



**ОРГХИМ-2016**

# **ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**Кластер конференций по органической химии**

## **«ОргХим-2016»**

**Санкт-Петербург (пос. Репино),  
27 июня – 01 июля 2016 г.**

# ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

## Кластера конференций по органической химии

### «ОргХим-2016»

XIX Молодёжная конференция-школа по органической химии

\*

Конференция «Успехи химии гетероциклических соединений»

\*

Конференция «Медицинская и биоорганическая химия»

\*

VI Международный симпозиум по металлоорганической химии  
(под эгидой РФФ; проект 14-43-00017)

\*

1-я Всероссийская конференция с элементами научной школы  
«Компьютерное моделирование гетероциклических полимеров»

\*

Санкт-Петербург (пос. Репино)

27 июня – 1 июля 2016 г.

УДК 547  
ББК 24.2  
Т29

**Т29 Тезисы докладов Кластера конференций по органической химии «ОргХим-2016».**  
Санкт-Петербург (пос. Репино). 27 июля – 1 июля 2016 г. – СПб.: Изд-во ВВМ, 2016. – 912 с.

ISBN 978-5-9651-0983-8

Сборник содержит материалы пленарных, секционных, стендовых и заочных докладов, представленных на кластер конференций по органической химии «ОргХим-2016» (пос. Репино, Санкт-Петербург, 27 июня – 1 июля 2016 г.), включающий XIX Молодёжную конференцию-школу по органической химии, конференцию «Успехи химии гетероциклических соединений», конференцию «Медицинская и биоорганическая химия», VI Международный симпозиум по металлоорганической химии с элементами научной школы (под эгидой РНФ; проект 14-43-00017), 1-ю Всероссийскую конференцию с элементами научной школы «Компьютерное моделирование гетероциклических полимеров».

Тезисы докладов представлены в авторской редакции.

ISBN 978-5-9651-0983-8

© Авторы, 2016

## **Кластер конференций «ОргХим-2016» включает в себя следующие мероприятия:**

XIX Молодёжную конференцию-школу по органической химии

Конференцию «Успехи химии гетероциклических соединений»

Конференцию «Медицинская и биоорганическая химия»

VI Международный симпозиум по металлоорганической химии  
с элементами научной школы (под эгидой РФФ, проект 14-43-00017)

1-ю Всероссийскую конференцию с элементами научной школы  
«Компьютерное моделирование гетероциклических полимеров»

## **Организации соучредители кластера конференций «ОргХим-2016»**

Российская академия наук

Научный совет по органической химии РАН

Российский фонд фундаментальных исследований

Российский научный фонд

Санкт-Петербургское отделение Российского химического общества  
им. Д. И. Менделеева

Санкт-Петербургский государственный университет

Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)

Институт высокомолекулярных соединений РАН

Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН

Институт органической и физической химии им. А. Е. Арбузова КазНЦ РАН

Институт органического синтеза им. И. Я. Постовского УрОРАН

## **Программный комитет кластера «ОргХим-2016»**

акад. Егоров М. П. – сопредседатель	акад. Музафаров А. М.
акад. Синяшин О. Г. – сопредседатель	акад. Нефёдов О. М.
акад. Чарушин В. Н. – сопредседатель	акад. Новаков И. А.
акад. Абакумов Г. А.	акад. Пармон В. Н.
акад. Алдошин С. М.	акад. Сагдеев Р. З.
акад. Алфимов М. В.	акад. Сакович Г. В.
акад. Белецкая И. П.	акад. Тартаковский В. А.
акад. Бубнов Ю. Н.	акад. Трофимов Б. А.
акад. Ерёменко И. Л.	акад. Хаджиев С. Н.
акад. Зефиоров Н. С.	акад. Хохлов А. Р.
акад. Коновалов А. И.	акад. Цивадзе А. Ю.
акад. Лунин В. В.	акад. Чупахин О. Н.
акад. Минкин В. И.	акад. Юнусов М. С.
акад. Моисеев И. И.	

## **Местный оргкомитет кластера «ОргХим-2016»**

член-корр. Кукушкин В. Ю. – председатель	к.х.н. Рассадин В. А.
проф. Балова И. А. – зам. председателя	к.х.н. Смирнов А. С.
проф. Гарабаджиу А. В. – зам. председателя	к.х.н. Эрхитуева Е. Б.
проф. Люлин С. В. – зам. председателя	Андрусенко Е. В.
проф. Исламова Р. М. – учёный секретарь	Афанасенко А. М.
проф. Кузнецов М. А.	Баранова И. А.
проф. Островский В. А.	Боярская Д. В.
проф. Трифонов Р. Е.	Бурьянова В. К.
к.х.н. Елисеев И. И.	Добрынин М. В.
к.х.н. Кинжалов М. А.	Зимин Д. П.
к.х.н. Ларин С. В.	Михердов А. С.
к.х.н. Новиков А. С.	Янданова Е. С.
к.х.н. Попова Е. А.	

