



Том 5

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
в пяти томах**

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016



УДК 54+66
ББК 24+35

XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. В 5 т.

Т. 5 : тез. докл. — Екатеринбург: Уральское отделение Российской академии наук, 2016 г. — 272 с.

Т. 5. Химическое образование

International Symposium "From empirical to predictive chemistry"

International Symposium "Self-assembly and supramolecular organization"

Франция-Россия – 50 лет научно-технического сотрудничества в области химии и материалов

ISBN - 978-5-7691-2458-7

Том 5 содержит тезисы пленарных докладов съезда, ключевые, приглашенные, устные и стендовые доклады, сообщения заочных участников секции «Химическое образование», сателлитных симпозиумов International Symposium "From empirical to predictive chemistry", International Symposium "Self-assembly and supramolecular organization", Франция-Россия – 50 лет научно-технического сотрудничества в области химии и материалов, а также авторский указатель.

Тираж 250 шт.

© Оформление. Оргкомитет XX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии,
2016

УДК 54+66
ББК 24+35

XX Менделеевский съезд проводится под эгидой Международного союза по теоретической и прикладной химии (IUPAC)

ОРГАНИЗАТОРЫ СЪЕЗДА

**Российская академия наук
Уральское отделение Российской академии наук
Министерство образования и науки РФ
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина**

Федеральное агентство научных организаций

**Институт физической химии и электрохимии
им. Фрумкина РАН**

**Институт органического синтеза
им. И.Я. Постовского УрО РАН**

**Правительство Свердловской области
Российский фонд фундаментальных исследований
Российское химическое общество им. Д.И. Менделеева
Национальный комитет российских химиков
Российский союз химиков**

**Генеральный партнер –
Благотворительный фонд «Искусство, наука и спорт»**

СОДЕРЖАНИЕ

Пленарные доклады	7
Тезисы докладов секции 9	
Химическое образование.....	29
▪ Приглашенные доклады	31
▪ Устные доклады	35
▪ Стендовые доклады	57
▪ Заочные доклады	77
Сателлитные симпозиумы	97
International Symposium	
“From empirical to predictive chemistry”	99
▪ Ключевые доклады.....	101
▪ Устные доклады	105
▪ Стендовые доклады	131
▪ Заочные доклады	153
International Symposium	
“Self-assembly and supramolecular organization”	161
▪ Ключевые доклады.....	163
▪ Приглашенные доклады	169
▪ Устные доклады	175
▪ Стендовые доклады	189
▪ Заочные доклады	211
Тезисы докладов сателлитного симпозиума	
Франция-Россия – 50 лет научно-технического сотрудничества	
в области химии и материалов	223
▪ Ключевые доклады.....	225
▪ Приглашенные доклады	229
Тезисы докладов сателлитного симпозиума	241
Алфавитный указатель	247
Партнеры и спонсоры.....	253

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

GRAND CHALLENGES IN MASS SPECTROMETRY

Cooks R.G.

Department of Chemistry, Purdue University, West Lafayette, IN, USA

Three major challenges for molecular mass spectrometry are presented and it is argued that each of these is achievable on a five-year time scale. These objectives are:

1. Future mass spectrometers will see routine use in surgical diagnosis and clinical point-of-care applications. There is already considerable progress towards ambient ionization for tissue diagnostics using complex lipid profiles, especially in brain cancer [1]. Applications in clinical POC are emerging rapidly [2]. Both types of applications call for small, portable instruments [3].

2. Future mass spectrometers will operate at atmospheric pressure. Ambient ionization [4], ambient ion focusing [5], and ambient ion detection [6] are already established. The ability to make mass/charge measurements without vacuum is still to be realized.

3. Future mass spectrometers will find routine use in organic and nanomaterial synthesis. Preparative mass spectrometry is already used to modify surfaces through the method of ion soft landing [7]. More recently electrolytic spray from an inert solvent has been shown to be a method of creating nanomaterials [8] while the remarkable acceleration of chemical reactions in microdroplets [9] has been used to synthesize organic compounds on the mg scale.

References

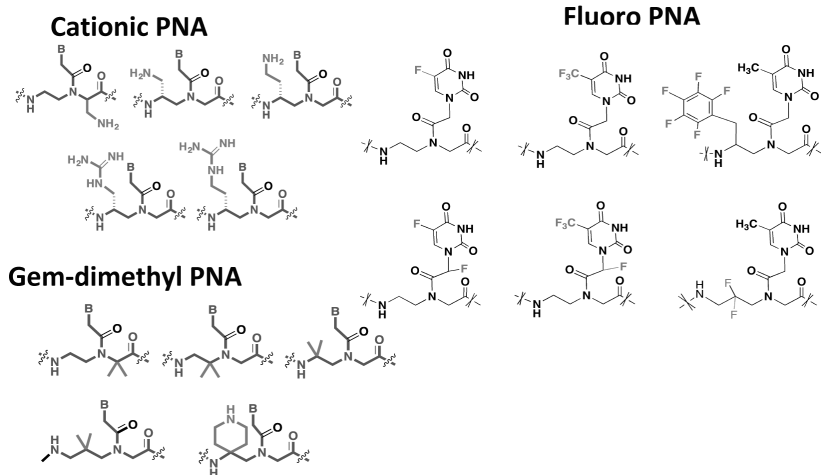
1. Jarmusch A.K., Pirro V., Baird Z., et al. PNAS, 113, 1486-1491 (2016)
2. Ferreira C.R., Yannel K.E., Jarmusch A.K., et al. Clin. Chem. 62 99-110 (2016)
3. Snyder D.T., Pulliam C.J., Ouyang Z., et al. Anal. Chem. 88 2-29 (2016)
4. Monge M.E., Harris G.A., Dwivedi P., Fernandez F.M. Chem. Rev. 113, 2269 – 2308 (2013)
5. Baird Z., Wei P., Cooks R.G., Analyst, 140 696-700 (2015)
6. Hadjar O., Wang P., Futrell J.H., Dessiaterik Y., Zhu Z., Cowin J.P., Iedema M.J., Laskin J. Anal. Chem., 79, 6566–6574 (2007)
7. Cyriac J., Pradeep T., Kang H., Chem. Rev. 112, 5356 – 5411 (2012)
8. Li A., Baird Z., Bag S., et al. Angew. Chem.Int. Ed. 53 12528-12531 (2014)
9. Li Y., Yan X., Cooks R.G. Angew.Chem. Int. Ed. 55 3433-3437 (2016)

NEW GENERATION PNA ANALOGUES FOR EFFECTIVE CELL PERMEATION

Ganesh K.N., Elipilli S., Kulkarni P.

Indian Institute of Science Education and Research, Dr. HomiBhabha Road,
Pune 411008, India, e-mail: kn.ganesh@iiserpune.ac.in

Peptide nucleic acids (PNA) are a class of DNA mimics, wherein the non-ionic ethylenediamine-glycine backbone replaces the anionic sugar-phosphate backbone. They bind complementary DNA or RNA with high affinity and selectivity and hence promised great potential as antisense therapeutic agents. However their poor aqueous solubility, cell penetration abilities and equal affinity for iso-sequential DNA / RNA (which decreases their target specificity by half) have restricted their applications. In order to overcome these drawbacks, we have designed, synthesized and evaluated several cationic, fluorinated and gem dimethyl substituted PNAs as new generation PNA analogues that have a good compromise of hydrophobic/hydrophilic balance for effective cell permeation. This lecture presents a comparative study of complementation with iso-sequential DNA / RNA and cell permeation abilities enhanced by their inherent abilities to form nanoparticles.



References

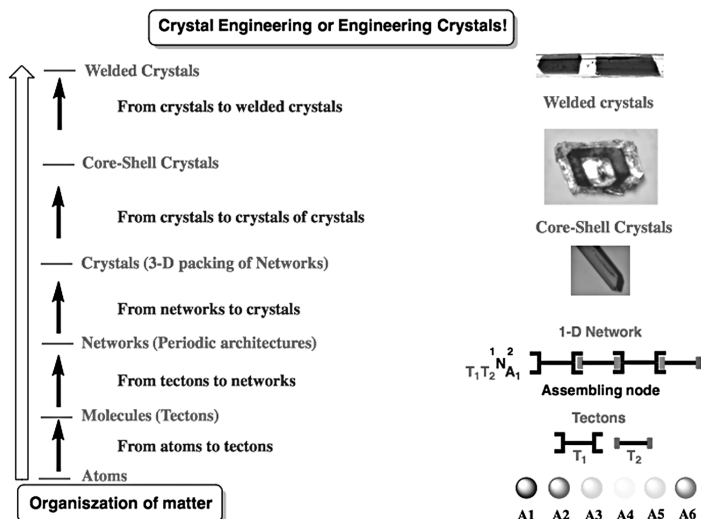
1. Jain, D.R. Jain; Ganesh, K.N. *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 6708–6714.
2. Jain, D.R.; Libi, A.V.; Lahiri, M.; Ganesh, K.N. *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 9567–9577.
3. Ellipilli, S.; Ganesh, K.N. *J. Org. Chem.* **2015**, 80, 9185–9191.
4. Ellipilli, S.; Murthy, R.S.; Ganesh, K.N. *ChemCommun*, **2016**, 52, 521–524.

MOLECULARTECTONICS: FROM MOLECULES TO CRYSTAL WELDING

Hosseini M.W.

*Laboratoire de Tectonique Moléculaire, UMR UDS-CNRS 7140, University of Strasbourg,
Institut Le Bel, 4, rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, France,
e-mail hosseini@unistra.fr*

The design and construction of periodic architectures in the crystalline phase are attracting considerable interest over the last two decades. For both design and analysis of molecular crystals, we have developed a strategy called molecular tectonics which is based on the formation of molecular networks through the design of complementary tectons or molecular construction units. The generation of molecular networks and subsequently of crystals is achieved by self-assembly processes based on repetitive molecular recognition events. This approach, combining supramolecular synthesis and self-assembly processes in the solid state, is operational and versatile and allows the design and construct a variety of complex purely organic or hybrid architectures. The approach will be presented and illustrated by a variety of tectons and networks.



References

1. Hosseini M.W. Acc. Chem. Res., 2005, 38, 313; Hosseini M.W. Chem. Commun., FocusArticle, 582 (2005); Hosseini M.W. CrytsEngComm., 2004, 6, 318.
2. Marinescu G., Ferlay S., Kyritsakas N., Hosseini M.W. Chem. Commun., 2013, 49, 11209; Adolf C., Ferlay S., Hosseini M.W. J. Amer. Chem. Soc., 2015, 137, 15390.
3. ElGarah M., Marets N., Bonacchi S., Mauro M., Ciesielski A., Bulach V., Hosseini M.W., Samori P. J. Amer. Chem. Soc. 2015, 137, 8450.

NOVEL ARYNE-INDUCED REACTIONS AND APPLICATIONS TO FUNCTIONAL COMPOUND SYNTHESSES

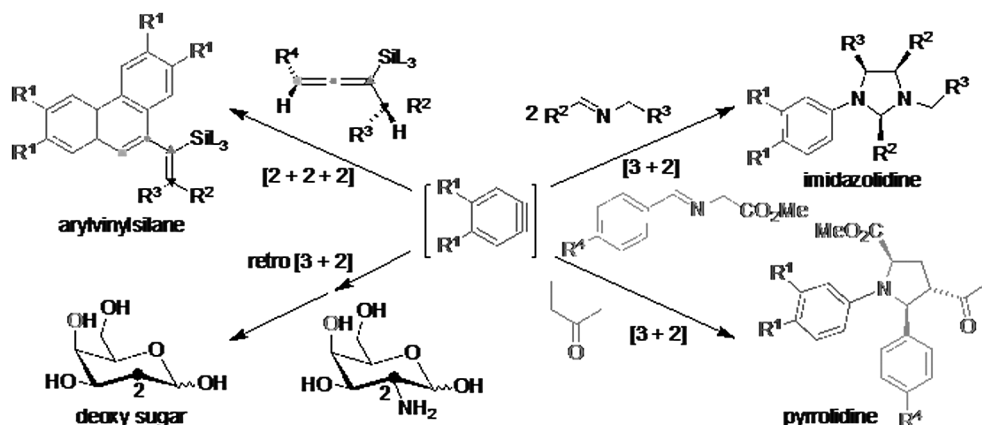
Hwu J.R., Swain S.P., Chang-Hsu Y., Shih Y.-C., Chandrasekhar D.B., Tsay S.-C.

Department of Chemistry, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan

E-mail: jrhwu@mx.nthu.edu.tw

An efficient method is developed for direct synthesis of various arenes bearing a vinylsilane moiety from two equivalents of benzyne and one equivalent of allenylsilanes. It proceeds through a novel [2 + 2 + 2] pathway, which is induced by benzyne. The success is attributed to the stabilizing capability of a silicon^{1,2} on a β vinyl carbocation by the

$\sigma_{\text{Si-C}} \rightarrow \rho_{\text{z empty}}$ hyperconjugation and, subsequently, on a β carboradical by the $\sigma \rightarrow \pi$ hyperconjugation. This reaction leads to the desired arenes in good-to-excellent yields with high regioselectivity under mild conditions.³



Our success in the development of a new “single-flask” method⁴ for the syntheses of imidazolidines and pyrrolidines with high stereoselectivity is also reported in this talk. It involves a tandem 1,2-addition of a Schiff base to an aryne, formation of an azomethine ylide, and a (3 + 2) cycloaddition to an alkene. The aryne method has been extended successfully as the key steps in new syntheses of deoxy-⁵ and iminosugars in an optically active form.

References

1. Hwu J.R., Shiao S.-S., Tsay S.-C. J. Am. Chem. Soc. 2000, 122, 5899.
2. Hwu J.R., Tsay S.-C., Lin L.C., Chueh L.L. J. Am. Chem. Soc. 2001, 123, 5104.
3. Hwu J.R., Swain S.P. Chem. Eur. J. 2013, 19, 6556.
4. Swain S.P., Shih Y.-C., Jacob J., Tsay S.-C., Lin C.-C., Hwang K.C., Horng J.-C., Hwu J.R. Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 2015, 54, 9926.
5. Chang-Hsu Y., Hwu J.R. Chem. Eur. J. 2012, 18, 7686.

A NEW VIEW ON MULTIVALENCY EFFECTS IN CARBOHYDRATE RECOGNITION

Lindhorst T.K.

Otto Diels Institute of Organic Chemistry, Christiana Albertina University of Kiel, Otto-Hahn-Platz 3-4, D-24118 Kiel, Germany, e-mail: tkind@oc.uni-kiel.de

Multivalency effects are essential in carbohydrate recognition processes and crucial in cell biology. Accordingly, multivalent glycoconjugates have evolved as useful tools for the investigation of glycobiology. We have expanded the collection of multivalent glycomimetics by photoswitchable glycoarrays,¹ photoswitchable cell surfaces,² and stereo-differentiated cluster glycosides and will show their effects in adhesion of bacterial cells (cf. Fig. 1).

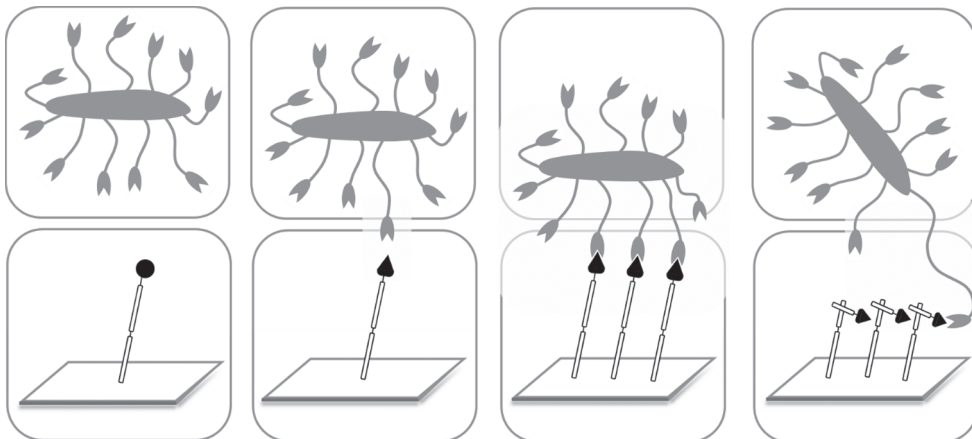


Figure 1. Carbohydrate-specific adhesion of bacterial cells to glycoarrays depends on the nature of the sugar and also on orientational effects.

References

1. Weber T., Chandrasekaran V., Stamer I., Thygesen M. B., Terfort A., Lindhorst T.K. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, 53, 14583-14586.
2. Möckl L., Müller A., Bräuchle C., Lindhorst T.K. *Chem. Commun.* 2016, 52, 1254-1257.

ORGANIC-BASED MAGNETS: NEW CHEMISTRY, PHYSICS, AND MATERIALS FOR THIS MILLENNIUM

Miller J.S.

*Department of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City, UT 84112-0850 USA, e-mail:
jsmiller@chem.utah.edu*

Molecule-based materials exhibiting the technologically important property of bulk magnetism have been prepared and studied in collaboration with many research groups worldwide frequently exhibit supramolecular extended 3-D structures. These magnets are prepared via conventional organic synthetic chemistry methodologies, but unlike classical inorganic-based magnets do not require high-temperature metallurgical processing. Furthermore, these magnets are frequently soluble in conventional solvents (*e. g.*, toluene, dichloromethane, acetonitrile, THF) and have saturation magnetizations more than twice that of iron metal on a mole basis, as well as in some cases coercive fields exceeding that of all commercial magnets (*e.g.*, Co₅Sm). Also several magnets with critical temperatures (T_c) exceeding room temperature have been prepared. In addition to an overview of magnetic behavior, numerous examples of structurally characterized magnets made from molecules will be presented. Our groups has discovered ten families of molecule-based magnets, mostly organic-based, and have significantly contributed to the family based upon the Prussian blue structure. Four examples magnetically order above room temperature and as high at 127 °C. These will include $[M^{III}(C_5Me_5)_2][A]$, $[Mn^{III}(\text{porphyrin})][A]$ (A = cyanocarbon etc. electron acceptors) as well as $M[TCNE]_x$, which for $M = V$ is a room temperature magnet that can be fabricated as a thin film magnet via Chemical Vapor Deposition (CVD) techniques. A newer class of magnets of $[Ru_2(O_2CR)_{4.3}][M(CN)_6]$ ($M = Cr, Fe$; $R = Me, t\text{-}Bu$) composition will also be discussed. For $R = Me$ an interpenetrating, cubic (3-D) lattice forms and the magnet exhibits anomalous hysteresis, saturation magnetization, out-of-phase, $\chi''(T)$, AC susceptibility, and zero field cooled-field cooled temperature-dependent magnetization data. This is in contrast to $R = t\text{-}Bu$, which forms a layered (2-D) lattice. Additionally, new magnets possessing the nominal Prussian blue composition, $M'[M(CN)_6]_x$ and $(\text{Cation})_yM'[M(CN)_6]$, but not their structure, will be described. New physics observed from examples of organic-based magnet will be discussed.

