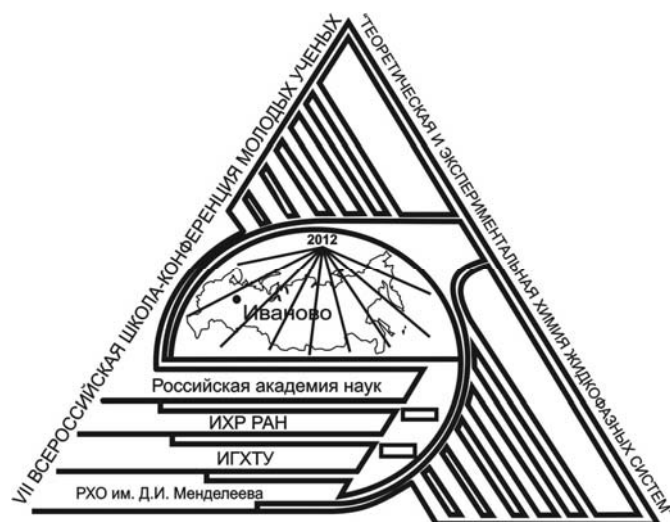
**"ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И  
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ  
ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ"  
( КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ )**

**12-16 ноября 2012 г.**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**Иваново**

**Российская академия наук  
Министерство образования и науки РФ  
Российский фонд фундаментальных исследований  
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук  
Ивановский государственный химико-технологический университет  
Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева  
Департамент образования Ивановской области**



## **VII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**

### **"ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ"**

**(КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**12-16 ноября 2012 г.  
Иваново**

## **ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ**

### **Председатель:**

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

### **Ученые секретари:**

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

Фадеева Ю.А. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

### **Члены оргкомитета:**

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

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

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

Шарнин В.А. – д.х.н., проф., ИГХТУ, Иваново

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

Клюев М.В. – д.х.н., проф., ИвГУ, Иваново

Вьюгин А.И. – д.х.н., ИХР РАН, Иваново

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

Морыганов А.П. – д.х.н., проф., ИХР РАН, Иваново

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

Крылов Е.Н. – д.х.н., проф., ИвГУ, Иваново

Пуховский Ю.П. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Макаров Д.М. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Суров А.О. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Румянцев Е.В. – к.х.н., ИГХТУ, Иваново

Моторина Е.В. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

Дудина Н.А. – к.х.н., ИХР РАН, Иваново

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

## ЛИНЕЙНЫЕ И ЦИКЛИЧЕСКИЕ ОЛИГОПИРРОЛЫ В РЕАКЦИЯХ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С БЕЛКАМИ

*Кочергин Б.А.<sup>1</sup>, Соломонов А.В.<sup>1</sup>, Румянцев Е.В.<sup>1</sup>, Антина Е.В.<sup>1,2</sup>*

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

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

*Deus-Lex@yandex.ru*

В настоящее время приобретает широкое развитие изучение макрогетероциклических соединений. Борфторидные комплексы дипирролилметенов (BODIPY) и порфирины различного строения успешно применяются в качестве лазерных красителей флуоресцентных меток и сенсоров, при лечении ряда раковых, кожных, глазных, иммунодефицитных и другие заболеваний.

Известно, что олигопирролы, как правило, вводится в кровь в концентрированном виде, что, в ряде случаев, может уменьшить их действие или даже вызвать побочные эффекты. Благодаря взаимодействию с макромолекулами, можно контролировать эффективность и биораспределение веществ, которые преимущественно локализуются в цитоплазме и плохо связываются с клеточными мембранами. Эффективность терапевтического действия этих соединений определяется как физическими свойствами самих олигопирролов, так и спецификой их связывания с биомacroмолекулами, в том числе и с транспортными сывороточными белками крови, которые являются наиболее распространенными белками в плазме крови. Одним из таких белков является бычий сывороточный альбумин (BSA), который содержит в своей структуре сайты связывания как для гидрофильных молекул, например, ионов металлов, молекул лекарственных препаратов, так и для гидрофобных соединений, таких как жирные кислоты, гормоны, что неизбежно приводит к изменению свойств как самих BODIPY, так и присоединенных к белку молекул. В связи с этим цель данного исследования состояла в оценке связывающей способности альбумина и его билирубинового комплекса с BODIPY и мезо-(тетрасульфобензил)порфином.

