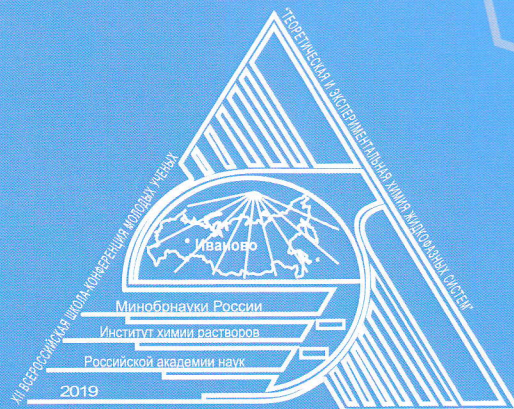


ХII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ



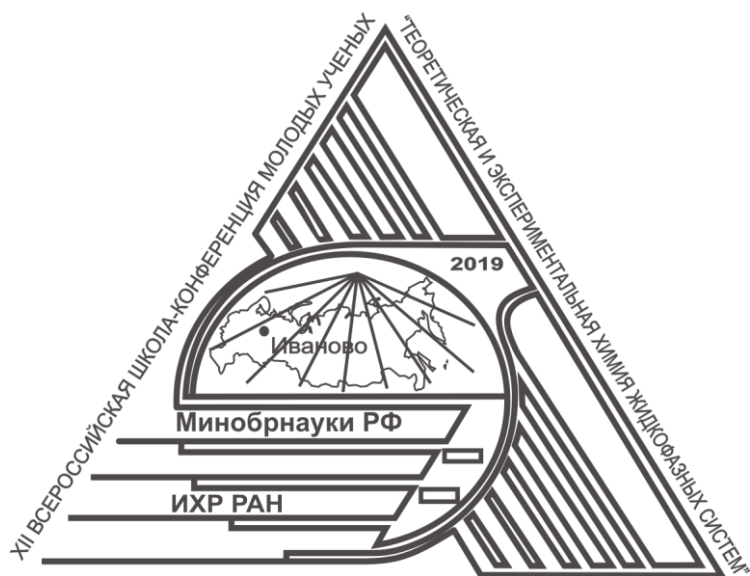
“ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ” (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

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

СМЕШАННОЛИГАНДНОЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ НИКЕЛЯ(II) И МЕДИ(II)
С АМИНОКИСЛОТАМИ И ДИПЕПТИДАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Кувалакова С.Э., Искандерова А.И., Пырзу Д.Ф.
Ивановский государственный университет, Иваново, Россия
skuvalakova@mail.ru

Изучение смешанного комплексообразования 3d-металлов с аминокислотами актуально, т.к. позволяет выявить особенности связывания катиона металла белковыми молекулами и подобрать условия их использования в различных медико-биологических методиках. Среди природных аминокислот особое место занимает гистидин, способный к поливариантной координации катионов переходных металлов. Поэтому изучение систем М(II) - гистидин – олигопептид в водном растворе с целью определения дентатности и типов координации лигандов в смешанных комплексах представляет определенный интерес.

В ходе работы была проведена серия рН-потенциометрических титрований растворов $(\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 + \text{HHis} + \text{HGlyGly})$ и $(\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 + \text{HHis} + \text{HL})$ (L = Ser, Asn) раствором NaOH при 25°C и ионной силе 0,5 (KNO_3) при различных соотношениях М : His : L (L = GlyGly, Ser, Asn). ЭДС цепи с переносом, включающей стеклянный и хлорсеребряный электроды, измеряли компенсационным методом. Обработку экспериментальных данных рН-метрических измерений проводили по программе PHMETR.

Компьютерная обработка потенциометрических данных позволила уточнить ионный состав растворов в указанных системах и выявить существование смешанных комплексов различного состава. В частности, в системе Cu-His-L (L = Ser, Asn) выявлено существование комплексов состава CuHisL , CuHHisL , CuHisLH_1 и CuHisLH_2 (заряды опущены). Существование последних обусловлено как кислотной диссоциацией имидазольного фрагмента гистидина, так и спиртовой или амидной группы серина или аспарагина. В системе Ni-His-GlyGly удалось выявить присутствие в растворах смешанных комплексов состава NiHisGG , NiHHisGG , NiHisGGH_1 , NiHisGGH_2 . В этих комплексах возможны диссоциация имидазольного фрагмента гистидина, а также кислотная диссоциация пептидной группы. Необычным явилось то, что при соотношении Ni:His:GlyGly 1:1:2 было выявлено существование комплексов состава NiHHisGG_2 , NiHisGG_2 и $\text{NiHisGG}_2\text{H}_1$. Присутствие в растворе последних выявлено впервые.

Для указанных выше систем была снята серия электронных спектров поглощения растворов в зависимости от рН. Измерение оптической плотности проводили на спектрофотометре КФК-3. Полученные константы устойчивости будут использованы как для выбора методики калориметрических измерений, так и расчета полных термодинамических параметров. Сопоставление спектральных данных и данных термодинамики позволит предложить наиболее вероятный тип координации аминокислотного остатка и дипептида в смешанных комплексах.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕОБЛАДАЮЩЕЙ КОНФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛ СТРИХНИНА НА
ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Соборнова В.В.¹, Белов К.В.^{2,3}, Еремеев И.Е.¹, Ходов И.А.^{2,4}

¹Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

³Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

⁴Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
iakh@isc-ras.ru

Определение конформационных особенностей малых биологически активных молекул имеет большое значение в современной физической и фармацевтической химии. На сегодняшний день существует большое количество подходов к установлению доминирующей конформационной формы исследуемой молекулы в растворе. Одним из ведущих методов для решения подобного рода задач является спектроскопия ЯМР [1]. В данной работе был произведен расчет наиболее вероятной конформационной формы молекулы стрихнина в хлороформе на основе 1D ЯМР спектроскопии и квантовохимических расчетов.