NEW ASPECTS OF STEREOCONTROLLED PROPYLENE POLYMERIZATION AND OLIGOMERIZATION

Nozaki K.

*Department of Chemistry and Biotechnology, The University of Tokyo,
Hongo 7-3-1 Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656, Japan,
e-mail:nozaki@chembio.t.u-tokyo.ac.jp*

Control over regio- and stereoregularity has been crucial in any type of propylene polymerization catalysts. In addition to the homopolymerization, the late transition metal catalyzed copolymerization of olefins with polar monomers has recently emerged as a powerful method for the synthesis of functional polyolefins. Despite the substantial progress in this area, most catalytic systems are still restricted to the copolymerization of ethylene and polar monomers, and examples of the copolymerization of propylene and polar monomers remain scarce.¹ Here we report moderately isospecific homopolymerization of propylene and the copolymerization of propylene and polar monomers has been achieved with palladium complexes bearing a phosphine-sulfonate ligand.²

Propylene polymerization was also successfully applied to natural product synthesis. Here we show the construction of the deoxypropionate structure from propylene in a single step to achieve a three-step synthesis of (2R,4R,6R,8R)-2,4,6,8-tetramethyldecanoic acid, a major acid component of a preen-gland wax of the graylag goose. Furthermore, multiple oligomers with different number of deoxypropionate units were isolated from one batch, showing application to the construction of library.³

References

1. Nakano R., Nozaki K. J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 10934-10937.
2. Ota Y., Ito S., Kobayashi M., Kitade S., Sakata K., Tayano T., Nozaki K. Angew. Chem., Int. Ed. 2016, in press.
3. Ota Y., Murayama T., Nozaki K. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2016, 113, 2857-2861.

QUASI-PERIODIC CRYSTALS – A PARADIGM SHIFT IN CRYSTALLOGRAPHY

Shechtman D.

Technion, Haifa, Israel and ISU, Ames, Iowa, USA

Crystallography has been one of the mature sciences. Over the years, the modern science of crystallography that started by experimenting with x-ray diffraction from crystals in 1912, has developed a major paradigm – that all crystals are ordered and periodic. Indeed, this was the basis for the definition of “crystal” in textbooks of crystallography and x-ray diffraction. Based upon a vast number of experimental data, constantly improving research tools, and deepening theoretical understanding of the structure of crystalline materials no revolution was anticipated in our understanding the atomic order of solids.

However, such revolution did happen with the discovery of the Icosahedral phase, the first quasi-periodic crystal (QC) in 1982, and its announcement in 1984 [1, 2]. QCs are ordered materials, but their atomic order is quasiperiodic rather than periodic, enabling formation of crystal symmetries, such as icosahedral symmetry, which cannot exist in periodic materials. The discovery created deep cracks in this paradigm, but the acceptance by the crystallographers' community of the new class of ordered crystals did not happen in one day. In fact it took almost a decade for QC order to be accepted by most crystallographers. The official stamp of approval came in a form of a new definition of “Crystal” by the International Union of Crystallographers. The paradigm that all crystals are periodic has thus been changed. It is clear now that although most crystals are ordered and periodic, a good number of them are ordered and quasi-periodic.

While believers and nonbelievers were debating, a large volume of experimental and theoretical studies was published, a result of a relentless effort of many groups around the world. Quasi-periodic materials have developed into an exciting interdisciplinary science.

This talk will outline the discovery of QCs and describe the important role of electron microscopy as an enabling discovery tool.

References

1. Shechtman D., Blech I., Met. Trans. 16A (June 1985) 1005-1012.
 2. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J.W., Phys. Rev. Letters, Vol 53, No. 20 (1984) 1951-1953.
- MO-PL03

THE ROLE OF NANOSTRUCTURED MATERIALS IN ENHANCING THE PHOTOPHYSICAL BEHAVIOUR OF PHTHALOCYANINES

Tebello Nyokong

Department of Chemistry, Rhodes University, Grahamstown, 6140, South Africa, e-mail: t.nyokong@ru.ac.za

Nanomaterials have attracted a great deal of interest since they display properties that are not present in the macroscopic materials. The surface of NPs may be modified with different functional groups including photosensitizers for different applications. The combination of phthalocyanines with nanomaterials such as carbon nanotubes, quantum dots, fullerenes, upconversion and metal nanoparticles has been shown to improve their photosensitizing behavior. Phthalocyanines (Pcs) are now well known as photosensitizers for photodynamic therapy (PDT) and photodynamic antimicrobial chemotherapy (PACT). Photophysical properties of interest for Pcs in the presence of nanomaterials include triplet state yields and lifetimes, singlet oxygen quantum yields and nonlinear optical behavior. The various methods for the conjugation of nanomaterials with MPcs, Fig. 1, such as adsorption, covalent bonding by click chemistry or amide bond formation, will be discussed.

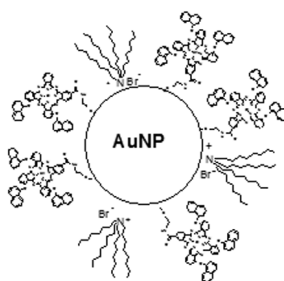


Figure 1. Attachment of phthalocyanines to gold nanoparticle (AuNP)

The conjugates formed are characterized by several methods including laser flash photolysis, time correlated single photon counting, steady state fluorescence, Raman, X-ray diffraction (XRD), X-ray photoelectron and UV/Vis spectroscopies. Microscopy techniques such as atomic force microscopy and scanning electron microscopy are also used in characterizing the conjugates.

CHEMINFORMATICS HAS IT HANDS IN ALL HUMAN AFFAIRS

Tropsha A.

*CB # 7568 Beard Hall, UNC Eshelman School of Pharmacy, UNC Chapel Hill, NC 27599, USA,
email: alex_tropsha@unc.edu*

The term “cheminformatics” was coined in 1998 by one of the eminent industrial computational chemists as a field that uses “computer and informational techniques applied to a range of problems in the field of chemistry”. However, the roots of cheminformatics could be traced all the way back to Dmitri Ivanovich Mendeleev who analyzed large amounts of chemical data and established and visualized patterns that were nonobvious. In the last two decades, cheminformatics has become one of the most commonly employed approaches to modeling physical and biological properties of chemicals along with two other fundamental computational approaches such as quantum mechanics and molecular mechanics. In this presentation, we will discuss: (i) the development and evolution of cheminformatics as applied to drug discovery; (ii) the current trends, unsolved problems, and pressing challenges; and (iii) several novel and emerging applications of cheminformatics. We will provide guidelines and best practices for development, validation, and application of cheminformatics models.¹ We will emphasize the importance of communications between computational and experimental chemists towards collaborative development and use of models. We will also address the issue of data accuracy and reproducibility that are particularly important for computational scientists such as bio- and cheminformaticians whose success inherently depends on the quality of experimental data used as inputs for their models. We will describe the enhanced chemical and biological data curation workflow² that can be utilized to improve the quality of data analysis and interpretation as well as boost the prediction performances of computational models. We will discuss emerging applications of cheminformatics methods and tools in the areas as diverse as materials³ and nanomaterials⁴ science, drug delivery⁵, chemical toxicology⁶, pharmacoepidemiology⁷ and education emphasizing the importance of (big) data integration and the experiment-guiding power of cheminformatics models.

References

1. Cherkasov et al., J Med Chem. 2014, 57:4977.
2. Fourches D, Muratov E, Tropsha A. Nat Chem Biol. 2015, 11:535.
3. Isayev et al., Chem. Mater., 2015, 27:735.
4. Fourches et al., Nanotoxicology, 2016,10(3):374-83
5. Cern et al., J Control Release. 2014, 173:125-31
6. Low et al., Curr. Top. Med. Chem., 2014, 14(11):1356
7. Low et al., J Am Med Inform Assoc. 2015 doi: 10.1093/jamia/ocv127.

INVESTIGATING THE CHEMISTRY OF THE OCEANS USING FLOW INJECTION ANALYSIS

Worsfold P.J.

*Biogeochemistry Research Centre, Plymouth University, Drake Circus, Plymouth PL48AA,
Devon, UK, e-mail: pworsfold@plymouth.ac.uk*

Trace metal micronutrients, e.g. iron and cobalt, are involved in regulating primary production in the marine environment and therefore play a key role in controlling global climate via their impact on the global carbon cycle. The availability of trace metal micronutrients regulates the growth, biomass and species composition of phytoplankton over large areas of the surface ocean and CO₂ drawdown has been observed in iron fertilisation studies. The marine biogeochemistry of these micronutrients therefore has great scientific, ecological and political significance.

Reliable determinations of dissolved trace metal micronutrients at sub-nM concentrations in marine waters are therefore needed to enhance our understanding of their impact on ocean productivity and processes such as ocean acidification. However, they are analytically challenging to measure due to their very low concentrations, the presence of labile and complexed forms of the elements and the potential for contamination. Hence methods need to be sufficiently validated to allow intercomparison between data sets from different spatial and temporal regimes.

This presentation overviews flow injection (FI) methods for the determination of iron, cobalt, zinc and aluminium in marine waters using inductively coupled plasma-mass spectrometry, chemiluminescence and fluorescence detection. The FI manifolds used incorporate an immobilised chelating ligand for on-line preconcentration and matrix removal. Results from the application of these methods to seawater samples, together with supporting hydrographic data, are used to elucidate important marine biogeochemical processes. The relative contributions of all sources of uncertainty associated with the measurement process are also discussed in the context of fit for purpose methodologies.

CHEMISTRY AT PEKING UNIVERSITY

Zhou Qi-F.

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, China, e-mail: qfzhou@pku.edu.cn

Chemistry research at Peking University was initiated with help of Russian Chemists in early nineteen fifties. Its development has been much promoted since the beginning of this century when China decided to invest more for education and research. In this talk some most recent achievements of chemistry research in the College of Chemistry and Molecular Engineering, including that of core chemistry, materials chemistry, chemistry in life sciences, as well as its application in the fields of energy, environment, and health, will be briefly introduced, together with a briefing of a profile of the university.

РАЗВИТИЕ ГАЗОВОГО КОМПЛЕКСА И ИННОВАЦИОННЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ И МАТЕРИАЛЫ

Аксютин О.Е.

ПАО «Газпром», ГСП-7, 117997, Москва, Наметкина, 16, e-mail: gazprom@gazprom.ru

В настоящее время ПАО «Газпром» - крупнейшая энергетическая компания мира с диверсифицированным бизнесом. Кроме основных направлений деятельности развивается электрогенерация и нефтегазохимия. ПАО «Газпром» сейчас не только крупный потребитель химической продукции, но и её производитель. В Группу Газпром входит один из крупнейших в России нефтехимических комплексов – ООО «Газпром нефтехим Салават». На заключительной стадии строительства находится Уренгойский газоперерабатывающий комплекс. Завершается проектирование крупнейшего на Востоке страны Амурского газоперерабатывающего комплекса.

Для повышения эффективности добычи газа и нефти, их транспорта, хранения, переработки требуются новые материалы, реагенты и инновационные технологии. Для расширения рынка использования природного газа необходимы рентабельные технологии получения новых продуктов химической промышленности. Несомненно, что ПАО «Газпром» не может обеспечить разработку таких технологий только своими институтами, поэтому разработана и реализуется отдельная программа работ с ведущими вузами страны и в ближайшее время будет утверждена программа работ с Российской академией наук.

Основные приоритеты компании изложены в новой Программе инновационного развития ПАО «Газпром», но это, конечно, не ограничивает круг возможных разработок и их использования в производственной деятельности.

Наша цель – максимальное использование потенциала российской химической науки и промышленности в целях повышения эффективности работы нашей компании и российской экономики в целом.

МОНОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ МАГНИТЫ: ИСТОРИЯ И СОВРЕМЕННЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ

Алдошин С.М.

*Институт проблем химической физики РАН,
142432, Черноголовка, проспект Семенова, 1, e-mail: sma@icp.ac.ru*

В докладе представлен краткий обзор истории мономолекулярного магнетизма, а также некоторых современных направлений в этой области.

Наряду с основным условием, при выполнении которого возможно появление у комплекса МММ свойств, - наличием отрицательной одноосной магнитной анизотропии, обсуждаются главные механизмы релаксации в системе, такие как спин-фононный механизм, низкотемпературное квантовое туннелирование намагниченности, а также смешанный механизм, включающий туннелирование в возбужденных состояниях кластера, стимулированное спин-фононными переходами. Обсуждаются такие экспериментальные проявления мономолекулярного магнетизма как магнитный гистерезис и частотные зависимости компонент динамической магнитной восприимчивости, а также дается краткий обзор возможных применений МММ для создания магнитных носителей информации беспрецедентно высокой плотности, молекулярных спиновых транзисторов и кубитов для квантовых компьютеров.

К сожалению, традиционная стратегия увеличения барьера, состоящая в увеличении числа ферромагнитно связанных ионов и, следовательно, полного спина кластера, оказалась малоэффективной (температуры блокировки в существующих МММ все еще слишком низкие, что препятствует их практическому применению). Поэтому наиболее перспективной стратегией представляется не создание больших спиновых кластеров, а синтез относительно небольших систем, содержащих сильно анизотропные парамагнитные ионы с непогашенными орбитальными моментами. Использование этой стратегии привело к созданию нескольких новых многочисленных классов МММ: 1) МММ на основе мооядерных и полиядерных комплексов $4f$ – ионов, 2) смешанные $4f$ – nd – системы, демонстрирующие МММ - свойства, 3) МММ на основе кластеров, содержащих орбитально-вырожденные nd – ионы, и 4) МММ на основе мооядерных комплексов сильно анизотропных nd – ионов. При обсуждении этих систем мы уделяем особое внимание анализу основных факторов, влияющих на их магнитную анизотропию. Обсуждаются также перспективы дальнейшего увеличения барьеров и температур блокировки в МММ.

ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ СОВРЕМЕННОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Алфимов М.В.,^а Разумов В.Ф.^б

^аЦентр фотохимии РАН, 119421, Москва, Новаторов, 7а, e-mail: alfimov@photonics.ru

^бИнститут проблем химической физики РАН,

142432, Черноголовка, проспект Семенова, 1, e-mail: razumov@icp.ac.ru

Энергетика играет определяющую роль в прогрессе цивилизации. На протяжении всей истории развития основным источником первичной энергии всегда была и остается химическая энергия. В 2015 году общее мировое потребление первичных энергоресурсов составило $5,85 \cdot 10^{21}$ Дж, из них 90,8% приходится на химическую энергию, извлеченную из нефти (30,3%), газа (21,6%), угля (29%) и биотоплив (10%). Ожидается, что к 2040 г. потребление первичной энергии возрастет на 35%, произойдет выравнивание долей всех видов топлива (нефть – 26%, газ – 24%, уголь – 26, другие неископаемые – 24%), при этом химическая энергия составит 86%¹. Учитывая, что запасы ископаемых источников ограничены, а стоимость их добычи возрастает, все большее значение уделяется возобновляемым источникам энергии (ВИЭ). Несмотря на громадные потенциальные мощности ВИЭ доля их использования незначительна, так как плотность энергии ВИЭ недостаточно высока, а получение более концентрированных потоков энергии требует больших затрат. В связи с этим наряду с освоением ВИЭ, главной задачей современной энергетики является поиск новых более эффективных технологий преобразования, аккумулирования и транспорта энергии. Энергия, извлекаемая из первичных источников, преобразуется и используется в виде механической, электрической, световой, химической или тепловой энергии, причем на пути до конечного потребления проходит сложную траекторию, включающую несколько стадий преобразования одного вида энергии в другой, и на каждой из них происходит определенная диссипация энергии в окружающую среду. В настоящее время даже в самых развитых странах эффективность использования первичной энергии не превышает 40%. Это связано с высокими требованиями к качеству потребляемой энергии.

В докладе представлен анализ ряда принципиальных физических ограничений эффективности перспективных технологий преобразования, аккумулирования и транспорта различных видов энергии, обсуждаются возможности новых технологий прямого преобразования первичной энергии в наиболее удобные для потребления виды энергии, при этом особое внимание уделяется химическим аспектам энергетики.

Литература

1. Прогноз развития энергетики мира и России до 2040 года. ИНЭИ РАН, АЦ при Правительстве РФ. http://www.eriras.ru/files/forecast_2040.pdf.

КАТАЛИЗ В ТОНКОМ ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ

Белецкая И.П.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва,
Ленинские Горы, 1/3, e-mail: beletska@org.chem.msu.ru*

В докладе на примере реакций образования связей С-С, С-Гетероатом (N, P, S, Se) будут рассмотрены современные аспекты различных видов катализа:

1. Нанокатализ с применением Pd и Cu в реакциях кросс-сочетания и карбонилирования;
2. Реакции каталитического присоединения S-H и P-H связей по тройным связям;
3. Асимметрический катализ с использованием хиральных кислот Льюиса и органокатализ;
4. Примеры активации связей С-Н и С-Р;
5. Синтез N-макроциклов, а также димерных и тримерных порфиринов с использованием Pd- и Cu-катализируемых реакций образования связей С-N.

СВЕРХТЯЖЕЛЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ТАБЛИЦЫ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Дмитриев С.Н., Оганесян Ю.Ц.

*Объединенный институт ядерных исследований, Лаборатория ядерных реакций
им. Г.Н. Флерова, 141980, Дубна, Жоллио-Кюри, 6, e-mail: dmitriev@jinr.ru*

Осуществлен синтез сверхтяжелых элементов (СТЭ) с атомными номерами 113-118 и тем самым завершен 7-ой период Периодической таблицы Д.И. Менделеева. Получены уникальные данные по ядерно-физическим свойствам изотопов новых элементов. Выполнены пионерские эксперименты по изучению химических свойств элементов 112(Cn), 113 и 114(Fl)¹. Открытие новой области (острова) стабильности СТЭ поставил целый ряд новых вопросов, связанных с фундаментальными свойствами ядерной материи: могут ли существовать еще более тяжелые ядра; является ли «Остров стабильности СТЭ» последним на карте нуклидов; где границы Периодической таблицы Д.И. Менделеева, насколько химические свойства СТЭ подобны их легким гомологам.

Дальнейшее развитие данных исследований возможно только при создании новой экспериментальной базы, обеспечивающей существенное повышение эффективности проводимых экспериментов. На решение этой сложнейшей задачи нацелен новый проект ЛЯР ОИЯИ – создание первой в мире Фабрики СТЭ², включающей: создание нового, мощного ускорителя стабильных и долгоживущих радиоактивных изотопов в области масс ионов $A = 10-100$ с интенсивностью до 10 рмА и энергией до 8 МэВ/нуклон; наработку новых мишенных материалов, создание новых сепараторов и разработку новых детектирующих модулей для исследования ядерных, атомных и химических свойств новых элементов.

Литература

1. Оганесян Ю.Ц., Дмитриев С.Н., Успехи химии, 2009, 78, 1077.
2. Oganessian Yu.Ts., Dmitriev S.N., Itkis M.G., Proceedings of International Symposium on Exotic Nuclei, World Scientific, Singapore, 2015, P. 483-490.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ,
проекты 13-03-12205-офи-м, 13-02-12052-офи-м.