Принимая во внимание способность к флуоресценции всех применяемых в исследовании соединений, использование методов синхронной и эмиссионной флуоресценции считаются наиболее целесообразными. Для оценки транспортной функции альбумина для обоих соединений были определены кинетические и термодинамические параметры связывания, а также величины, характеризующие флуоресцентный резонансный перенос энергии.

*Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации для молодых российских ученых – кандидатов наук (№ МК-401.2011.3) и Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (госконтракт № 14.740.11.0617), а также при поддержке гранта РФФИ (грант № 12-03-31309).*

## КОНФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛ ФЕЛОДИПИНА В РАСТВОРЕ ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДА-D6 НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ЯМР

*Ходов И.А.<sup>1</sup>, Ефимов С.В.<sup>2</sup> Блохин Д.С.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

<sup>2</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*[iakh@isc-ras.ru](mailto:iakh@isc-ras.ru)*

Фелодипин (3-этил-5-метил-4-(2,3-дихлорфенил)-2,6-диметил-1, 4-дигидропиридин-3, 5-дикарбоксил) является блокатором кальциевых каналов и широко используется в

## Секция 1

лечении артериальной гипертензии. Возможность существования различных полиморфных форм в связи с конформаций фенильного кольца было предсказано в [1]. Основным средством изучения пространственной структуры и конформационного состояния молекул в растворах является спектроскопия ЯМР. Ключевым моментом в установлении конформационной геометрии молекул в растворах, является измерение межъядерных расстояний. Данная методика основывается на существовании сильной зависимости константы скорости кросс-релаксации  $\sigma_{ij}$  от расстояния  $r_{ij}$  между взаимодействующими ядерными спинами для различных пар протонов в молекуле  $\sigma_{ij} \sim 1/r_{ij}^6$ .

Определение скоростей кросс-релаксации возможно не только из 2D NOESY эксперимента, но и при помощи 1D селективного NOE эксперимента [2]. Для малых конформационно нежестких молекул особую актуальность приобретает проблема определения межъядерных расстояний с целью получения количественной информации об относительной населенности различных конформеров. Этой цели можно достичь путем нормировки интенсивностей кросс-пиков 2D NOESY эксперимента, дополнительного проведения 1D NOE экспериментов, а также учета анизотропии вращательного движения молекулы в определении эффективных межъядерных расстояний.

В настоящей работе, на спектрометре ЯМР Bruker AVANCE II 500 выполнены одномерный и двумерные эксперименты NOE растворов фелодипина в диметилсульфоксида-d6 при температуре 298 К. Отнесение линий в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C и 1D NOE фелодипина было проведено с использованием двумерной ЯМР спектроскопии (COSY, TOCSY, HMBSC, HSQC). Оказалось, что не для всех пар протонов фелодипина представляется возможным определение межъядерных расстояний на основе данных 2D NOESY; соответствующие уточнения и дополнения были внесены из 1D селективного NOE эксперимента. На основе кросс-корреляционного анализа, была проведена оценка относительной населенности возможных конформационных состояний, полученных из квантовомеханических расчетов.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (N\_12-03-31001 мол\_a).*

- 1 S. Srčić, J. Kerč, U. Urleb, I. Zupančič, G. Lahajnar, B. Kofler, J. Šmid-Korbar. International Journal of Pharmaceutics, 1992, 87, 1–10.
- 2 C. P. Butts, C. R. Jones, Z. Song, T. J. Simpson. Chemical Communications, 2012, 48, 9023-9025.

### ТЕРМОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСА 18-КРАУН-6 С L-ФЕНИЛАЛАНИНОМ В РАСТВОРИТЕЛЯХ H<sub>2</sub>O-EtOH и H<sub>2</sub>O-ДМСО

*Воронина С.И., Чернов И.В., Усачева Т.Р., Шарнин В.А.*

Ивановский государственный химико-технологический университет,  
НИИ термодинамики и кинетики химических процессов, Иваново, Россия  
*oxt@isuct.ru*

Термохимическим методом при  $T = 298.15$  К изучено влияние составов растворителей H<sub>2</sub>O-EtOH и H<sub>2</sub>O-ДМСО на реакцию образования молекулярного комплекса эфира 18-краун-6 (18К6) с L-фенилаланином (Phe), [Phe18К6]. Из данных калориметрических измерений, проведенных на микрокалориметре титрования ТАМ III (ТА Instruments, США), рассчитаны стандартные термодинамические параметры ( $\Delta_r G^\circ$ ,  $\Delta_r H^\circ$ ,  $T\Delta_r S^\circ$ )