# ***XIX Молодёжная конференция-школа по органической химии***



## **Программный комитет**

акад. Егоров М. П. – сопредседатель  
акад. Синяшин О. Г. – сопредседатель  
акад. Чарушин В. Н. – сопредседатель  
акад. Абакумов Г. А.  
акад. Алдошин С. М.  
акад. Алфимов М. В.  
акад. Белецкая И. П.  
акад. Бубнов Ю. Н.  
акад. Ерёменко И. Л.  
акад. Зефиоров Н. С.  
акад. Коновалов А. И.  
акад. Лунин В. В.  
акад. Минкин В. И.  
акад. Моисеев И. И.

акад. Музафаров А. М.  
акад. Нефёдов О. М.  
акад. Новаков И. А.  
акад. Пармон В. Н.  
акад. Сагдеев Р. З.  
акад. Сакович Г. В.  
акад. Тартаковский В. А.  
акад. Трофимов Б. А.  
акад. Хаджиев С. Н.  
акад. Хохлов А. Р.  
акад. Цивадзе А. Ю.  
акад. Чупахин О. Н.  
акад. Юнусов М. С.

## ***Конференция «Успехи химии гетероциклических соединений»***

### **Оргкомитет**

проф. Кузнецов М. А. – сопредседатель  
проф. Островский В. А. – сопредседатель  
проф. Молчанов А. П. – зам. председателя  
к.х.н. Ростовский Н. В. – учёный секретарь  
проф. Новиков М. С.

проф. Хлебников А. Ф.  
к.х.н. Куляшова А. Е.

### **Программный комитет**

чл.-корр. Анаников В. П.  
проф. Берестовицкая В. М.  
чл.-корр. Громов С. П.  
проф. Гулевская А. В.  
чл.-корр. Джемилев У. М.  
член-корр. Койфман О. И.  
акад. Минкин В. И.

проф. Ненайденко В. Г.  
проф. Островский В. А.  
проф. Пожарский А. Ф.  
член-корр. Русинов В. Л.  
проф. Томилов Ю. В.  
акад. Чарушин В. Н.  
акад. Чупахин О. Н.

## ***Конференция «Медицинская и биоорганическая химия»***

### **Оргкомитет**

проф. Гарабаджиу А. В. – председатель  
проф. Трифонов Р. Е. – зам. председателя  
проф. Красавин М. Ю.  
проф. Островский В. А.

к.х.н. Харитонов С. В.  
к.х.н. Маметнабиев Т. Э.  
к.х.н. Попова Е. А.  
к.х.н. Эрхитуева Е. Б.

### **Программный комитет**

чл.-корр. Бачурин С. О.  
проф. Бредихин А. А.  
чл.-корр. Варфоломеев С. Д.  
чл.-корр. Габибов А. Г.  
акад. Зефиоров Н. С.  
член-корр. Кочетков С. Н.  
член-корр. Кучин А. В.

проф. Милаева Е. Р.  
чл.-корр. Нифантьев Н. Э.  
проф. Поройков В. В.  
чл.-корр. Русинов В. Л.  
акад. Чупахин О. Н.  
акад. Юнусов М. С.

Конференция организована при участии НТС «Трансляционная медицина»  
технологической платформы «Медицина будущего»

***VI Международный симпозиум по металлоорганической  
химии с элементами научной школы  
(под эгидой РНФ; проект 14-43-00017)***

**Оргкомитет**

чл.-корр. Кукушкин В. Ю. – председатель  
проф. Боярский В. П. – зам. председателя  
проф. Помбейру А. Ж. Л.

проф. Гэдаш да Сильва М. Ф.  
к.х.н. Новиков А. С.

**Программный комитет**

акад. Абакумов Г. А.  
акад. Алдошин С. М.  
чл.-корр. Анаников В. П.  
акад. Бубнов Ю. Н.  
акад. Белецкая И. П.  
чл.-корр. Бухтияров В. И.  
акад. Ерёменко И. Л.  
проф. Карасик А. А.  
член-корр. Койфман О. И.

акад. Минкин В. И.  
акад. Моисеев И. И.  
акад. Музафаров А. М.  
акад. Новоторцев В. М.  
чл.-корр. Федюшкин И. Л.  
чл.-корр. Овчаренко В. И.  
чл.-корр. Стороженко П. А.  
чл.-корр. Черкасов В. К.