РОЛЬ ХИМИИ В СОЗДАНИИ МАТЕРИАЛОВ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ ДЛЯ СЛОЖНЫХ ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Каблов Е.Н.

*Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов,
105005, Москва, Радио, 17, e-mail: chursoval@mail.ru, admin@viam.ru*

В основу создания материалов нового поколения для сложных технических систем положены четыре базовых принципа:

- фундаментальные и фундаментально-ориентированные исследования для создания опережающего научно-технического задела;
- «зеленые» технологии при создании материалов и комплексных систем защиты;
- реализация полного жизненного цикла материала с использованием информационных технологий (создание–эксплуатация в конструкции–диагностика, ремонт, продление ресурса–утилизация);
- неразрывность материала, технологии, конструкции и оборудования.

Одними из важнейших направлений развития материаловедения для сложных технических систем в настоящее время являются разработка и широкое применение полимерных композиционных материалов и изделий, созданных по аддитивным технологиям, как металлических, так и неметаллических. Это связано с повышением требований к эксплуатации современной техники и задачами развития высокотехнологичных отраслей.

Композиционные материалы являются одним из наиболее востребованных материальных ресурсов современного промышленного производства. В отличие от всех существующих, они разрабатываются с учетом принципиально иных служебных характеристик. В частности, приоритет в настоящее время отдается интеллектуальным материалам с уникальными функциональными свойствами.

Практика показала, что путем подбора состава и свойств компонентов композиционных материалов (матрицы и наполнителя, их соотношения, ориентации наполнителя) можно обеспечить получение практически любых изделий с заранее заданным сочетанием эксплуатационных и технологических свойств. В особо жестких условиях эксплуатации незаменимость композитов обеспечивается сочетанием таких важнейших характеристик, как высокая механическая прочность, теплостойкость, коррозионная стойкость, малая плотность. Различных вариантов и комбинаций исходных материалов и технологий их переработки в композиционные материалы и изделия существует бесконечное множество, ограниченное лишь уровнем развития науки и техники. Одним из главных преимуществ промышленного применения композитов является прежде всего обработка без отходов (литье, прессование, экструзия) с получением изделий любой формы, что существенно снижает производственные затраты.

Развитие производства полимерных композиционных материалов напрямую зависит от достижений химической отрасли. Разработка наполнителей (органических, неорганических и из возобновляемого природного сырья), соответствующих повышен-

ным требованиям, — задача весьма сложная, такая же, как и создание компонентов полимерных матриц (олигомеров, полимеров, каталитических систем), отвечающих не только техническим условиям, но и экологическим требованиям.

Создание в ВИАМ полимерных композиционных материалов нового поколения позволило разработать конструкцию мотогондолы, состоящей на 60% из композитов, благодаря чему повысится топливная эффективность воздушного судна, ресурс и межремонтные сроки эксплуатации.

Аддитивные технологии являются важным фактором совершенствования технологического процесса изготовления деталей для сложных технических систем. В настоящее время это одно из динамично развивающихся направлений, которое определяет условия перехода промышленности к технологиям будущего, способным принципиально изменить весь технологический уклад и производственный цикл. Целенаправленная работа ВИАМ в этой области уже принесла серьезные результаты: впервые в России по аддитивной технологии с применением отечественной металлопорошковой композиции изготовлен завихритель фронтального устройства камеры сгорания перспективного авиационного двигателя ПД-14, соответствующий всем требованиям конструкторской документации (данная работа выполнена в рамках совместного проекта с индустриальным партнером АО «Авиадвигатель»). Цикл изготовления таких завихрителей в среднем в 10 раз короче, чем с применением технологии литья по выплавляемым моделям. Изготовление 3D-деталей осуществляется с использованием технологии селективного лазерного сплавления (СЛС). По предварительно выстроенной CAD-модели производится послойное выращивание детали при выборочном сплавлении частиц порошка в соответствии с геометрией поперечных сечений детали. Толщина слоя при этом не превышает 60–80 мкм. Можно одновременно получить сразу несколько деталей, причем их количество и размер ограничены только габаритами рабочей камеры установки. Именно применение аддитивных технологий позволяет в полной мере реализовать основные принципы создания материалов нового поколения: материалы–технологии–конструкции, включая использование «зеленых» технологий при создании материалов и комплексных систем защиты, а также реализацию полного жизненного цикла с использованием IT-технологий.

ХИМИЧЕСКИЕ И БИОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОЛУЧЕНИЯ НОВЫХ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Мирошников А.И.

*Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН,
117997, Москва, Миклухо-Маклая, 16/10, e-mail: aiv@ibch.ru*

Амбициозная программа следующего десятилетия, предполагающая осуществление полного синтеза гена человека, естественно, может быть реализована только кооперацией химических и биотехнологических подходов. Создание молекулы в 3,5 миллиардов пар нуклеотидов будет осуществлено, если только будут найдены эффективные как химические, так и биотехнологические методы синтеза нуклеиновых кислот. Благодаря исследованиям по определению генома человека, а также достижениям в области протеомики стало очевидно, что методы генной инженерии позволяют получать не только отдельные белковые молекулы, но и целые системы, как, например, рецепторы биологически активных молекул, ионные каналы различного типа и т.д. Доступность такого рода биологических мишеней позволяет не только определить их пространственное строение, но и открывает возможность конструирования химическим путем новых фармацевтических препаратов. Совместное использование как химических, так и биотехнологических подходов было продемонстрировано на примере создания индустрии полусинтетических пенициллинов и цефалоспоринов, когда β -лактамный фрагмент, полученный ферментативным гидролизом природных антибиотиков достраивали с помощью химического синтеза. Можно привести еще ряд примеров получения более активных аналогов природных гормонов, проводя их химическую модификацию или же вводя остатки неприродных аминокислот. Что касается технологии создания пептидно-белковых препаратов, то в этом случае также широко используются совместные как химические, так и биотехнологические методы. Если для получения пептидов длиной до 60 аминокислотных остатков то более удобен химический синтез, то для белковых молекулы большего размера предпочтительно использование методов генной инженерии.

Основная часть доклада будет посвящена созданию биотехнологических систем синтеза нуклеозидов и нуклеотидов, как природного происхождения, так и модифицированных по гетероциклическим основаниям и по углеводным остаткам. На основании данных рентгеноструктурного анализа структур ферментов трансгликозилирования показаны остатки аминокислот активного центра, замена которых с помощью точечных мутаций приводит к изменению специфичности связывания с субстратами различной химической структуры.

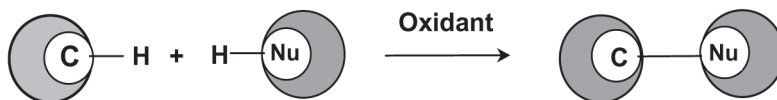
НУКЛЕОФИЛЬНАЯ С-Н ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ АРЕНОВ: НОВАЯ ЛОГИКА ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА

Чупахин О.Н.,^{а,б} Чарушин В.Н.^{а,б}

^аИнститут органического синтеза им. И.Я. Постовского УрО РАН,
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской, 22, e-mail: chupakhin@ios.uran.ru

^бУральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, Мира, 19

Электрофильная С-Н функционализация аренов обычно ассоциируется с использованием агрессивных реагентов (азотная и серные кислоты, галогены и т.п.), жестких условий и большим количеством отходов, в то время как устойчивое развитие требует применения новых химических методологий, основанных на принципах зеленой химии. Катализируемые металлами реакции кросс-сочетания значительно улучшили ситуацию, обеспечив химиков эффективным инструментом для модификации С-Х и С-Н связей, однако переходные металлы (прежде всего, палладий) дороги, токсичны и недопустимы при создании лекарств, элементов органической электроники и других высокотехнологичных материалов. Прямые С-Н/С-Н сочетания аренов с нуклеофилами открывают новую главу в органической химии¹. Всестороннее исследование реакций нуклеофильного замещения водорода в аренах (S_N^H реакции), включая их механизмы, интермедиаты, математическое и электрохимическое моделирование, кинетику реакций, перенос электрона и другие элементарные акты, показало, что формально замещаемый в этих реакциях гидрид-ион отщепляется в виде протона, причем этому процессу способствует окислитель или вспомогательная группа^{1,2}.



Реакции S_N^H меняют логику органического синтеза. Они открывают новые возможности, позволяющие избежать предварительного введения в ароматическое кольцо атомов галогена и других функциональных групп, что соответствует принципам зеленой химии^{1,2}.

Литература

1. Charushin V.N., Chupakhin O.N. (Eds). Metal Free C-H Functionalization of Aromatics. Nucleophilic Displacement of Hydrogen. In: *Topics in Heterocyclic Chemistry*, 2014, **37**. Series Editors: B.U.W. Maes, J. Cossy, S. Poland. Basel: Springer, 2014 - 283 pp.
2. Chupakhin O.N., Charushin V.N. *Tetrahedron Letters*, 2016, **57**, 2665.



СЕКЦИЯ 9

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
В ПЯТИ ТОМАХ**

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016



ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

СЕТЕВЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПРОГРАММЫ КАК НОВАЯ ФОРМА СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ ПОДГОТОВКИ СПЕЦИАЛИСТОВ

Боголицын К.Г.

*Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова, 163002,
Архангельск, набережная Северной Двины, 17, e-mail; k.bogolitsyn@narfu.ru*

Сетевая форма реализации образовательных программ обеспечивает возможность освоения обучающимися образовательных программ (ОП) с использованием ресурсов нескольких организаций, осуществляющих образовательную деятельность, в том числе иностранных, а так же при необходимости с использованием ресурсов иных организаций (Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации» № 273-ФЗ). Эффект проявляется в совершенствовании учебных курсов путём использования опыта и наработок партнёров (образовательные организации), внедрения НИР в образовательные программы (научно-исследовательские организации), усиления практико-ориентированности образовательных программ (предприятия и организации). В рамках взаимодействия Федеральных университетов разработаны модели реализации сетевых образовательных программ.

Модель «горизонтальное взаимодействие» направлена на удовлетворение потребностей вузов-участников сети посредством ресурсного обмена с целью повышения качества реализации образовательной программы. Модель «партнёрская сеть» предусматривает осуществление обучения по базовым модулям вузами-партнёрами самостоятельно, формирование индивидуальной траектории обучения путём выбора вариативных модулей вузов-участников сети. Модель «ресурсный центр» предусматривает интеграцию вузов-участников сети на базе одного, обладающего наибольшим материальным и кадровым потенциалом и осуществляющим обучение по вариативным модулям.

Успешными примерами сетевого сотрудничества являются проекты: разработка и реализация сетевых образовательных программ Федеральных университетов; открытый университет; сетевая электронная библиотека; сетевое взаимодействие в науке; развитие студенческого самоуправления.

Значимым элементом сетевого взаимодействия САФУ является деятельность межуниверситетской Кафедры теоретической и прикладной химии Северного (Арктического) федерального университета им. М.В. Ломоносова и Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова образованной в 2001 году.

ЗАПАДНЫЙ ОПЫТ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ В ШКОЛЕ: ОБЗОР

Жилин Д.М.

*Политехнический музей, 101000, Москва, Новая площадь, 3/4,
e-mail: zhila2000@mail.ru*

За рубежом, как и в России, выдвигается множество идей относительно обучения химии. Какие-то из них оказываются многообещающими, какие-то – применимыми ограничено, какие-то – несостоятельными. Большая часть идей голословны – требования «доказательной педагогики» выдвигаются довольно ограниченным кругом исследователей и практиков. При этом внедрение идей в практику в большей степени зависит от моды и пробивной силы тех, кто эти идеи продвигает, чем от их реальной обоснованности.

Таким образом, зарубежная методическая мысль сталкивается с теми же проблемами, что и российская. Однако из-за языкового барьера содержательно они практически не связаны (равно как и любые другие пары разноязычных школ). До российской аудитории зарубежные идеи доходят с большим запозданием, в усеченном и искаженном виде. Цель предлагаемого доклада -- дать обзор современных идей в области школьного химического образования по материалам различных конференций и периодики начиная с 2012 года.

В настоящий момент в химическом образовании царит мода на конструктивизм («знания формируются в голове у учащегося»). В химии он выражается в «исследовательском обучении» («inquiry based learning»): школьники формируют те или иные представления в результате собственной исследовательской деятельности. Чаще всего она базируется на эксперименте, но может представлять собой и работу с литературными источниками. Существует множество характеристик исследовательского обучения (сопровождаемое – открытое, индивидуальное – групповое и т.д.). Достоинства и недостатки каждого будут подробно обсуждены.

Фокус обучения смещается с формирования химических знаний на формирование «навыков 21го века». Мы подробно разберём подводные камни этого процесса а здесь отметим только, что системы оценивания таких навыков до сих пор не разработана.

Вне мейнстрима интересны идеи (а) использования достижений когнитивной психологии; (б) порядка формирования разных аспектов представлений о веществе («Треугольник Джонстона»); (в) формирования и снятия заблуждений и другие.

Нужно заметить, что взятый на Западе компетентностный подход показал там свою несостоятельность, поскольку термин «компетенция» так и не смогли определить.

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ И НУЖДЫ ЧЕЛОВЕЧЕСТВА

Тарасова Н.П.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская пл., 9, e-mail: tarasnp@muctr.ru*

Устойчивое развитие подразумевает способность планеты Земля обеспечить продолжительную, здоровую, творческую, справедливую жизнь для всех людей на планете, людей ныне живущих и следующих поколений при сохранении здоровья и целостности экосистем и возможности для других биологических видов существовать в их естественной среде обитания. При этом центральным понятием концепции является развитие, удовлетворяющее нужды нынешнего поколения, но не лишаящее будущие поколения возможности удовлетворять их нужды. Устойчивое развитие представляет вызов для современной науки и технологии. Химия здесь занимает особую позицию, позволяя решать широкий круг задач - от изучения молекулярных основ жизни и факторов устойчивости окружающей природной среды до создания новых продуктов и источников энергии, способных обеспечить устойчивое будущее.

Определение допустимой химической нагрузки на окружающую среду (включая здоровье человека) является важной стратегической задачей как в глобальном, так и в локальном масштабах и необходимым условием устойчивого развития страны и ее перехода к зеленой экономике, в том числе к зеленой химии, особенно с учетом сформированной сегодня стратегической направленности на развитие химической промышленности, высокотехнологичной химии и получение инновационных химических веществ. Образовательные программы всех уровней призваны ответить на эти вызовы.

В докладе будет дан анализ адаптации содержания химического образования к Целям устойчивого развития, принятым Генеральной ассамблеей ООН в сентябре 2015 года¹.

Литература

1. <http://sd.iisd.org/policy-updates/what-happens-next-follow-up-to-the-ffd3-and-post-2015-negotiations/>

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проектная часть государственного задания № 5.2598.2014/К).

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

ОЛИМПИАДЫ КАК ЭЛЕМЕНТ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Аксенова И.В., Маликова И.В., Демидова Н.В., Самсонова О.Е.

*Северо-Кавказский федеральный университет, 355009, Ставрополь, Пушкина, 1,
e-mail: inna-aksenova00@rambler.ru*

Кафедра химии «Северо-Кавказского федерального университета» имеет достаточно большой опыт организации и проведения олимпиад разного уровня. Преподаватели кафедры разрабатывают задания для проведения муниципального этапа Всероссийской олимпиады школьников. На базе кафедры проводится региональный этап этой олимпиады.

Итоги последних четырех лет, когда ни один из участников не прошел на заключительный этап, показали острую необходимость пересмотра системы взаимодействия с образовательными учреждениями в отношении подготовки школьников. Вместе с тем, невозможно рассматривать эту проблему в отрыве от химического школьного образования вообще. Кафедрой реализуются различные элективные курсы для школьников, много лет ведется совместная работа с Малой академией наук Дворца детского творчества г. Ставрополя. Основное направление – углубленное изучение как отдельных тем, так и дисциплины в целом. Проблемой, особенно при работе со школьниками 7-8 классов, является недостаточная подготовка по математике и физике. Реализуемый в школе «циклический подход» (всего по чуть-чуть, несколько раз, в разных классах) создает проблемы при формировании целостной картины. Большинство школьников, обучающихся на таких курсах, принимают участие в олимпиадах по химии. Углубленные знания необходимо сочетать с формированием творческого подхода к решению задач. Зачастую школьники боятся отойти от заученных шаблонов, даже при наличии хорошей теоретической базы. Участие в олимпиадном движении позволяет выявлять ребят не только с хорошими знаниями, но и с творческим подходом. Последний необходимо развивать при подготовке школьников на разных уровнях.

Одним из достижений кафедры химии СКФУ является то, что Многопредметная олимпиада «45 параллель» по химии в 2015 г. вошла в перечень олимпиад РСОШ, что позволит привлечь больше школьников к олимпиадному движению.

Хочется отметить такой аспект олимпиад как практический тур. Несмотря на определенные сложности при его организации и проведении, эта часть является важнейшим элементом, вызывающим интерес к химической науке. Опыт показывает, что некоторые школьники самостоятельно работают с химическими реактивами и посудой впервые именно на практическом туре олимпиады.

ИСХОДНЫЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ УЧЕБНИКА ХИМИИ ДЛЯ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УЧРЕЖДЕНИЙ

Астафуров В.И., Маренный А.М.

*Научно-технический центр радиационно-химической безопасности и гигиены
ФМБА России, 123182, Москва, Щукинская, 40, e-mail: vastafurov@mail.ru*

Введение в программу общеобразовательных учреждений учебного предмета «Естествознание» подразумевает создание учебника принципиально нового типа, включающего одновременное изложение основ физики, химии, биологии, экологии. С точки зрения реальной практики, решение этой нетривиальной задачи представляется возможным лишь для начального этапа изучения предмета. В дальнейшем необходимы отдельные учебники по каждой научной области знания, включенной в предмет «Естествознание». Это обусловлено различием исходных понятий, внутренней логики и содержания, присущих этим областям знания.

При построении учебника химии, независимо от того, будет ли он основным, элективным или частным разделом курса «Естествознание», необходимо руководствоваться следующим:

- химия, как и физика, и биология, имеет в основаниях общие для естествознания законы сохранения;
- специфическим для химии является периодический закон, определяющий принципы построения периодической системы химических элементов. Специфика периодического закона условна, этот закон является одним из следствий волновой природы материального движения;
- основным содержанием учебного предмета «Химия» является изучение свойств химических элементов, закономерностей протекания химических реакций, строения молекул веществ. Именно эта специфическая тематика отличает химию от других областей знания;
- большое число химических элементов, разнообразие их свойств и еще большее число и разнообразие веществ и химических реакций обуславливает, даже при использовании современной вычислительной техники, невозможность теоретического решения большинства химических задач. Химия является, прежде всего, экспериментальной наукой;
- обилие окружающих человека и используемых им веществ приводит к необходимости включения в школьный курс химии большой доли сведений, связанных с практикой человека и обеспечивающих их реальное использование в последующей деятельности учащегося, вне зависимости от его профессиональной траектории.