Для достижения поставленной задачи были получены спектры ЯМР ^1H и ^{13}C , отнесение которых проводилось при помощи двумерных подходов (^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^{13}C HMBC, ^1H - ^1H TOCSY). Затем на основе расчетных данных, полученных из литературных источников [2], были проведены соответствующие корреляционные зависимости расчетных значений химических сдвигов ^{13}C и полученных экспериментально (см. рисунок 1). Исходя из значения среднеквадратичного отклонения, был сделан вывод о преобладающей конформационной структуре молекулы стрихнина в хлороформе.

Секция 1. Стеновые доклады

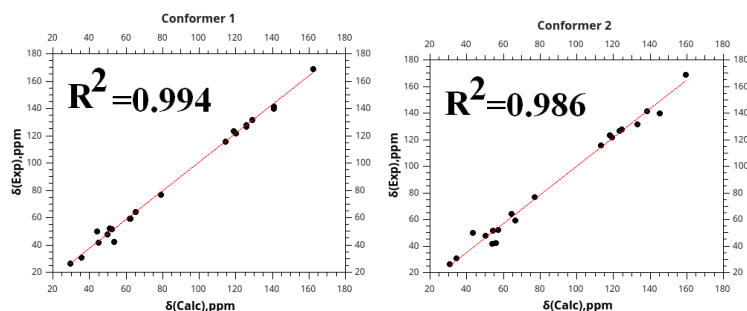


Рисунок 1. Зависимость расчетных и экспериментальных химических сдвигов ^{13}C . Работа выполнена на УНУ «Флюид-Спектр» при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-29-06008). Частичное финансирование производилось за счет гранта Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук: МК-1409.2019.3

1. I.A. Khodov, M.G. Kiselev, S. V. Efimov, V. V. Klochkov. *J. Magnetic Resonance*, **2016**, 266, 67-68.
2. G. Bifulco, R. Riccio, G. Martin, A. Buevich, T. Williamson. *J. Organic Letters*, **2013**, 15(3), 654–657

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАРНОЗИНА С НИКОТИНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Тюнина В.В., Дунаев А.М.

Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
isuct-studlab@mail.ru

До сих пор остаются актуальными вопросы о структурных детерминантах белков, ответственных за функциональность и стабильность конъюгатов «белковый вектор – лекарственное вещество», о движущих силах их образования и роли разных факторов, оказывающих регуляторное влияние на эти процессы. Выбор карнозина (Car) в качестве объекта исследования обусловлен тем, что подобные соединения содержат структурные элементы, обеспечивающие их активный транспорт в организме, что делает их удобной транспортной формой для переноса лекарственных средств.

Целью работы является установление влияния природы среды на эффективность связывания Car с фармакологически активным соединением – никотиновой кислотой, что будет способствовать развитию физико-химических принципов создания новых лекарственных форм. Для этого проведены расчеты взаимодействия карнозина с никотиновой кислотой DFT методом B3LYP с базисом cc-pVTZ, реализованные в пакете программ Gaussian 03. Использовали две модели окружающей молекулу среды: вакуум и воду. Моделирование водного окружения проводили с помощью PCM. В вакууме (газовая фаза) карнозин представляет собой молекулу, в воде (жидкая фаза) – это цвиттер-ион. Для создания исходной геометрии карнозина в воде использовали его структуру из Кембриджской базы данных. В вакууме проводился конформационный поиск с целью установления структуры молекулы, имеющей минимальное значение на поверхности потенциальной энергии. При исследовании взаимодействия карнозина с никотиновой кислотой использовали их соотношение как 1:2. Получены геометрические и энергетические характеристики указанных молекул и образуемого ими комплекса. Установлено, что в жидкой фазе комплекс более устойчив, чем в газообразном состоянии.

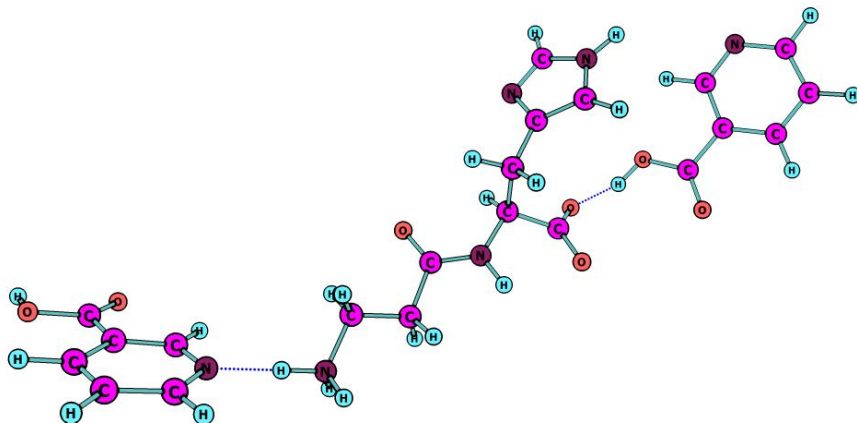


Рисунок. Структура комплекса карнозин-никотиновая кислота в жидкой фазе
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Грант №18-43-370018).