***1-я Всероссийская конференция с элементами научной  
школы «Компьютерное моделирование гетероциклических  
полимеров»***

**Оргкомитет**

Люлин С. В., д.ф.-м.н., директор ИВС РАН – председатель  
Якиманский А. В., д.х.н., зам. директора по научной работе ИВС РАН  
Ларин С. В., к.ф.-м.н., ИВС РАН  
Амирова А. Р., к.ф.-м.н., ИВС РАН  
Фалькович С. Г., к.ф.-м. н., ИВС РА



# ВОДОРОДНАЯ СВЯЗЬ И ПЕРЕХОД ПРОТОНА В КОМПЛЕКСАХ ФОСФОРНОВАТИСТЫХ КИСЛОТ. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ $^{31}\text{P}$ ЯМР

Гиба И.С.<sup>1</sup>, Тупикина Е.Ю.<sup>1</sup>, Мазур А.С.<sup>1</sup>, Шендерович И.Г.<sup>2</sup>, Денисов Г.С.<sup>1</sup>, Толстой П.М.<sup>1</sup>

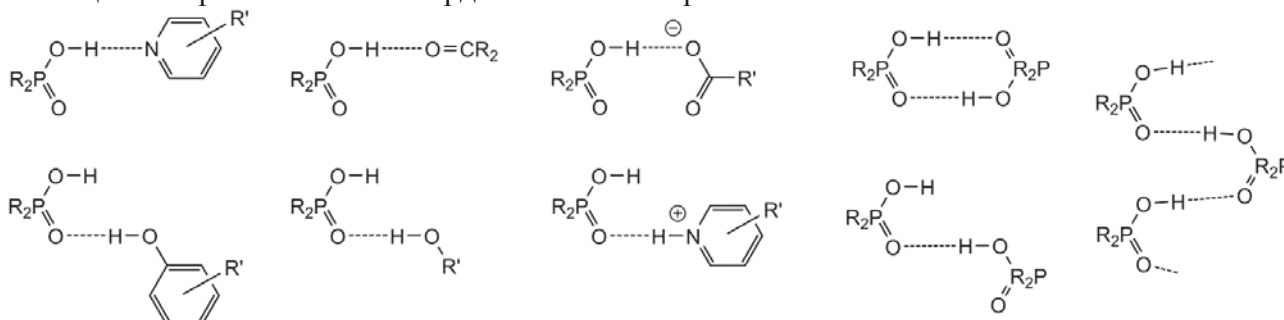
1 - Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

2 - Институт химии, университет Регенсбурга, Германия

*i.giba@spbu.ru*

Данная работа посвящена изучению межмолекулярных комплексов с водородной связью, образованных фосфорноватистыми кислотами  $\text{R}_2\text{POOH}$  с различными акцепторами протона В. Рассмотрены комплексы как молекулярного типа,  $\text{POOH}\cdots\text{В}$ , так и цвиттерионы  $\text{POO}(-)\cdots\text{НВ}(+)$ . Основной задачей работы было изучение влияния изменения геометрии водородного мостика на спектральные параметры  $^{31}\text{P}$  ЯМР, а именно на компоненты тензора анизотропии химического сдвига (CSA) атома фосфора. Также рассмотрены эффекты влияния мобильности заместителей R ( $\text{R} = \text{H}, \text{CH}_2\text{CH}_3, \text{C}_6\text{H}_5$ ) на спектральные параметры  $^{31}\text{P}$ . В литературе сведения об интерпретации химических сдвигов  $^{31}\text{P}$  в терминах геометрии межмолекулярных комплексов обрывочны [1, 2], несмотря на то, что накоплен достаточно обширный материал по влиянию заместителей на абсолютное значение изотропного химического сдвига  $^{31}\text{P}$  [3].

Структуры основных исследованных комплексов показаны на рисунке. Комплексы изучались при помощи квантово-химических расчетов по методу DFT, а также, в ряде случаев, при помощи экспериментальной твердотельной спектроскопии  $^{31}\text{P}$  ЯМР.



Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-03-00111.

1. К. Детеринг, П.М. Толстой, Н.С. Голубев, Г.С. Денисов, Х.-Х. Лимбах, Докл. Акад. Наук, **2001**, 379, 353.
2. Н.С. Голубев, Р.Е. Асфин, С.Н. Смирнов, П.М. Толстой, Журнал общей химии, **2006**, 76, 956.
3. L.D. Quin, A.J. Williams, Practical Interpretation of P-31 NMR Spectra and Computer-Assisted Structure Verification. Advanced Chemistry Development, Inc., **2004**.

## СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ САМОСБОРКА АМФИФИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНА

Гильманова Л.Х., Якимова Л.С., Стойков И.И.

Казанский (Приволжский) Федеральный Университет,

Химический институт им. А. М. Бутлерова

*lesyaucheba@gmail.com*

Исследование процессов молекулярной самосборки занимает важное место в области супрамолекулярной химии. В природе самосборка и самоорганизация являются ключевыми