ПРЕПОДАВАНИЕ ИСТОРИИ ХИМИИ – ИНСТРУМЕНТ ПАТРИОТИЧЕСКОГО ВОСПИТАНИЯ

Богатова Т.В.,^а Самойлов А.М.^б

^аМосковский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1/3

^бВоронежский государственный университет,
394006, Воронеж, Университетская пл., 1, e-mail: samoylov@chem.vsu.ru

В условиях складывающейся в настоящее время геополитической ситуации для всей системы образования Российской Федерации при решении триединой задачи (обучение, развитие и воспитание личности) возникает закономерная необходимость смещения акцентов в сторону усиления воспитательной функции. С этой точки зрения преподавание истории химии является эффективным инструментом *воспитания* у выпускников классических университетов и других вузов, обучающихся студентов по направлению "Химические науки", *активной патриотической позиции*, гордости за свою великую Родину, желания трудиться на благо России.

Преподавание истории химии, которую крайне желательно сделать *обязательным предметом*, входящим в базовую часть следующих редакций ФГОС, не должно останавливаться лишь на адекватной оценке вклада отечественных ученых в развитие мировой химической науки. Анализируя биографии выдающихся русских химиков, необходимо подчеркивать, что глубокая любовь к Родине освящала их беззаветное служение науке. Именно поэтому их творческое наследие включает труды, направленные на развитие и процветание Отечества. Ярчайшим примером является жизнь М.В. Ломоносова. В лекциях по истории химии следует акцентировать, что великий ученый ратовал за использование химии в различных сферах человеческой деятельности¹, пламенно боролся за право русского народа на образование². При изучении истории открытия Периодического закона Д.И. Менделеева крайне важно аргументировать необоснованность попыток некоторых западных ученых преуменьшить заслуги великого русского ученого³. Необходимо упоминать о многогранной инновационной деятельности Д.И. Менделеева для развития отечественной химической, нефтедобывающей и оборонной промышленности. Особого внимания заслуживают последние труды великого ученого, в которых он предлагал свое видение будущего нашей страны³.

Литература

1. Ломоносов М.В. Полн. собр. соч. М., Л. : Изд-во АН СССР, 1951. Т. 2, С. 344-369.
2. Миттова И.Я., Самойлов А.М. История химии с древнейших времен до конца XX века: в 2-х тт. – Долгопрудный: ИД «Интеллект», Т. 1, 2008. – 416 с., Т. 2, 2012. – 624 с.
3. Менделеев Д.И. К познанию России. М.: Айрис-Пресс, 2002. – 576 с.

О СОСТОЯНИИ ХИМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА В ШКОЛЕ

Васильева П.Д.,^а Багрова Н.В.^б

^аКалмыцкий государственный университет им. Б.Б. Городовикова,
385000, Элиста, Пушкина, 11, e-mail: vasilyeva_pd@mail.ru

^бСредняя школа № 14 «Зеленый шум», 404110, Волжский, Космонавтов, 19,
e-mail: natalya-bagrova@mail.ru

Анализ состояния обучения химии в школе показывает неуклонное снижение доли химического эксперимента учебных программах, сведение различных его видов к демонстрационному эксперименту. Об этом свидетельствуют низкий уровень экспериментальных умений первокурсников по химии, результаты выполнения заданий ЕГЭ выпускниками по химии, требующие умения работать с веществами. Так, самые низкие результаты выпускники 2-х регионов – республики Калмыкии и Волгоградской области (всего 1662 участника) показали по заданию В-32 за прошедший учебный год. По РФ средний балл по этому виду задания составил 33,9% (2).

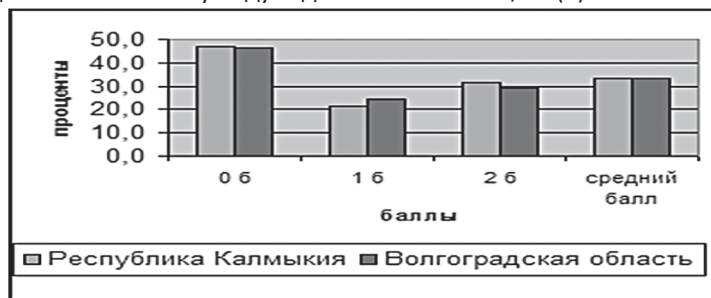


Рис.1. Результаты анализа выполнения задания ЕГЭ по качественным реакциям выпускниками 2015 года.

Усилению роли химического эксперимента могут способствовать: выявление готовности школы к экспериментально-исследовательской работе школьников, внедрение школьных творческих мастерских (1), усиление полифункциональности школьного химического эксперимента.

Литература

1. Багрова Н.В., Васильева П.Д. Школьные творческие мастерские Школьные творческие мастерские в обучении химии // Фундаментальные и прикладные проблемы получения новых материалов: исследования, инновации и технологии. Материалы IX международной научно-практической конференции. – Астрахань, 2015 с. 204-208.
2. Каверина А.А., Снастина М.Г. Методические рекомендации для учителей, подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ в 2015 году. ФИПИ, 2016.zip/metod-rek_himiya_2016-2.pdf

МОНИТОРИНГ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ СТУДЕНТОВ ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА НА ОСНОВЕ КОНТРОЛЬНЫХ КАРТ ШУХАРТА

Горбунова Л.Г.

*Государственный университет морского и речного флота им. адмирала С.О.
Макарова», Котласский филиал, 165311,
Котлас, Володарского, 115, e-mail: gorbunov_a@mail.ru*

Результаты обучения студентов выступают одним из показателей качества профессионального образования, инструментом контроля которых служат контрольные карты Шухарта¹(ККШ), «ценность ККШ состоит в том, что базируясь на статистических показателях и методах, их применение не связано с рядом ограничений теории вероятности и математической статистики»².

Контрольные точки тематического тестирования были выбраны нами в соответствии с рабочей программой по дисциплине «химия»³, реализуемой в Котласском филиале ФБГОУ ВО «ГУМРФ им. адмирала С.О. Макарова». Качество составленных нами тестовых материалов предварительно оценивали путем подсчета коэффициентов корреляции между заданиями теста (фи-коэффициенты для дихотомических шкал), добиваясь их высоких положительных значений. Обработку результатов тестирования вели по стандартной методке². Для построения ККШ подсчитывали ошибки студентов при тестировании, причем в случае неправильного ответа на задание студенту засчитывалось две ошибки, в случае, если он пускал задание – только одна. Для расчета центральной линии и ее контрольных границ (UCL и LCL) использовали формулы биномиального распределения⁴. Построение ККШ вели в координатах «число ошибок – студент»¹ по семи последовательно изучаемым темам учебного курса. Анализ и сопоставление трендов позволило выявить критические точки для отдельных студентов и проследить динамику измерения их результатов по химии в ходе изучения предмета, а также выработать перечень учебных мероприятий, направленных на улучшение качества учебного процесса.

Литература

1. Жичкин А.М. *Высшее образование сегодня*, 2014, **1**, 19.
2. Звонников В.И., Чельшкова М.Б. Оценка качества обучения при аттестации (компетентностный подход). – М.: Логос, 2012. – 280с.
3. Горбунова Л.Г. *60-я Всерос. научно-практическая конференция по актуальным вопросам химического и экологического образования*, 2013, Санкт-Петербург, 226.
4. ГОСТ Р 50779.42-99. Статистические методы. Контрольные карты Шухарта.

МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Искакова М.М., Салахутдинов Р.Р., Талипов Р.Ф.

*Башкирский государственный университет,
450076, Уфа, Заки Валиди, 32, e-mail: iskakovam@mail.ru*

В середине прошлого столетия Вудворд Р.Б. с коллегами открыли новую эру в органическом синтезе и показали, что любые устойчивые органические соединения можно синтезировать. При этом выбор оптимального пути синтеза соединения заданной структурой остается сложной задачей и носит комплексный характер. В то же время отсутствие методов количественной оценки эффективности химических превращений не позволяет проводить количественное сравнение предлагаемых вариантов синтеза и использовать вычислительные методы. Поэтому нами разработан программный продукт учитывающий изменение структурной сложности соединений, условий и результатов проведения реакций^{1,2}. Тестовый вариант программы доступен по адресу <http://chemrcc.xyz>. Предлагаемый метод оценки эффективности химических превращений может быть использован при изучении основного курса «Органическая химия» и спецкурсов «Тонкий органический синтез», «Химия лекарственных препаратов» и др. В связи с этим нами подготовлено учебное пособие «Количественная оценка эффективности органических реакций». В нем кроме описания и методов количественной оценки эффективности химических превращений приводятся задачи с возрастающей сложностью. Первоначально предлагаются задачи по оценке структурной сложности соединений. Затем задачи по оценке эффективности одно- и многостадийных превращений. В дальнейшем предлагаются задачи оценки по эффективности синтезов одного и того же соединения различными методами и их ранжирование. Наиболее сложный тип задания включает синтез соединения с заданной эффективностью.

Данное учебное пособие может быть полезно как студентам, так и химикам занимающимся направленным органическим синтезом при планировании и/или оценке эффективности химических синтезов.

Литература

1. Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Ишмуратов Г.Ю. Об оценке сложности химических превращений // Вестник Башкирского университета. 2013. Т. 18. №3. С. 679-681.
2. Расулов А.З., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Ишмуратов Г.Ю. Калькулятор сложности химических реакций / Свидетельство о гос. регистрации программ для ЭВМ № 2014618352 от 15.08.2014.

ЧТО ТАКОЕ ХОРОШЕЕ ОБРАЗОВАНИЕ?

Карцова Л.А.

*Санкт-Петербургский государственный университет, Институт химии, 198504,
Санкт-Петербург, Университетский проспект, 26, e-mail: kartsova@gmail.com*

С исчезновением устных экзаменов, исчезает в процессе обучения за неимением времени (надо готовиться к ЕГЭ!) и вроде бы за ненадобностью активный диалог (ученик — учитель; ученик — ученик). Культ единообразия сдерживает развитие одаренных, а, значит, и возможность реализации творческой активности учащихся, инициирование интереса к будущей профессии. А ведь учебный процесс — это не просто передача информации от учебника к ученику, а, по большому счету (по Гамбургскому!), взаимодействие личностей, где все участники учатся.

Необходима взаимосвязанность и логическая обоснованность различных образовательных форм и основных принципов: выявление общего и повторяющегося в явлениях как ступень на пути к познанию закономерностей и законов; систематизация вновь обнаруженных фактов и определение их места в иерархической системе уже имеющихся знаний; адекватность получаемых знаний современной системе изучаемой науки; осторожное разрушение стереотипов. И таким требованиям должна отвечать любая школа, а не только профильная!

Стремление «насытить» учащихся как можно большим количеством информации, не успевая ранжировать и осмыслить ее - тупиковая ветка. Доступность изложения требует не только большой работы над формой, но и углубленного знания предмета. «...Для объяснения предмета его приходится сводить к самым простым, но и самым существенным аспектам...Мы вынуждены переосмысливать все основные положения...» (Ганс Селье).

Пикассо однажды спросили: «Важнее ЧТО или КАК?» Он ответил: «КТО». Ключевой фигурой в образовательном процессе по-прежнему остается учитель, научный руководитель. Включение школьников в исследовательскую работу позволяет напрямую познакомиться с профессией химика-исследователя. Сам по себе приобретенный навык не вызывает никакой тенденции к продолжению деятельности. Смысловая нагрузка словосочетания «*ситуация успеха*» - условия индивидуального развития. В процессе выполнения исследовательской работы можно реализовать то, что не всегда осуществимо на обычном уроке: формирование значимых мотивов обучения. Талант гибнет без востребованности: ему нужны поклонники! Для многих выпускников университетской школы такой подход оказался решающим в выборе будущей профессии: первая научная дискуссия, обсуждение собственных экспериментальных данных на равных с научным руководителем, возможность выступить в аудитории единомышленников и быть услышанным.

ОБЪЕКТ И ПРЕДМЕТ МЕТАЛЛУРГИИ: ИСТОРИКО-ФИЛОСОФСКИЙ ОБЗОР

Ключников А.М.,^а Токмянина С.В.^б

^аИнститут металлургии УрО РАН,
620016, Екатеринбург, Амундсена, 101, e-mail: amk8@mail.ru

^бИнститут философии и права УрО РАН,
620990, Екатеринбург, С. Ковалевской, 16, e-mail: tsv77@mail.ru

На примере исследования эволюции содержания понятий «объект» и «предмет» металлургии рассмотрены мировоззренческая, методологическая, инструментальная функции философских категорий в познавательном процессе.

В натурфилософский период объектом философского и научного исследования выступает природа во всём многообразии и целостности, в античный период трактуемая как разумный и живой Космос, в средневековье - как сотворённый Богом мир, в эпоху Возрождения - как «природа вообще, вне текстов и словесных откровений»¹. Предметом металлургии в античную эпоху выступают теоретические закономерности превращений веществ, фиксируемые с целью познания управляющего природой универсального закона, в средневековье - свойства металлов, руд и их взаимодействия, раскрывающие божественную сущность мира, в эпоху Возрождения - особенности металлов и пути их получения, постижение «природы вещей согласно её собственным началам»¹.

Объект металлургии Нового времени - десакрализованная природа, низведённая до положения поставщика материальных благ. Предметом исследования выступают свойства металлов, физико-химические процессы, обеспечивающие получение материалов с заданными характеристиками.

В рамках неклассической и постнеклассической науки происходит возврат (на качественно новом уровне) к пониманию природы как единого гармоничного Космоса в сочетании с её рассмотрением как источника материальных благ. Становится очевидной тесная взаимосвязь субъекта и объекта познания. Предметом исследования металлургии остаются состав и свойства сырья, физико-химические основы металлургических процессов.

Литература

1. Ахутин А.В. Понятие «природа» в античности и в Новое время («фюсис» и «натура»). – М.: Наука, 1988. – 208 с

ОСОБЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОМ ВУЗЕ

Койфман О.И.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
153000, Иваново, Шереметевский проспект, 7, e-mail: oik@isuct.ru*

Основной задачей химико-технологических вузов в подготовке кадров для химической и смежных отраслей промышленности является формирование специалиста, обладающего широкой эрудицией, фундаментальными знаниями в области естественных, в первую очередь химических наук, глубокой профессиональной подготовкой и способного применять свои знания и умения на практике. Фундаментом химико-технологического образования является в первую очередь подготовка выпускников в области химических наук, без которой невозможно эффективное освоение профессиональных дисциплин и творческая профессиональная деятельность выпускника.

В рамках современной уровневой системы подготовки первым образовательным уровнем является бакалавриат, в учебных планах которого предусмотрено изучение базовых химических дисциплин. Кроме того в вариативную часть учебного плана включаются дополнительные дисциплины, учитывающие профилизацию выпускников. Данный объем подготовки близок к объему химических дисциплин в специалитете с пятилетним сроком обучения, но четырехлетний срок обучения привел к появлению ряда проблем, таких как сдвиг сложных для усвоения дисциплин на младшие курсы, необходимость параллельного изучения дисциплин, ранее изучаемых последовательно и т.д. Частично эти проблемы могут быть решены путем активного использования в учебном процессе современных инновационных педагогических технологий.

В магистратуре – втором уровне образования набор химических дисциплин связан с направлением и профилем подготовки, а так же с видом деятельности, для которого готовится выпускник. Важным аспектом химической подготовки выпускников магистратуры является участие последних в научно-исследовательской работе, что совершенно необходимо для формирования творческого специалиста.

В заключение необходимо отметить, что основной особенностью химического образования выпускников химико-технологического вуза является его нацеленность на конечный результат, а конечный результат это высококвалифицированный специалист, способный эффективно решать проблемы, возникающие в его профессиональной деятельности.

ФОРМИРОВАНИЕ КРИТИЧЕСКОГО МЫШЛЕНИЯ УЧАЩИХСЯ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ

Кокибасова Г.Т., Серикова К.К., Абишева М.М.

*Карагандинский государственный университет им. Е.А. Букетова, 100028,
Караганда, Университетская, 28, e-mail:kokibasova@mail.ru*

Создание условий и применение различных средств обучения, которые могут сформировать критическое мышление учащихся, являются одними из основных задач успешного осуществления модернизации образования, поэтому сейчас многими педагогами и психологами проводится теоретико-эмпирический поиск для создания этих условий.

Педагогический эксперимент с целью формирования критичности ума школьников, в котором принимали участие ученики 10-го класса, был проведен в течение 3-х месяцев. Педагогический эксперимент состоял из трех этапов: констатирующего, формирующего и контрольного. За время проведения эксперимента были разработаны различные задания для каждого этапа, которые служили диагностическим и формирующим инструментарием¹. При проведении эксперимента были исследованы: учебная мотивация школьников, способность учеников к оценочным суждениям и уровень развития типов мышления, являющихся началом для развития критического мышления.

Результаты констатирующего этапа эксперимента показали недостаточность развития критического мышления десятиклассников.

Были выявлены условия формирования критического мышления, к которым можно отнести включение в учебные программы задания и упражнения², такие как «Синквейн», «Мозговая атака», «Верные и неверные утверждения», «ИНСЕРТ» и т.д.

Результаты эксперимента показали улучшения в степени сформированности критического мышления и это за непродолжительное время. При более продолжительном воздействии и системном использовании различных стратегий, а также при совместной работе, учителей данного класса, можно добиться более высокого уровня развития критичности ума.

Литература

1. Муштавинская И.В. Технология развития критического мышления на уроке и в системе подготовки учителя: Учеб.метод.пособие: КАРО;Санкт-Петербург; 2009.-144с.
2. Заир-Бек С.И., Муштавинская И.В. Развитие критического мышления на уроке. – М.: Просвещение, 2011.-223с.

ОБ ОПЫТЕ УЧАСТИЯ КАФЕДРЫ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ХИМИИ НОВОСИБИРСКОГО ГОСУНИВЕРСИТЕТА В ПОДГОТОВКЕ МАГИСТРОВ ПО ПРОГРАММЕ ЭРАЗМУС МУНДУС "КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА В АНАЛИТИЧЕСКИХ ЛАБОРАТОРИЯХ"

Коковкин В.В.^{а,б}, Коренев С.В.^{а,б}

^аНациональный исследовательский новосибирский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова 2 e-mail: basil@niic.nsc.ru

^бИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090,
г. Новосибирск, пр-т акад. Лаврентьева 3

Новосибирский госуниверситет является участником международного проекта по подготовке магистров в рамках программы Эразмус Мундус консорциума европейских университетов: Барселона и Кадиса в Испании, Альгарве в Португалии, Бергена в Норвегии и технологического университета Гданьска в Польше. Членами консорциума также являются университеты Сан-Паулу в Бразилии, Центрально-Южный в Китае. Магистерская программа предназначена для менеджеров и научных работников, которые применяют системы контроля качества в работе аккредитованных аналитических лабораторий.

Преподавание курсов ведется на английском языке. Учебным планом предусмотрено в течение первого года изучение курсов и практикумов числом до 70 наименований, которые разделены на 3 группы: управление качеством (23), анализ данных (13), методы анализа (34). Из общего списка студенты обязаны прослушать 30 основных и 15 на выбор в базовом университете, чтобы набрать суммарно не менее 60 зачетных единиц. Второй год посвящен выполнению исследовательского проекта (60 зачетных единиц). Часть работы (до 15 кредитов) можно выполнить по программе мобильности в одном из неевропейских университетов.

Новосибирский госуниверситет в учебном плане представлен курсом "Environmental samples monitoring" и утвержденной темой дипломной работы. За прошедшие годы двое наших студентов участвовали в программе, пройдя соответствующий отбор. НГУ принимал координатора действующего проекта проф. Мигеля Эстебана, который прочел курс «Selected issues in electroanalytical chemistry». Хотя опыт участия НГУ в проекте до сих пор был относительно небольшим, однако он полезен, так как позволяет знакомиться с опытом зарубежных университетов по подготовке студентов-аналитиков в качестве прямого участника всех проводимых консорциумом мероприятий. Кроме того, устанавливаются контакты с представителями отдельных университетов для выполнения совместных исследовательских работ, в том числе и с участием студентов.

ДИСТАНЦИОННЫЕ КУРСЫ ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ ХИМИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА МГУ

Миняйлов В.В., Пазюк Е.А., Лунин В.В.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Москва, Ленинские горы, 1-3, e-mail: minaylov@excite.chem.msu.ru*

Повышение квалификации сегодня становится все более актуальным требованием жизни, важным и для профессионалов, и для их работодателей. Формирование профессиональных стандартов, запланированное на ближайший год, сделает это требование более жестким. С экономической точки зрения целесообразность обучения на курсах повышения квалификации в очно-заочной или заочной форме на основе дистанционных образовательных технологий уже не вызывает сомнений.

На химическом факультете МГУ, имеющем значительный кадровый преподавательский потенциал и опыт внедрения дистанционных образовательных технологий в преподавании химических дисциплин¹, в 2014 году были запущены дистанционные курсы повышения квалификации профессорско-преподавательского состава Ассоциации Классических Университетов России. Программа обучения модульная и захватывает практически все отрасли химии². Программа вызвала интерес, по ней прошли обучение преподаватели российских университетов, частные лица.

В данной работе представлен опыт проведения обучения по программам дистанционного обучения, обсуждаются технологические, методические и психологические проблемы такого обучения и методы их решения. Указывается на перспективность развития данного направления и на ожидаемую конкуренцию.

Литература

1. Миняйлов В.В., Покровский Б.И., Лунин В.В. ИКТ в преподавании химии в МГУ. От электронной библиотеки "chemnet" до дистанционного обучения// XIX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, Волгоград, 25-30 сентября 2011 г. Тезисы докладов в четырех томах. — Т.4. — ИУНЛ ВолгГТУ Волгоград, 2011. — С.526–526.
2. Курсы повышения квалификации профессорско-преподавательского состава Ассоциации Классических Университетов России.// [Сайт химического факультета МГУ]// URL: <http://www.chem.msu.su/rus/program/fpk/> (дата обращения: 20.02.2016)

БИБЛИОМЕТРИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ХИМИЧЕСКОЙ НАУКИ В РОССИИ

Михайлов О.В., Аристов И.В., Александров А.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
420015, Казань, Карла Маркса, 68, e-mail: ovm@kstu.ru*

Как известно, одним из показателей оценки качества научной деятельности конкретного исследователя и его научной активности в настоящее время считается востребованность его публикаций научным сообществом, которая в той или иной степени коррелирует с их цитируемостью; при этом во внимание принимается как цитируемость публикаций исследователя, так и тех научных изданий, на страницах в которых эти самые публикации размещены¹. В настоящее время в литературе описано уже свыше тридцати различных параметров (т.н. библиометрических показателей)², которые тем или иным образом характеризуют как первую, так и вторую из этих двух разновидностей цитируемости; в прошлом же 2015 г. исполнилось уже десять лет с момента появления на свет т.н. «хирша», который ныне является едва ли не ключевой характеристикой научной деятельности российских ученых.

В настоящем обзорном докладе представлены сведения по цитируемости известных российских химиков, взятые из отечественной (РИНЦ) и международных (WoS и Scopus) баз данных цитируемости (число статей конкретного ученого в соответствующей базе данных, количество ссылок на них и индекс Хирша). Показана также динамика изменения индексов цитирования ряда российских и зарубежных журналов (т.н. импакт-факторов) издательств МАИК «Наука», Elsevier, Wiley и Taylor & Francis и др., публикующих результаты исследований в области химии и наук о материалах, в период 2005-2015 гг. Отмечено, что импакт-факторы многих зарубежных журналов, как и прежде, остаются значительно выше таковых для аналогичных российских, причем усредненные значения I_f журналов указанных зарубежных издательств в последние годы имеют пусть и не очень выраженную, но все же определенную тенденцию к росту, тогда как усредненный I_f журналов МАИК «Наука» со временем практически не изменяется, и дано объяснение этому феномену. Предложены также меры, направленные на преодоление этого неблагоприятного для российской химической науки фактора.

Литература

1. Mikhailov O.V. *Herald of Russian Academy of Sciences*, 2012, **82**, 403.
2. Штовба С.Д., Штовба Е.В. *Управление Большими Системами*, 2013, **44**, 262.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 14-06-00044.

СТРУКТУРА ШКОЛЬНОГО УЧЕБНИКА

Москва В.В., Кузнецова Л.М.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская пл., 9, e-mail: vikmos-36@yandex.ru*

Качество учебника в обучении определяется конечным результатом: усвоением школьником знаний, содержащихся в учебнике. Сформированность знаний у школьников обычно оценивается воспроизведением фактов, правил, законов. Однако усвоенные знания проявляются в сформированности умений оперировать полученными знаниями, т.е. применять их. Именно это определяет уровень мышления школьника, что является наибольшей ценностью школьного образования. Следовательно, содержание учебного предмета, воплотившегося в учебнике, должно быть направлено не просто на передачу суммы знаний, но и на развитие учащегося.

Содержание учебника имеет три источника: соответственная наука, теория познания, как часть философии, психология. Только такое учебное содержание может обеспечить условия для формирования умственных действий в мозгу ребёнка.

В обучении знания не могут быть перенесены из головы в голову механически по принципу «прочитал, услышал — усвоил». Психологи доказали, что ученик успешно усваивает знания в собственной деятельности. Организовать на уроке соответствующую деятельность учащихся можно, если в учебнике учебный материал изложен в определённой структуре.

Содержание учебного предмета, заключённое в учебнике, может быть двух родов: *статическим или динамическим*. Статический способ изложения учебного материала в учебнике представлен готовым знанием. В такой структуре не отражена логика, т.е. развитие учебного материала. Динамический способ является изложением знания в развитии, с постепенным наращиванием знания, с опорой на уже усвоенное знание.

Динамическая структура основывается на принципе историзма. Исторический процесс развития науки показывает, каким способом человеческое сознание шло к современному знанию. Это путь от поверхности явлений, данных в ощущениях, к постепенной глубине, недоступной непосредственным чувствам. Логика, вычленённая из исторического процесса, является основой для структурирования учебного материала. На этом пути также находим ту деятельность, которая в скорректированном виде может быть повторена на уроках.

К сожалению, наиболее распространённый учебник построен статическим способом, в «перевернутой» логике: от абстракций к реальному веществу, данному в ощущениях. В результате большинство выпускников школ, поступивших в вузы не имеют достаточной базы для обучения.

РОЛЬ ПРОФИЛЬНОГО ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ШКОЛЕ. ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКИЙ ПРОФИЛЬ.

Москвин С.А.

Гимназия № 9, 620014, Екатеринбург, проспект Ленина, 33, e-mail: sambunoll@mail.ru

Реформы системы образования последних десятилетий привели к беспрецедентному снижению уровня естественнонаучных знаний школьников.¹ «Островками химических знаний» являются профильные классы с углублённым изучением химии. Только в таких классах есть возможность познакомить учеников с историей науки, глубоко изучить теоретические вопросы, порешать интересные задачи, провести полноценный химический эксперимент, организовать личностно значимую деятельность школьников.

Углубленное изучение отдельных предметов, в том числе химии, в нашей школе началось в 1964 году. Постепенно привлекательность химического профиля начала снижаться, поэтому был создан химико-физический профиль. Традиционно химическая наука считается более близкой к биологии, поэтому во многих школах есть химико-биологические классы. С нашей точки зрения, изучение химических явлений и закономерностей прежде всего предполагает понимание фундаментальных законов физики, опору на математический аппарат.

Анализ показал, что двухгодичное профильное обучение (10-11 классы) менее эффективно: полгода в десятом классе ученик учится организации своей учебной деятельности; второе полугодие одиннадцатого класса нацелено на подготовку к ЕГЭ; таким образом, на серьезное обучение остается вместо двух лет - один год. Поэтому в нашей школе профильное обучение проходит в 8-11 классах, что позволяет проводить изучение профильных дисциплин с меньшим напряжением для учащихся, разнообразить методы обучения, предоставлять учащимся в большей степени свободу выбора различных видов деятельности. Например, представляет интерес эксклюзивная система семинарских занятий по химии, предполагающая проектную деятельность учеников. На наш взгляд, предлагаемая система обучения позволяет решить некоторые проблемы профильного школьного химического образования.²

Литература

1. Резолюция первого Всероссийского съезда учителей химии. М. 2012
2. Лисичкин Г.В., Леенсон И.А. Школьное естественнонаучное образование в СССР и Российской Федерации: история, тенденции и проблемы модернизации. Рос.хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им Д.И.Менделеева), 2011, т. LV, №4, с.4-18.

**ТАБЛИЦА Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА.
СОВРЕМЕННОЕ СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ
НА ОСНОВЕ БАЗЫ ДАННЫХ ICSD.**

Подберезская Н.В.

*Институт неорганической химии им. А.В. Николаева РАН, 630090, Новосибирск,
проспект акад. Лаврентьева, 3, e-mail: podberesz@niic.nsc.ru*

Приводятся результаты аналитической работы, проведенной по структурным данным неорганической базы (ICSD, версия 1.9.6, 2015-1) для элементов таблицы Д.И. Менделеева, дающие представление о современном состоянии исследования структур простых веществ, о количестве полиморфных модификаций, их симметрии. На этой основе выявлены новые данные о симметрии простых веществ в особых точках таблицы. Существенное накопление структурных данных происходило по мере улучшения технического и математического оснащения кристаллографической науки. Анализируя приведенную в работах Г.Б. Бокия таблицу¹⁻³ с указанием на симметрию структурно изученных к тому времени простых соединений, видим, что для большинства элементов была известна лишь одна из модификаций – плотнейшая кубическая, либо плотнейшая гексагональная, либо кубическая центрированная. Двумя полиморфами с плотнейшими кубической и гексагональной упаковкой атомов представлены Sc, Ti, Co, Ni, La, Ce, Tl. Структурно не исследован почти весь ряд РЗЭ: в дополнение к La и Ce были известны гексагональные модификации Pr, Nd, Ho, Er. Появление монографии⁴ и количество ссылок в ней показывает, что интерес к исследованиям простых веществ не пропадает. К сожалению, в ней практически отсутствуют ссылки на русские работы. Наиболее интересно сравнение симметрии для двух соседних элементов таблицы в каждом из периодов, в которых происходит нарушение непрерывности в заполнении электронами последних уровней. Большинство из них в нормальных условиях имеет разную симметрию и только кристаллы Ni и Cu, Rh и Pd, Ir и Pt, Th и Pa сохраняют симметрию пр. гр. *Fm3-m* до высоких температур⁵.

Литература

1. Бокий Г.Б. Природа, – 1942, №1-2, 38.
2. Бокий Г.Б. Вест. МГУ, – 1948, №5, 97.
3. Бокий Г.Б. *Журн. структур. химии*, – 1988, Т.29, №6, 147.
4. Scerri Eric R. The Periodic Table. The Story and Its Significance. – Oxford, University Press: 2007, 287–328
5. Inorganic Crystal Structure Database (ICSD, версия 1.9.6, 2015-1) – Karlsruhe, National Institute Standards and Technology, Gaithersburg.

ОПЫТ ПРЕПОДАВАНИЯ НАНОХИМИИ В ЛИЦЕЕ

Семакина Н.В.

*Ижевский государственный технический университет им. М.Т. Калашникова,
426069, Ижевск, Студенческая, 7, e-mail: nadezhda_semakina@mail.ru*

В докладе представлен опыт преподавания модуля «Нанохимия» в рамках программы элективного курса «Введение в нанотехнологии» в старших классах биолого-химического профиля в МБОУ "Лицей № 41" г. Ижевска (Удмуртская республика, Россия)^{1,2}. Целью данного модуля является знакомство учащихся с предметом нанохимии, дополнение и расширение представления старшеклассников о веществах и явлениях, изучаемых на уроках химии, представлениями о наночастицах, наноструктурах, наноматериалах и размерных эффектах в нанохимии.

В докладе приведены структура, содержание модуля, формы организации и технологии образовательного процесса, а также результаты преподавания.

Содержание модуля включает основные понятия и объекты нанохимии, размерные эффекты в химии, классификацию, методы синтеза и исследования нанообъектов, углеродные наноматериалы, нанокатализ.

Программа предполагает лекционные занятия, решение задач, лабораторные работы по нанохимии.

В основе обучения лежит системно-деятельностный подход, реализуемый в организации проектно-исследовательской деятельности учащихся в области нанотехнологий. Участие старшеклассников в научно-исследовательской работе способствует получению новых знаний и более глубокому пониманию выбранной темы, развитию навыков работы на лабораторном оборудовании и приборах, оформления научно-исследовательской работы, создания качественных презентаций и представления результатов исследования перед аудиторией.

Результаты участия лицеистов в ряде престижных научных конкурсов доказали, что исследовательская деятельность учащихся в области нанохимии и нанотехнологий была организована эффективно³.

Литература

1. Semakina N.V., Kodolov V.I. *Polymers Research Journal*, 2011, **5**, No. **2**, 215-223.
2. Семакина Н.В. Четвертая междунар. конф. «От наноструктур, наноматериалов и нанотехнологий к наноиндустрии», Ижевск, 2013, 86-87.
3. Семакина Н.В., Кодолов В.И. IX mezinárodní vědecko-praktická konference «Vědecký průmysl evropského kontinentu-2013», **18**. Praha, Czech Republic, 2013. 24-30.

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ И АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ В ВЕДУЩЕМ АГРАРНОМ УНИВЕРСИТЕТЕ РОССИИ (К 150-ЛЕТИЮ ТИМИРЯЗЕВСКОЙ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОЙ АКАДЕМИИ)

Смарыгин С.Н.

*Российский государственный аграрный университет –
МСХА имени К.А. Тимирязева, 127550, Москва, Тимирязевская, 4,
e-mail: smaryguin@mail.ru*

В 1865 г. была основана Петровская земледельческая и лесная академия. Неорганическая и аналитическая химии преподаются со дня основания вуза. Фундамент преподавания этих дисциплин был заложен профессорами Н.Э. Лясковским, П.А. Ильенковым, Э.Б. Шене, М.И. Коноваловым и И.А. Каблуковым на основе традиций двух крупнейших российских университетов (Московского и Санкт-Петербургского) и немецкой химической школы Ю. Либиха. В первые десятилетия содержание курса неорганической химии излагалось только на лекциях (4 часа в неделю). Отсутствие практических занятий по неорганической химии до какой-то степени компенсировалось многочисленными лекционными опытами и практикумом по аналитической химии, который был доступен для студентов ежедневно в течение 6 часов. При чтении лекций по неорганической химии лекторы старались изложить все имевшиеся к тому времени сведения, включая химическую технологию, минералогию и достижения физической химии¹, которая в то время еще не оформилась в отдельную дисциплину. В двадцатом веке по мере накопления химической информации и сокращения часов, отводимых на изучение химии, из учебников по неорганической химии и из лекционных курсов для сельскохозяйственных вузов были частично исключены сведения, непосредственно не относящихся к нуждам аграрных специальностей². В последние десятилетия коллективом кафедры неорганической и аналитической химии разработан и реализуется система преподавания, направленная на формирование у будущих специалистов АПК понимания необходимости химических знаний и позволяющая в сжатой форме с использованием современных технологий читать лекции, эффективно проводить лабораторные работы и регулярно в течение учебного года контролировать самостоятельную внеаудиторную работу студентов^{3,4}.

Литература

1. Каблуков И.А. Курс лекций неорганической химии. – М.: Сельхозгиз, 1940. – 512 с.
2. Заозерский И.Н. Неорганическая химия. – М.: Высш. шк., 1963. – 526 с.
3. Князев Д.А., Смарыгин С.Н. Неорганическая химия. – М.: Юрайт, 2014. – 608 с.
4. Смарыгин С.Н., Багнавец Н.Л., Дайдакова И.В. Неорганическая химия. Практикум. – М.: Юрайт, 2016. – 414 с.

ВЗАИМОСВЯЗЬ ИНТЕГРАТИВНОГО И ДИФФЕРЕНЦИРОВАННОГО ПОДХОДОВ ПРИ ОБУЧЕНИИ ХИМИИ В ВУЗЕ (С ОПОРОЙ НА САМОСТОЯТЕЛЬНУЮ РАБОТУ СТУДЕНТОВ)

Стихова А.М.

*Государственный морской университет имени адмирала Ф.Ф. Ушакова,
353918, Новороссийск, проспект Ленина, 93, e-mail: stihova.am@mail.ru*

В современной теории систем понятия интеграция и дифференциация выступают как наиболее важные критерии высоты или степени организации системы. Высота организации определяется количеством входящих в систему разнородных элементов, числом и разнообразием связей между элементами. Самостоятельная работа с позиции взаимосвязи интегративного и дифференцированного подходов исследовалась на материале общей и неорганической химии при обучении студентов инженерно-экологического профиля. Если рассматривать самостоятельную работу с позиции взаимосвязи интегративного и дифференцированного подходов, расширяются представления о самостоятельной работе, и дается толчок к дальнейшему развитию ее теории. Это выводит самостоятельную работу на новый категориальный уровень в аспекте философских представлений¹. В предлагаемой концепции самостоятельная работа рассматривается только как деятельность студента, роль же преподавателя, адекватно этой деятельности, заключена в создании мотивационного тренинга самостоятельной работы студентов. Так как от уровня самостоятельной работы, не в меньшей степени, чем от уровня предметных знаний зависит успешность обучения студентов, необходимо проводить мониторинг самостоятельной работы и, опираясь, на полученные результаты, организовывать обучение студентов на основе специально разработанной для этой цели системы². Разработана методическая система обучения студентов с опорой на самостоятельную работу, включающая оценивание самостоятельной работы с позиции взаимосвязи интегративного и дифференцированного подходов к обучению химии.

Литература

1. Стихова А.М. Взаимосвязь интегративного и дифференцированного подходов к организации процесса обучения химии в вузе: монография.- Новороссийск: ГМУ имени адмирала Ф. Ф. Ушакова, 2012.- 212 с.
2. Стихова А.М. Самостоятельная работа в системе взаимосвязи интегративного и дифференцированного подходов при обучении химии в вузе: монография.-Новороссийск: ГМУ имени адмирала Ф.Ф. Ушакова, 2015.-118с.

ОРГАНИЗАЦИЯ И МЕТОДИЧЕСКОЕ СОПРОВОЖДЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СТУДЕНТА ВУЗА НА ПРИМЕРЕ КУРСА ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Тюменова С.И., Рогалева Е.В., Карташева М.Н.

*Российский государственный университет нефти и газа имени И. М. Губкина,
119991, Москва, Ленинский проспект, 65, e-mail: sv.tyumenova@gmail.com*

Согласно ФГОС высшего образования рабочая программа дисциплин «Общая химия» и «Неорганическая химия» включает следующие виды аудиторной работы студента: лекции, семинарские и лабораторно-практические занятия. Каждый вид учебной деятельности подразумевает формирование необходимых компетенций, что достигается при системном методическом сопровождении учебной деятельности студента.

Лекции дают возможность студенту получать целостные знания, формируют способность к самоорганизации и самостоятельной работе, способность осуществлять поиск, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных.

Семинарские занятия формируют умения и навыки применять полученные теоретические знания в решении практических задач. При организации семинаров реализуется принцип совместной деятельности, сотворчества и сотрудничества.

Лабораторные работы – вид практических занятий, который интегрирует теоретические знания и практические умения студента. Лабораторные работы формируют навыки организации исследовательской работы.

Контроль знаний – итоговый этап процесса обучения. От организации контроля во многом зависят эффективность управления учебным процессом и качество подготовки будущего специалиста.

На кафедре общей и неорганической химии РГУ нефти и газа имени И.М. Губкина разработаны и успешно применяются методические материалы по всем видам аудиторных занятий по дисциплинам «Общая химия» и «Неорганическая химия».

Литература

1. Берденникова Н.Г., Меденцев В.И. Организационно-методическое обеспечение учебного процесса в вузе. Учебно-методическое пособие. СПб: БАТИП, 2006. – 117 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ДОПОЛНЕННОЙ РЕАЛЬНОСТИ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ХИМИИ

Шумилин А.С., Якунина И.Е.

*Институт повышения квалификации и профессиональной переподготовки
работников образования Тульской области, 300041, Тула, Ленина, 22,
e-mail: shumilin-as@mail.ru*

Информатизация процесса российского образования является крупномасштабным явлением, которое связано с бурным развитием прикладной информатики и внедрением компьютерных технологий практически во все сферы деятельности человека. Современный младший школьник без труда пользуется сложными мобильными устройствами (планшетными компьютерами, мобильными телефонами и другими гаджетами) и без посторонней помощи выйти в интернет, скачать и установить приложение, игру и пр. Будет ли такому ребенку интересно учиться в старшей школе? Именно поэтому, особая роль во ФГОСе второго поколения отведена развитию ИКТ-компетентности учащихся и применению ЭОР в процессе обучения. Современные компьютерные технологии предоставляют огромные возможности для развития процесса образования. Одним из таких направлений является применение дополненной реальности. Дополненная реальность (Augmented reality, AR) - стремительно развивающаяся технология наложения виртуальных объектов на реальные объекты в режиме реального времени. Мы предлагаем использовать метод дополненной реальности в следующих направлениях: изучение микромира для более глубокого и образного изучения теоретических основ химии (строение атома, химическая связь, гибридизация атомных орбиталей, диссоциация), изучение механизмов органических реакций (перегруппировка атомов), основы химической технологии и др.

Таким образом, использование дополненной реальности при обучении химии является одним из перспективных направлений применения ИКТ в образовании.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

НОВЫЕ НАУЧНЫЕ ДАННЫЕ ПО СУЛЬФИДНЫМ СИСТЕМАМ ns^2 -, $3d$ -, $4f$ -ЭЛЕМЕНТОВ В ВЫСШЕМ ХИМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ

Андреев О.В., Монина Л.Н.

ФГБОУ ВО Тюменский государственный университет,
625003 Тюмень, ул. Семакова, 10 monina83@yandex.ru

На кафедре неорганической и физической химии Тюменского государственного университета сформировано научное направление по изучению халькогенидных систем ns^2 (Mg, Ca, Sr, Ba)-, np^1 (Ga, In)-, np^3 (Sb, Bi)-, $3d^{1-10}$ (Sc-Cu)-, $4d^1$ (Y)-, $4d^{10}$ (Ag)-, $4f$ (La-Lu)-элементов. Интеграция науки в образовательный процесс является неотъемлемой задачей в рамках повышения интереса студентов к проводимым научным исследованиям сотрудников кафедры, вовлечению студентов в научный процесс. Подготовленные монографии [1-4] и учебное пособие [5] способствуют развитию исследовательских качеств, обогащению студентов теоретическими знаниями по теории физико-химического анализа, фазовым диаграммам, синтезу сложных халькогенидных фаз. Разделы учебного пособия и монографий используются на всех ступенях образования: бакалавриате (13 дисциплин учебного плана), магистратуре (4 дисциплины) и аспирантуре по специальности «Физическая химия» (4 дисциплины). Студенты используют материал при выполнении курсовых работ, выпускных квалификационных работ и магистерских диссертаций.

Литература

1. Андреев О.В., Разумкова И.А., Митрошин О.Ю. и др. *Фазообразование в системах сульфидов ns -(Sr, Ba), $3d$ -(Sc, Cu) и $4f$ -(La – Lu)-элементов в мезо- и наносостояниях: Монография.* Тюмень: Изд-во Тюм. гос. ун-та, 2008. 132 с.
2. Кертман А.В. *Сульфидные и фторсульфидные ИК-материалы: Монография.* Тюмень: Издательство Тюм. гос. ун-та, 2010. 156 с.
3. Андреев О.В., Русейкина А.В., Соловьев Л.А. и др. *Получение, структура, физико-химические характеристики соединений $ALnBS_3$ ($A = Sr, Eu$; $Ln = La-Lu$; $B = Cu, Ag$): Монография.* Екатеринбург: РИО УрО РАН, 2014. 192 с.
4. Андреев О.В., Бамбуров В.Г., Монина Л.Н. и др. *Фазовые равновесия в системах сульфидов $3d$ -, $4f$ -элементов: Монография.* Екатеринбург: РИО УрО РАН, 2015. 312 с.
5. Андреев О.В., Монина Л.Н., Андреев В.О. и др. *Фазовые равновесия, синтез, структура фаз в системах сульфидов $3d$ -, $4f$ -элементов: Учебное пособие.* Тюмень: Изд-во Тюм. гос. ун-та, 2014. 512 с.

Подготовлено при финансовой поддержке государственного задания №2014/228 НИР №996.

ПРОГРАММЫ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ЕВРОПЕЙСКИХ ВУЗАХ

Гринева О.В.

*Химический факультет Московского государственного университета
имени М.В. Ломоносова, 119991, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, ovg@phys.chem.msu.ru*

Одна из декларируемых целей реформирования российского высшего образования в постсоветское время состояла в достижении соответствия с некими международными стандартами. Обсуждение того, в какой степени такая формулировка цели отвечала интересам развития России — это отдельная тема. Важно отметить, что большинство изменений имело и до сих пор продолжает иметь формальный характер: выпускников вузов стали называть магистрами, время, отводимое на изучение предметов, оценивать в баллах и составлять списки компетенций. Примечательно, что на некоторые существенные формальные характеристики программ обучения (например, их срок) желание реформаторов добиться согласия с международными правилами не распространяется. И тем более оно не распространяется на содержание и методику обучения. Между тем, анализ именно этих аспектов зарубежного опыта мог бы способствовать совершенствованию российского образования.

В настоящем сообщении будут кратко охарактеризованы основные программы химического профиля, предлагаемые европейскими вузами. Более детально будут представлены системы обучения в подразделениях, имеющих наиболее высокие оценки по разным критериям (в частности, на химических факультетах (в школах) университетов Кембриджа, Оксфорда, Дарема, Эдинбурга).

В большинстве европейских вузов срок обучения после средней школы с получением при успешном окончании диплома магистра химии составляет 4 года (в университетах Шотландии 5 лет).

В качестве обязательных в программы включены только предметы, имеющие непосредственное отношение к определенной специальности (помимо химии это могут быть соответствующие разделы математики, физики, биологии).

Химическая часть предусматривает спиральное (т.е. каждый год на более высоком уровне) изучение трех основных дисциплин: неорганической химии, органической химии и физической химии.

Даже в пределах одной страны (например, Великобритании) есть университеты (кембриджский, оксфордский), стиль обучения и критерии оценки студентов в которых заметно отличаются от остальных.

ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ – ИНТЕГРАЦИЯ С НАУКОЙ

Деркач С.Р.^а, Петрова Л.А.^а, Николаев А.И.^б

^аМурманский государственный технический университет, 183010, Мурманск,
Спортивная, 13, e-mail: derkachsr@mstu.edu.ru

^бИнститут химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В.
Тананаева Кольского научного центра РАН, 184209, Апатиты, Академгородок, 26а

Химическое образование, было, есть и будет необходимой составной частью инновационного развития экономики нашей страны. При этом под химическим образованием понимается два уровня получения знаний – фундаментальная химическая подготовка и специальная подготовка (специализация) с учетом специфики конкретной области. Современное химическое образование не замыкается в рамках решения только химически задач, оно неразрывно связано со смежными дисциплинами и интегрировано в изучение научных проблем различных отраслей и производств.

Интеграция высшего образования и науки реализуется в виде различных форм взаимодействия высших учебных заведений и научно-исследовательских институтов (договора о сотрудничестве, совместные исследования, учебная, производственная и преддипломная практика в лабораториях НИИ и т. д.). Наиболее эффективный подход – это ведение учебного процесса на базе научно-исследовательских институтов.

Обсуждается опыт интегрированной подготовки студентов по направлению «Химия» в Мурманском государственном техническом университете совместно с Институтом химии и технологии редких элементов и минерального сырья имени И.В. Тананаева Кольского научного центра РАН, в котором создана базовая кафедра университета.

Интегрированный научно-образовательный процесс дает возможность студенту получить навыки научно-исследовательской деятельности и включиться в научный процесс с решением конкретных задач горнодобывающей, нефтедобывающей и металлургической отраслей еще до окончания вуза. Выполнен анализ причин повышения мотивации выпускников к продолжению обучения в магистратуре и аспирантуре и их профессиональной ориентации при трудоустройстве в Арктическом регионе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 16-58-20008.

РАЗВИТИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ШКОЛЬНИКОВ И СТУДЕНТОВ КАК УСЛОВИЕ ПРЕЕМСТВЕННОСТИ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Ефимова Е.В.^а Чупанова Л.В.^б

*^аБашкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
450000, Уфа, Октябрьской революции, 3а, e-mail: efimova_ev74@mail.ru*

^бЛицей № 62, 450112, Уфа, Ульяновых, 38

Проблема преемственности в химическом образовании становится все более актуальной. Это связано с процессами модернизации в образовательной и научной сферах, а также с ускорением информационных потоков в различных отраслях деятельности. Новые условия организации образовательных систем нуждаются в обновлении механизмов наведения преемственных связей, обеспечивающих непрерывный процесс становления человека в течение всей жизни.

С точки зрения философии преемственность представляет собой связи между явлениями в процессе развития, когда новое, сменяя старое, сохраняет в себе его некоторые элементы. Таким образом, сущность преемственности в образовании представляет собой постепенное совершенствование личности обучающегося, в основе которого лежит постепенное усложнение различных видов деятельности.

Учитывая особенности химии как экспериментальной науки, в основу преемственности химического образования может быть положена исследовательская деятельность. Этот вид деятельности уникален, поскольку включает в себя классические элементы познавательной активности, обладает интегративной природой, а также несет в себе большой развивающий потенциал. Поэтому исследовательская деятельность может стать связующим звеном между уровнями химического образования от средней школы до профессионального самосовершенствования.

Преемственные связи обеспечиваются за счет постепенного усложнения содержания и структуры исследовательской деятельности от учебного исследования (в общеобразовательной школе) к работе над научными проектами (в профессиональной школе). Интеграция обеспечивается путем сохранения, развития и преобразования исследователем объекта изучения. В процессе исследования у обучающихся формируется научная культура и исследовательская компетенция как внутреннее свойство, обуславливающее готовность к постоянному научно-профессиональному самосовершенствованию.

ОСОБЕННОСТИ ПОДГОТОВКИ МАГИСТРОВ И АСПИРАНТОВ ПО ПРОФИЛЮ «БИОХИМИЯ» НА ВЕТЕРИНАРНО-БИОЛОГИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ

**Зайцев С.Ю., Фролова Л.А., Балакирев Н.А., Максимов В.И., Еремеев Н.Л.,
Лисицына А.А., Царькова М.С.**

*Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии
(МВА имени К.И. Скрябина), 109472, Москва, Академика Скрябина, 23,
e-mail: marina.tsarkova@gmail.com*

ФГБОУ ВО «Московская государственная академия ветеринарной медицины и биотехнологии – МВА имени К.И.Скрябина» - член Европейской ассоциации аграрных вузов, ведущий ветеринарный вуз России, известный крупными научными школами и активными инновациями в образовательной деятельности.

С 1966г. в академии функционирует уникальный ветеринарно-биологический факультет (ВБФ) по подготовке биологов ветеринарного профиля, не имеющий аналогов в высшем образовании России и зарубежных стран. Образовательные программы ВБФ основаны на взаимосочетании базового ветеринарного образования с глубокой фундаментальной и биологической подготовкой по программам классических университетов, что обеспечивает широкую востребованность выпускников в ветеринарии, биологии, медицине и других сферах.

В соответствии с развитием приоритетных областей науки и новыми образовательными стандартами, на ВБФ созданы уникальные программы подготовки кадров по направлению «Биология», в том числе магистерская программа «Биохимия и бионанотехнологии» (с 2010г.) и программа аспирантуры по профилю «Биохимия» (с 2014г.). Выпускающая кафедра – кафедра химии; научный руководитель программ – зав. кафедрой, д.х.н., д.б.н., профессор Зайцев С.Ю.

Реализация профильной части программ отличается рядом особенностей: 1) развитие научного наследия школы ветеринарных биохимиков С.И.Афонского, А.Г.Малахова; 2) чтение проблемных лекций приглашенными специалистами; 3) активное участие магистрантов и аспирантов в выполняемых на кафедре научных проектах и грантах Минобрнауки России и науки, РФФИ, РНФ, а также договорах с ведущими НИИ РАН; 4) систематическая публикация результатов собственных научных исследований; 5) обмен магистрантами и аспирантами с зарубежными научными и учебными учреждениями и другие направления в организации учебно-научного процесса.

Работа выполнена за счет гранта Российского Научного Фонда, проект 14-16-00046.

О РАЗРАБОТКЕ ЗАДАНИЙ ХИМИЧЕСКИХ ОЛИМПИАД

Зубарев М.П., Мочалова Н.К., Елохов А.М.

*Пермский государственный национальный исследовательский университет,
614990, Пермь, Букирева, 15, e-mail: mizubarev@yandex.ru*

Химический факультет Пермского государственного национального исследовательского университета имеет многолетний опыт проведения олимпиад школьников. С 1964 года на базе факультета проводится Региональный этап Всероссийской олимпиады школьников по химии. В настоящее время преподаватели факультета составляют задания для муниципального этапа Всероссийской олимпиады для параллелей 7-11 классов, а также совместно с коллегами из Белгорода, Саранска, Самары, Красноярска разрабатывают задания Многопредметной олимпиады «Юные таланты» по предмету химия для трех возрастных параллелей – 9, 10 и 11 классов¹. Эта олимпиада неоднократно входила в перечень олимпиад школьников Минобрнауки России.

При проведении олимпиады используются оригинальные задачи различной степени трудности, важную роль при разработке которых играют следующие аспекты:

1. Наличие межпредметных связей, показывающих тесную взаимосвязь естественных наук и способствующих расширению кругозора участников.
2. Сочетание в задаче элементов из разных разделов химии. Например, химических свойств и кристаллографических данных неорганических веществ, связь свойств веществ с их применением и химической технологией.
3. Познавательный характер задач, обеспечивающий получение участником некоторой дополнительной информации с последующим использованием ее для решения задачи. При этом участнику необходимо продемонстрировать умение логически мыслить и получать выводы, исходя из своих знаний и предоставленной дополнительной информации.
4. Предпочтительное использование комбинированных задач, сочетающих расчеты с качественным описанием явлений и написанием химических уравнений.
5. Разветвленная структура задачи, содержащая элементы различного уровня трудности.

Литература

1. Олимпиада по химии «Юные таланты»: сб. заданий: учебн.-метод. пособие/ Под общ.ред. М.П.Зубарева; Перм. гос. нац. исслед. ун-т. – Пермь. 2014 – Вып.1 – 100 с.

РОЛЬ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ДИСЦИПЛИН ПРИ ПОДГОТОВКЕ КАДРОВ ДЛЯ СОВРЕМЕННЫХ ВЫСОКОТЕХНОЛОГИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ

Малыгин А.А., Соснов Е.А.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет), 190013, Санкт-Петербург, Московский проспект, 26,
e-mail: malygin@lti-gti.ru*

Сегодня трудно представить высокотехнологичные производства не использующие химических подходов при решении конкретных практических задач. Ярким примером может служить микроэлектроника, где все основные этапы планарной технологии изготовления интегральных схем связаны с химией: фотолитография, получение пленок химическим осаждением из газовой фазы (ХОГФ), вакуумное реактивное распыление и напыление, плазмохимические процессы травления, диффузионное и ионное легирование. Появление современных высокотехнологичных направлений, связанных с развитием нанотехнологий и их использованием для создания элементов солнечных батарей, суперконденсаторов, сенсорных датчиков и других материалов и изделий, еще более наглядно выявило роль химических технологий в промышленном производстве.

Таким образом, по мере повышения уровня технологий все более важную роль играют химические процессы. С другой стороны, многие перспективные направления в науке и промышленности связаны с необходимостью наличия глубоких знаний в области физики, биологии, материаловедения, информационных технологий, моделирования, проектирования и т.п. Решить задачу подготовки квалифицированных кадров для высокотехнологичных отраслей путем увеличения объема химической подготовки у физиков или физической у химиков-технологов бесперспективно по нескольким причинам. Это как существенно различающаяся по объему и содержанию базовая подготовка, так и разные (физические или химические) подходы к решению задач, изучаемые в рамках специальных дисциплин.

В данном сообщении рассмотрены перспективы организации учебного процесса на уровне магистратуры с использованием сетевого обучения для подготовки специалистов с различной базовой подготовкой, способных эффективно решать практические задачи реального промышленного производства.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проект 16-03-00214, и РНФ, проект 14-13-00597.

ПРИЕМЫ МОТИВАЦИИ СТУДЕНТОВ-ХИМИКОВ НА СПЕЦИАЛЬНОСТЬ «ХИМИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ»

Матвеева Э.Ф., Пикулина Н.Ю., Мендалиева М.Р.

*Астраханский государственный университет, Астрахань, Татищева, 20-а,
e-mail: elvira107@rambler.ru*

В основе успешности и получения положительных результатов в ходе обучения любой дисциплине лежит проблема организации деятельности обучаемых. Замечено, что активность и осознанность обучаемых в освоении каких-либо профессиональных компетенций находятся в прямой зависимости от их мотивированности на изучение курса. В условиях, когда в течение 36 аудиторных часов необходимо не просто познакомить обучающихся с многообразными видами деятельности учителя химии, но и обучить им, необходимо уделять большое внимание мотивации студентов к выбору будущей профессии. Формирование каких-либо профессиональных компетенций – это длительный процесс, требует параллельного и одновременно большого собственного труда¹.

Рассмотрим некоторые приёмы вовлечения студентов в активную деятельность по освоению курса «Методика преподавания химии». В ходе обучения были использованы приёмы: 1) подготовка эссе: а) об учителе химии и о любимом учителе (на примере любого предмета); б) после экскурсии в школу, в которой проходила конференция для учителей города и студенты были приглашёнными гостями и участниками мастер-класса учителя химии; в) после просмотра фильма о жизнедеятельности учёных химиков; 2) разработка кейс-задания для проведения занятия со студентами младших курсов; 3) обсуждение видеофрагментов уроков, проведённых магистрантами – учителями химии.

Эффективным приёмом мотивации к педагогической деятельности является создание видеоматериалов процесса обучения в режиме on-line с последующим обсуждением. Практикуем изучение педагогического опыта посредством ознакомления с работой сайтов учителей химии, участия в научно-практических конференциях, вебинарах, мастер-классах педагогов города и области и т.д. Таким образом, интерактивное освоение бакалаврами методического курса может способствовать выбору ими в дальнейшем магистерской программы «Педагогическое образование» по профилю «Химическое образование».

Литература

1. Матвеева Э.Ф. Методика преподавания химии (инновационный курс): учебно-методическое пособие / Э.Ф. Матвеева. – Астрахань: Астраханский государственный университет. Издательский дом «Астраханский университет», 2014. – 208 с.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОСЛЕДСТВИЙ РЕФОРМ НАЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ ОБРАЗОВАНИЯ

Мясоедова Т.Г.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева, 125047,
Москва, Миусская пл., 9, e-mail: tmyas@muctr.ru*

В 70-х годах 20в. в отечественной и зарубежной литературе активно обсуждался вопрос о кризисе системы образования, который к тому времени затронул как развивающиеся, так и развитые страны¹.

Впоследствии на различных европейских и мировых форумах посвященных высшему образованию (1997г.-1998г.) были обозначены пути эволюции высшей школы в XXI веке. Речь шла о важности всесторонней подготовки высококвалифицированных специалистов, ознакомлении обучающихся с социальными, экономическими и политическими тенденциями, наблюдаемыми в обществе². Многие страны включились в процесс реформирования существующих систем образования, затрагивая при этом как содержание образовательных программ, так и систему образования в целом.

К настоящему времени в России ввели новую систему оценки знаний в средней школе (сделав акцент на тестовых заданиях) и процедуру зачисления абитуриентов в вузы по результатам ЕГЭ, практически полностью заменили подготовку специалистов для разных отраслей промышленности на массовую подготовку бакалавров, отменили существовавшую ранее систему подготовки научных кадров через аспирантуру, оказали значительную финансовую поддержку только федеральным и национальным исследовательским университетам. В результате этих нововведений, как отмечает преподавательский корпус многих вузов, большое количество бакалавров не умеют системно мыслить, анализировать информацию, вычленять главное, связно выражать свои мысли, приобрели ложную уверенность в том, что профессиональные знания они получают у будущих работодателей.

В сообщении будет дан сравнительный анализ последствий реформ национальных систем образования в некоторых странах.

References

1. Кумбс Ф.Г. Кризис образования в современном мире: Системный анализ. М.: Прогресс, 1970, 293 с.
2. http://edu.tltsu.ru/sites/sites_content/site125/html/media16869/Levchuk.doc из выступления Ф. Майор на форуме «Европейская программа перемен в высшем образовании в XXI в.» CRE action - 1997. 111. - С. 43-150.

ЭЛЕМЕНТЫ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ В ХИМИИ

Невская Е.Ю., Егорова О.А., Сорокина Е.А.

*Российский университет дружбы народов,
117198, Москва, Миклухо-Маклая, 6, e-mail:nevskaya_eyu@pfur.ru*

Стремительно информационно развивающийся современный мир требует широкого внедрения инновационных форм обучения. В настоящее время помимо уже сложившихся классических форм, таких как очная, очно-заочная, необходима реализация интеллектуальных высокотехнологичных форм образования, использующих весь спектр средств интернета.

Образовательные учреждения высшего образования при подготовке по профессиям и специальностям могут использовать дистанционное обучение¹.

На факультете физико-математических и естественных наук РУДН разработана и работает программа контрольных и консультационных мероприятий, проводимых с использованием интернет-технологий. Получение химического образования дистанционно в целом невозможно, но для усиления образовательного эффекта возможно введение элементов интернет-обучения. Основная их цель - дополнительная поддержка off-line форм обучения без увеличения количества часов лекционной и лабораторной нагрузки. Отсутствие личного контакта с преподавателем компенсируется on-line консультациями, сообщениями в микроблоге, E-mail перепиской, Skype-консультациями.

Сравнительный анализ результатов знаний, полученных студентами в системе с элементами дистанционного обучения, с результатами, полученных классическим путем, показал, что интерактивные консультации существенно повышают уровень знаний. Комбинированный on-line и off-line режим работы со студентами осуществляется с 2011 года. За три года статистика on-line обращений по консультативным вопросам значительно возросла, что свидетельствует о стабильно растущем уровне компьютерной грамотности, а также о спросе на материалы курса, которые доступны через интернет.

Литература

1. Приказ № 137 Министерства образования и науки РФ от 06.05.2005 «Об использовании дистанционных образовательных технологий»

ИНТЕРАКТИВНЫЙ МЕТОД ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОТЕНЦИАЛА ВУЗА И АКАДЕМИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА

Пономарев В.И.^а, Явойская О.В.^б

^аИнститут металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, улица Амундсена, 101

^бФГБОУ ВО Уральский ГАУ, 620075, Екатеринбург, улица Карла Либкнехта, 42,
e-mail: metal-olga@mail.ru

В XXI веке химия все больше проникает в разные отрасли промышленности, в том числе металлургию, сельскохозяйственное машиностроение и другие сферы. Химический состав и структура материалов определяют их служебные свойства и эксплуатационную надежность. Сегодня широкое использование зарубежной техники и материалов снижает экономическую безопасность России, вследствие чего особую актуальность приобретают вопросы импортозамещения, в реализации которых важную роль играют химия и химическое образование.

В качестве одной из принципиально новых стратегий подготовки специалистов в высшем образовании выдвигается ориентация на овладение компетенциями, готовность осуществлять научно-исследовательскую деятельность. Дисциплина «Материаловедение и технология конструкционных материалов» входит в базовую часть профессионального цикла учебного направления бакалавриата 35.03.06 «Агроинженерия» и базируется на курсах химии, физики, информатики.

Цель настоящего исследования – разработка алгоритма проведения интерактивного занятия по вышеуказанной дисциплине. Важную роль при проведении занятия играет наличие приборов для микроскопии в учебной аудитории, что позволяет практически закрепить теоретическое изучение структуры металлических сплавов различного химического состава, а также получить информацию визуально при ознакомлении с работой оборудования.

Для расширения диапазона приобретаемых студентами знаний в учебную практику входит проведение мастер-классов в лабораториях Института металлургии УрО РАН, оснащенных современной аналитической аппаратурой, при участии высококвалифицированных специалистов.

Таким образом, проведение экскурсий и мастер-класса в Институте металлургии позволяет глубже понять изучаемый материал, способствует формированию компетенций, расширению навыков эксперимента, структурированию новых знаний и может быть рекомендовано к дальнейшему практическому использованию.

СОЗДАНИЕ ПРАКТИКО-ОРИЕНТИРОВАННОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ШКОЛЫ В УРФУ

Селезнева И.С., Шабунина О.В., Иванцова М.Н., Безматерных М.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, Мира, 19, e-mail: i.s.selezneva@urfu.ru

В Химико-технологическом институте (ХТИ) УрФУ создана Практико-ориентированная химическая школа (Школа), в которую могут быть зачислены ученики общих и специализированных 8-11 классов химического и химико-биологического профиля школ, лицеев и гимназий г. Екатеринбурга.

Создание и функционирование Школы направлено на решение следующих задач:

1. профориентация и преобразование спонтанного интереса школьников к химическим наукам в профессиональные знания;
2. формирование у школьников практических навыков выполнения химического эксперимента, анализа и интерпретации полученных результатов;
3. организация сопровождения научных проектов учащихся;
4. формирование высоко подготовленного контингента абитуриентов, планирующих обучение в бакалавриате и магистратуре институтов УрФУ по химическим, химико-технологическим и биотехнологическим направлениям.

Программа Школы предусматривает проведение лабораторных и практических занятий, научных исследований на базе ХТИ УрФУ и институтов УрО РАН по различным направлениям общей, органической, аналитической и физической химии, биотехнологии с использованием современного приборного физико-химического парка. Выпускники Практико-ориентированной химической школы получают соответствующие сертификаты, в дальнейшем при поступлении в ХТИ УрФУ смогут продолжить заниматься научно-исследовательской деятельностью при обучении в бакалавриате и магистратуре.

Таким образом, реализация разработанной нами Концепции непрерывного образования «Школа—бакалавриат—магистратура—аспирантура» в УрФУ в дальнейшем приведет к формированию учебно-научного кластера, интегрирующего возможности высшей школы и УрО РАН, развитию гибкой уровневой системы подготовки специалистов, способных к проведению фундаментальных и прикладных исследований по актуальным направлениям создания перспективных материалов, их анализу, стандартизации и сертификации, разработке и реализации энерго- и ресурсосберегающих, малоотходных, а также нанотехнологий в науке и производстве.

О ВАРИАНТЕ НОВОГО УЧЕБНИКА ХИМИИ В СВЕТЕ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Сироткин О.С., Сироткин Р.О.

*Казанский государственный энергетический университет,
420066, Казань, Красносельская, 51, e-mail: rsir@mail.ru*

Современная химия раздроблена на множество (около 100) отдельных дисциплин. Это сопровождается тотальной «подменой» химических основ этой важнейшей естественно-научной дисциплины физическими теориями (классический пример редукционизма). Это привело к определенному регрессу в изучении химической формы движения материи и кризису в химическом образовании. В результате большинство традиционных учебников по химии при всей их информативности дают обучаемым *частные и избыточные физико-химические знания в ущерб фундаментальным системным и необходимым химическим.*

В учебнике, созданном авторами настоящего сообщения, обобщены современные начала общей и неорганической химии с опорой на ряд базисных научных химических инноваций. Это основные положения *теории химического строения вещества А.М. Бутлерова*, положенные в основу *единой теории строения химических соединений, единая модель химической связи элементов и Система химических связей и соединений*, объединяющая базовые гомо- и гетероядерные классы неорганических химических соединений. В результате, в основе данного учебника лежит современная парадигма изложения химии в виде симбиоза идей А.М. Бутлерова и Д.И. Менделеева в рамках логической цепочки понятий *«состав и тип химической связи элементов – химическое строение – свойство вещества»*.

В результате, главным достоинством настоящего труда является более точное, по сравнению с традиционными учебниками, раскрытие индивидуальности предмета химии и фундаментальных отличительных черт этой дисциплины от других естественных наук (физики и т.д.). Учебник удачно сочетает системность и универсальность подходов к изложению основных классов химических соединений и разделов этой важнейшей естественнонаучной и учебной дисциплины. Особое внимание отведено раскрытию химического смысла явлений, изучаемых в этой дисциплине, раскрывающих специфику материального объекта исследования этой науки, в виде химического соединения элементов (химического вещества), ее предмета, особенностей химической структуры вещества, свойств (химические превращения и т.д.) и областей практического использования.

Учебник рекомендован в качестве универсального руководства при изучении фундаментальных основ современной общей и неорганической химии для студентов бакалавров и магистров всех направлений и специальностей.

ФОРМИРОВАНИЕ СПЕЦИАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ В КУРСЕ НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ В ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ

Скорик Н.А.

*Томский государственный университет,
634050, Томск, проспект Ленина, 36, e-mail: skorikninaa@mail.ru*

Необходимость создания предметных, специальных компетенций в вузе определяется тем, что в основе ФОГС лежит деятельностно-компетентностный подход в обучении, характеризующийся связью дидактических единиц: знания–умения–навыки–опыт деятельности. Профессиональные компетенции понимаются как совокупность общих, общепрофессиональных (ОПК) и специальных компетенций.

Профессиональные компетенции «академического бакалавра» соответствуют научно-исследовательской деятельности, педагогической деятельности в общеобразовательных учреждениях. Специальными компетенциями¹ бакалавра, которые формируются при обучении неорганической химии в университете, являются: познавательные (когнитивные) компетенции – понимание особенностей химической формы организации материи, знание основных этапов, закономерностей, истории и тенденций развития неорганической химии, места и ее роли в жизни современного общества, владение ее понятийным аппаратом, знание и понимание важнейших концепций, принципов, законов и теорий неорганической химии, понимание общей структуры курса и взаимосвязи ее со смежными дисциплинами, использование основ химических знаний для формирования мировоззренческой позиции и естественнонаучной картины мира; практические компетенции связаны с работой в химической лаборатории (навыки химического эксперимента, навыки работы на современных учебно-научных приборах и оборудовании, владение методами безопасной работы и обращения с химическими материалами); будущие профессиональные компетенции студентов университета прогнозируются, моделируются в учебной деятельности (уметь находить связи, отбирать содержание обучения курса неорганической химии для будущей научно-исследовательской и педагогической деятельности). В работе приводятся специальные компетенции, формируемые в результате освоения студентами первого курса химического факультета дисциплины “Неорганическая химия”, которые составлены на основе двух уровней ОПК – базовом и углубленном.

Литература

1. Гавронская Ю.Ю. Изв. Российского ГПУ им. А.И. Герцена, 2008, № 10 (64), 171.

СИСТЕМА ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНЫХ ДИСЦИПЛИН «EASYCHEM»

**Скосырева Н.С., Ординарцева А.В., Карпов В.В., Дедюхин А.С., Шабунина О.В.,
Баскакова С.А., Галайда А.П.**

*Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, 620002, Екатеринбург, Мира, 19, e-mail: skosyreva.nataly@mail.ru*

Непопулярность естественных наук среди школьников приводит к уменьшению спроса на технические специальности в ВУЗах, низкой конкуренции среди абитуриентов и, как результат, невысокой квалификации выпускаемых специалистов. Отсутствие интереса у школьников связано с непониманием, как преподаваемый материал связан с реальной жизнью.

Для решения этой проблемы группой инициативных студентов, выпускников и сотрудников УрФУ была создана программа дополнительного образования по химии «EasyChem», состоящая из трех этапов - научно-популярное шоу по химии и химическая игра-квест, химический турнир школьников, открытая школа по химии. Данная система может быть аналогичным образом реализована для физики и биологии.

Первый этап призван привлечь внимание школьников к химии как предмету, дать возможность самостоятельно провести эксперимент, приложить свои знания к решению игровых задач и удивиться красочности этой науки. В 2015/16 учебном году в шоу и игре приняло участие более 1000 человек.

Химический турнир - это командное соревнование по решению практических химических кейсов, заведомо не имеющих точного решения. В ходе заочного этапа команды ищут ответы на задачи из предложенного комплекта и посещают тематические лекции. Команды, прошедшие квалификацию, очно защищают свои решения в ходе научного боя друг с другом перед компетентным жюри из числа преподавателей ВУЗов и представителей химических производств. Химический турнир школьников в 2015 году собрал 42 команды из Екатеринбурга и Свердловской области.

Турнир зарекомендовал себя, как формат обучения, инициирующий собственный исследовательский интерес у участников, развивающий как компетенции необходимые для ведения научной деятельности (умение выдвигать, подтверждать и опровергать гипотезы), так и навыки, необходимые для любого современного человека (ведение дискуссии и презентация собственной идеи).

В ходе третьего этапа школьники могут посетить открытые лекционные и лабораторные занятия у преподавателей ВУЗов для углубления своих знаний, а также посетить профильные предприятия химической отрасли.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ОБЩЕОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПРОГРАММЫ ХИМИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ В МАЛОЙ АКАДЕМИИ НАУК РС(Я)

Соколова М.Д.^{а,б,в} **Егоров В.А.**^{а,б} **Курнева М.В.**^а **Спиридонов А.М.**^{а,б}

^аМалая академия наук республики Саха (Якутия),

678011, Республика Саха (Якутия), Чапаево, Г. Саввина, 1

^бСеверо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова,

677007, Якутск, Белинского, 58

^вИнститут проблем нефти и газа СО РАН, 677007, Якутск, Автодорожная, 20,

e-mail: marsokol@mail.ru

В июле 2015 г. Физико-математический форум “Ленский край” при министерстве образования Республики Саха (Якутия) преобразован в государственное автономное учреждение дополнительного образования Республики Саха (Якутия) «Малая академия наук Республики Саха (Якутия)» (МАН РС(Я)). Основной задачей нового учреждения является расширение форм работы с одаренными детьми.

Кафедра химии наряду с проведением учебно-тренировочных сборов по подготовке школьников к олимпиадам различного уровня, начала работу по индивидуальному и дистанционному графику обучения наиболее перспективных школьников. Это дает возможность общения преподавателя и обучающегося не периодически, а в течение всего учебного года и, конечно, способствует повышению качества подготовки к олимпиадам. На базе МАН РС(Я) проведена первая в истории ведущих школ России СУНЦ МГУ и СУНЦ НГУ совместная летняя школа для 100 лучших учащихся Республики.

Самым значимым изменением деятельности кафедры химии в связи с созданием МАН РС(Я) является повышенное внимание к организации научно-исследовательской работы учащихся. К этой форме деятельности привлекаются ученые СВФУ им. М.К. Аммосова и институтов Якутского научного центра СО РАН. Создано 29 региональных отделений МАН РС(Я). В рамках работы организуются комплексные научные экспедиции школьников, летние школы-экспедиции практически на всей территории РС(Я). Таким образом, учащиеся Республики имеют возможность заниматься НИР по реальным перспективным направлениям науки, большинство исследований проводятся с использованием уникального местного материала. Академия вошла в Школьную лигу Роснано, получила статус STEM-центра.

ОПЫТ РЕАЛИЗАЦИИ ПРОГРАММЫ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПЕРЕПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ХИМИИ В ВОРОНЕЖСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

Томина Е.В., Сладкопевцев Б.В.

*Воронежский государственный университет,
394006, Воронеж, Университетская пл., 1, e-mail: tomina-e-v@yandex.ru*

Дополнительное образование направлено на удовлетворение образовательных и профессиональных потребностей, профессиональное развитие человека, обеспечение соответствия его квалификации меняющимся условиям профессиональной деятельности и социальной среды. Одним из путей осуществления дополнительного образования является реализация программы профессиональной переподготовки. Программа профессиональной переподготовки направлена на получение компетенции, необходимой для выполнения нового вида профессиональной деятельности, приобретение новой квалификации.

В Воронежском госуниверситете на химическом факультете в течение 6 лет реализуется программа профессиональной переподготовки «Преподаватель» по направлению «Химия». Данная программа профессиональной переподготовки имеет целью формирование у обучающихся профессиональных компетенций, необходимых для выполнения нового вида профессиональной деятельности, а именно педагогической, и приобретения новой квалификации «Преподаватель». Программа предназначена для лиц, имеющих или получающих высшее образование по направлению «Химия», и желающих получить дополнительную квалификацию преподавателя среднего учебного заведения по предмету базовой подготовки. Полученные в результате освоения программы профессиональные компетенции, умения и знания непосредственно могут быть использованы в практической деятельности педагогических работников учреждений среднего общего и среднего профессионального образования.

В рамках учебного плана программы 10 недель отводится на педагогическую практику в базовых школах. В качестве итоговой аттестации выступают квалификационный междисциплинарный экзамен и выпускная квалификационная работа. В последнее время наблюдается резкое возрастание интереса учащихся химического факультета ВГУ к приобретению новой квалификации, о чем свидетельствуют следующие цифры: в 2015 году присвоена квалификация «Преподаватель» 44 обучающимся, а набор на программу составил 51 человек.

**ХРОНИКИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ:
МВЖК – 2-ой МГУ – МИТХТ –
МОСКОВСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Яковлева Г.Н., Богатилов Б.Ф.

*Московский технологический университет (МИТХТ),
117571, Москва, проспект Вернадского, 86, e-mail: muzey@mitht.ru*

*«История не учительница, а надзирательница: она ничему не учит, но жестоко
наказывает за незнание уроков»*

В.О. Ключевский

Рассматриваются исторические аспекты становления и совершенствования химико-технологического образования в России (ХТО) на примере Московского института тонкой химической технологии, роль профессорско-преподавательского состава, методы и системы преподавания, проведение научных исследований, проблемы и перспективы ХТО на различных этапах развития.

Московский институт тонкой химической технологии имени М.В. Ломоносова – один из старейших ВУЗов страны. История его создания и непрерывного существования как Высшего учебного заведения начинается с 1 июля 1900 г. и охватывает следующие этапы:

- История физико-математического факультета Московских Высших Женских Курсов (МВЖК), 1900 – 1918 гг.
- История химического факультета II-го Московского Государственного Университета, 1918 – 1930 гг.
- МИТХТ - Институт тонкой химической технологии имени М.В. Ломоносова, Академия тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова, Университет тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Московский технологический университет (МИТХТ), 1930 – 2015 гг.

Литература

1. Кафтанов С.В. Химическое и химико-технологическое образование. <http://www.xumuk.ru/>
2. Тимофеев В.С. Московской государственной академии тонкой химической технологии им. М.В. Ломоносова 110 лет. *Вестник МИТХТ*, Т.V, Юбилейный выпуск, 2010. С. 2-15.
3. Очерки истории МИТХТ: сб. статей. – М.:МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2010. -172 с.

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

ИННОВАЦИОННАЯ ДИСЦИПЛИНА ДЛЯ ПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПО НАПРАВЛЕНИЯМ ТЕХНОЛОГИИ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ

Блохин Ю.И., Яркова Т.А., Соколова О.А.

*Московский государственный университет технологий и управления
им. К.Г. Разумовского, 109004, Москва, Земляной вал, 73, e-mail: tat772003@list.ru*

Московский государственный университет технологий и управления им. К.Г. Разумовского (ПКУ) (МГУТУ) готовит бакалавров и магистров по таким направлениям пищевой и перерабатывающей промышленности, как «Продукты питания из растительного сырья», «Продукты питания животного происхождения», «Технология продукции и организация общественного питания». Эти направления подготовки требуют формирования у обучающихся компетенций, позволяющих на научной базе разрабатывать технологические процессы переработки пищевого сырья, основу которого составляют белки, липиды, углеводы и пищевые добавки, не рассматривающиеся в этом контексте в курсе «Органическая химия». Поэтому на кафедре «Органическая, физическая и коллоидная химия» МГУТУ разработана и внедрена в учебный процесс инновационная дисциплина – «Органическая химия в пищевых биотехнологиях» («ОХ в ПБ»), призванная служить своеобразным «мостиком» между циклами естественно-научных и специальных дисциплин. В рамках курса готовится к изданию учебник и издан лабораторный практикум,¹ где на высоком научном и педагогическом уровне представлен материал о специфических химических реакциях и механизмах некоторых из них, протекающих при различных процессах технологической обработки пищи, влиянии условий проведения процессов на выход, свойства и качество готового продукта, обсуждается воздействие некоторых химических веществ, присутствующих в пище, на человеческий организм. Осваивается классификация, способы получения и безопасность пищевых добавок. Изучение дисциплины «ОХ в ПБ», вызывающей у студентов большой профессиональный интерес, проводится с позиций органической химии, помогая будущим технологам пищевой и перерабатывающей промышленности применять теоретические знания в прикладном аспекте. Таким образом, реализация дисциплины «ОХ в ПБ» в рамках ФГОС весьма актуальна, её необходимость обусловлена потребностью производства на формирование зрелого инженерного взгляда у молодых специалистов на переработку пищевого сырья.

Литература

1. Блохин Ю.И., Яркова Т.А., Канидьева В.И. Органическая химия в пищевых биотехнологиях. Лабораторный практикум.- М.: Изд-во РУДН, 2015.- 56 с.

СОЦИАЛЬНЫЕ СЕТИ КАК ИНСТРУМЕНТ ПОПУЛЯРИЗАЦИИ ХИМИЧЕСКОЙ НАУКИ

Васипов В.В.,^а Евсюков А.И.^б

^а*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
194021, Санкт-Петербург, Новороссийская, 50*

^б*Средняя общеобразовательная школа №232, 190068, Санкт-Петербург,
наб. Крюкова канала, 15 а, e-mail: Chemist-TNV@yandex.ru*

Влияние социальных сетей на жизнь современного общества, в особенности, молодежи трудно переоценить. Зачастую школьники проводят в социальных сетях большую часть свободного времени.

С целью популяризации химической науки и помощи школьникам в её изучении в социальной сети «ВКонтакте» был создан и более 4 лет успешно существует проект «Химик»¹, насчитывающий свыше 90 000 пользователей. Популяризация химии, а также образовательный элемент были и остаются главной идеей проекта, однако, развиваются и другие направления: обмен литературой, поиск научных статей, он-лайн общение между преподавателями и студентами/школьниками.

Пользователями проекта в первое время его существования были в основном, подростки, но в настоящий момент среди пользователей есть преподаватели, научные сотрудники, химики-производственники, представители смежных с химией дисциплин. Таким образом, на одной интернет-площадке оказались собраны самые разные специалисты, способные содействовать друг другу в решении широкого круга вопросов.

Образовательная составляющая проекта, помимо серьёзной мультимедийной коллекции, представлена научными конкурсами для школьников, сопровождаемых призами от компаний-спонсоров. Также стоит отметить, что «Химик» является навигатором в мире химической науки для начинающих и практикующих учёных: регулярные анонсы различных конференций, выставок и химических турниров находят бурный отклик среди читателей. С организаторами многих мероприятий «Химик» давно и плодотворно сотрудничает, являясь официальным информационным партнёром.

Таким образом, можно утверждать, что социальные сети – мощный, но на сегодняшний день недооцененный инструмент, позволяющий развивать интерес к химии среди подростков, помогать химикам в повседневной работе и популяризировать химическую науку.

Литература

1. Научно-образовательный проект «Химик» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://vk.com/himik_psihopat

ПРИКЛАДНАЯ НАПРАВЛЕННОСТЬ РАЗДЕЛОВ «СУДЕБНОЙ ХИМИИ» В ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ПОДГОТОВКЕ ВЫПУСКНИКОВ БАКАЛАВРИАТА ПО НАПРАВЛЕНИЮ «ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ОБРАЗОВАНИЕ»

Ведерникова Т.Г.

*Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумуллы,
450000, Уфа, Октябрьской революции, 3-а, e-mail: tatyana.ved@gmail.com*

В связи с переходом на уровневую систему подготовки «бакалавр-магистр», в том числе с двухпрофильной пятилетней подготовкой бакалавров, необходимо обеспечить профессиональную подготовку бакалавров в том же объеме, какой был при пятилетней подготовке учителя химии и биологии. В настоящем сообщении предпринята попытка внедрить идею повышения познавательного интереса студентов к химии путем использования разделов «Судебной химии» в курсовых и ВКР, являющихся важнейшими формами СРС. Темы работ предлагались в соответствии с научной тематикой учреждений, на базе которых выполнялись работы, и с учетом научных интересов студентов. Начиная со 2 курса обучения, студентами проводился информационный поиск материала по теме «Действие ядовитых неорганических веществ на организм человека». Результатом эффективности поиска явилось выполнение курсовой работы реферативного характера, включающей характеристику мышьяка, физические и химические свойства наиболее важных его соединений, способы качественного обнаружения мышьяка, историческую информацию и др. Также были выполнены курсовая и ВКР на тему «Судебная химия бытовых ядов». В работе приведены данные о классификации и причинах отравлений дихлорэтаном (ДЭ), карбофосом (КФ) и этиленгликолем (ЭГ); физические и химические свойства данных веществ; подробно описано воздействие их на организм человека (токсикодинамика, клиника отравлений, патоморфологические изменения, первая помощь при отравлениях), а также методы изолирования КФ и ЭГ из трупного материала; частные методики доказательств отравлений препаратами этих групп; современные способы и методы их обнаружения. В экспериментальной части, выполненной в отделе химической экспертизы патолого-анатомического отделения г.Уфы, приведены результаты качественного определения ЭГ с помощью специфических реакций и методом ТСХ, исследование КФ и ЭГ методом ГЖХ.

Опыт использования разделов судебной химии при выполнении курсовых и ВКР будет способствовать развитию профессиональных компетенций будущих учителей химии и биологии.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ CASE STUDY В ПРЕПОДАВАНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Егорова О.А.

*Российский университет дружбы народов, 117198, Москва, Миклухо-Маклая, 6,
e-mail: oaedorova@mail.ru*

Метод Case Study, разработанный для эффективного обучения экономическим наукам, применим, и логично встраивается в систему химических знаний при подготовке высококвалифицированных специалистов-геологов.

В данной работе представлены результаты внедрения научно-исследовательского Case Study по дисциплине «Аналитическая химия» в обучение студентов инженерного факультета направления 130100 «Геология и разведка полезных ископаемых» специальности «Геология (нефть и руда)» Российского университета дружбы народов.

Целью данной работы явилось развитие креативности и познавательной активности студентов-геологов, приобретения умений и навыков решения практических задач, совместной работы в мини-группах, участие в пресс-конференциях с демонстрацией презентаций, а также формирование профессиональной направленности процесса обучения.

Методически разработаны, дидактически сформированы и структурированы конкретные контрольные Single-Case Study в отдельных темах качественного анализа смесей катионов и анионов как в растворе, так и в смеси сухих солей. Особенно ценны такие кейсы в теме «Анализ минерала», так как ориентированы на осуществление исследовательской деятельности студента-геолога.

Case Study - метод эвристического обучения - включает в себя повторение теоретического материала курса, обсуждаемого на лекциях и практических занятиях, изучение дополнительной литературы. Кейсы формируют научную самостоятельность, умение анализировать, исключают шаблонность мышления, так как не стандартная постановка цели побуждает студента к активной научно-исследовательской работе, что в конечном итоге, способствует подготовке инициативных специалистов, умеющих широко и творчески мыслить.

Целесообразность применения этого инновационного метода обучения показала, что преимущественно студенты аргументировано справляются с решением предлагаемых Case Study, достаточно качественно применяя полученные ранее знания. Тем не менее, аналитическая химия - наука экспериментальная, и поэтому заменить традиционные формы обучения интерактивными можно лишь частично.

СИСТЕМА ПОЛУЧЕННЫХ НА МЕЖПРЕДМЕТНОЙ ОСНОВЕ ПОНЯТИЙ О БИОГЕННЫХ ЭЛЕМЕНТАХ ПРИ ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Имангалиева Б.С., Биманова А.И.

*Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова,
030000, Актобе, проспект А.Молдагуловой, 34, e-mail: nur_b_70@mail.ru*

Гармония человека и окружающей среды, экологическое равновесие и среда обитания являются основными вопросами в мире. Основной стержень этого инновационного будущего лежит в развитии науки и знаний естественных дисциплин, в качестве составной части химико-экологического образования и воспитания.

Биогенные элементы – химические элементы, постоянно входящие в состав организмов и выполняющие жизненнонеобходимые биологические функции. Содержание тех или иных элементов в организмах зависит не только от их видовых особенностей, но и от состава среды, пищи, экологических особенностей организма и других факторов^{1,2}.

Разрешение образовательно-воспитательных проблем общества предполагает совершенствование аксиологической подготовки будущего учителя, от которой будут зависеть духовное здоровье нации, уровень химико-экологической просвещенности молодых граждан, успешность их адаптации к новым социально-экономическим условиям и конкурентоспособность на рынке труда.

Цель исследования: научно-теоретическое обоснование системы понятий биогенных элементов и основ методики ее успешного формирования посредством межпредметной связи химии и биологии в общеобразовательной средней школе. В школьной программе процесс биогеохимической экологии формируется при изучении круговорота биогенных элементов. Главным условием формирования понятия и систем понятий является полное раскрытие содержания каждого из них не отдельно, а наоборот, при сохранении их теоретической системности, соблюдая взаимные связи и учитывая отношения. Проведение уроков, включающих всевозможные с точки зрения межпредметных связей химии и биологии современные экологические сведения, дает учащимся возможности для осознания связей и системного восприятия материала. Совершенствование системы химико-экологического образования, разработка элективного курса на основе проведенной работы.

Литература

1. Фирсов Н.Н. «Микробиология: словарь терминов». М: Дрофа, 2006 г.- 256 с.
2. Башкин В.Н., Касимов Н.С. Биогеохимия. М., 2004 г.- 648 с.

ПРОГРАММА КУРСОВ "АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ" И "ИНСТРУМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА" ПРИ ПЕРЕХОДЕ НА СТАНДАРТЫ ФГОС ВО (3+)

Крылова Е.В., Кузнецов В.В., Шалимова Е.Г.

*Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
125047, Москва, Миусская площадь, 9
e-mail: kuzn@muctr.ru; elizaveta.shalimova@yandex.ru*

В условиях введения в практику обучения новых стандартов ФГОС ВО (3+) возникает необходимость создания учебных программ, обеспечивающих построение содержания курса и оценку формируемых компетенций бакалавров и специалистов соответственно требованиям данных стандартов.

На кафедре аналитической химии РХТУ имени Д.И. Менделеева разработана Примерная программа, отвечающая требованиям стандарта ФГОС ВО (3+). Программа составлена для направлений "Химическая технология", "Биотехнология", "Энерго- и ресурсосбережение" и включает 8 зачетных единиц, соответственно, для базовой части ("Аналитическая химия") – 5 зачётных единиц и для вариативной части ("Инструментальные методы химического анализа") – 3 зачётных единицы. Программа включает: цели и задачи курса "Аналитическая химия", компетенции бакалавра в области курса "Аналитическая химия", объём дисциплины и виды учебных работ, содержание дисциплины, рекомендуемый перечень лабораторных работ, примерный перечень контрольных работ, учебно-методическое обеспечение дисциплины "Аналитическая химия".

По содержанию обе части объединены концепцией аналитического сигнала, что позволяет рассматривать идентификацию ионов элементов в растворе и количественный химический анализ в едином ключе с применением как химических, так и инструментальных методов анализа для определения содержания компонентов объекта. Подобное представление учебного материала даёт возможность студентам более эффективно решать задачи химического анализа любой степени сложности и практического, и теоретического характера, что способствует формированию соответствующих компетенций.

В программе предусмотрено представление содержания курсов "Аналитическая химия" и "Инструментальные методы химического анализа" в виде модулей.

ПОДХОДЫ К СОСТАВЛЕНИЮ КОНТРОЛЬНО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ МЕЖРЕГИОНАЛЬНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ОЛИМПИАДЫ КФУ

Курамшин А.И., Колпакова Е.В., Плотникова А.В., Хайруллина Г.А.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова, 420008, Казань, Кремлевская, 18, e-mail: fea_naro@mail.ru

Наряду с участием преподавателей и сотрудников Химического Института Казанского федерального университета в повышении компетентности учителей химии и их учащихся в подготовке к решению заданий различных форм государственной итоговой аттестации¹, одной из форм работы КФУ с учащимися является проведение Межрегиональной химической олимпиады школьников, а важным элементом методического сопровождения этого мероприятия является составление соответствующих КИМ.

Олимпиада проводится в два этапа – содержание первого (заочного тура) представлено 15 заданиями, составленными по форме заданий базовой и повышенной сложности ЕГЭ по химии и с учетом его спецификаций; второй (очный) этап проводится в классической для предметных олимпиад форме, и роль КИМ здесь выполняют задания, требующие развернутого ответа.

Поскольку цель заданий базовой сложности ЕГЭ по химии – проверка знаний учащихся, а цель первого этапа олимпиады заключается в определении умений и навыков её участников, в данном случае должен быть реализован отличный от методического наполнения заданий ЕГЭ содержательный подход к составлению тестовых контрольно-измерительных материалов. Различие заключается в том, что для решения тех задач, которые ставит перед собой ЕГЭ или ОГА, допустимо составление открытого тестового задания, в котором для учащегося, освоившего базовый школьный курс химии на среднем уровне, правильный вариант ответа будет очевиден в силу явной ошибочности неправильных ответов. Для олимпиады такой подход недопустим – в данном случае необходимо, чтобы помимо правильного и заведомо неправильного вариантов ответа на выбор конкурсанту были бы даны неправильные ответы, выявить которые можно не за счёт воспроизводства своих знаний, а за счёт умения их применять. Формулировка таких неправильных ответов представляет собой наибольшую сложность для составителя конкурсных заданий.

Литература

1. Гильманшина С.И., Курамшин А.И., Халикова Ф.Д. Методика решения заданий единого государственного экзамена по общей и неорганической химии: учебное пособие. 2016. – Казань: Изд-во Казан. ун-та – 188 с.

ПОДГОТОВКА УЧАЩИХСЯ К ПРОЕКТНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ В УСЛОВИЯХ ПЕРЕХОДА НА ФГОС ООО

Лисун Н.М., Студеникина Л.Ю.

*Челябинский государственный педагогический университет,
454074, Челябинск, Бажова, 48, e-mail: lisun@list.ru*

Процесс формирования у учащихся проектной деятельности актуален в связи с введением нового федерального государственного образовательного стандарта основного общего образования. Нами велась разработка и реализация педагогических приемов организации учебной работы по использованию проектных задач на уроках химии как средства формирования проектной деятельности учащихся.

На основе проведенного анализа научных исследований и практики работы школ была выдвинута гипотеза исследования: *создание условий для вовлечения учащихся в процесс решения и составления проектных задач на всех этапах урока и элективно-го курса может способствовать эффективному формированию у учащихся готовности к реализации проектной деятельности.*

В психолого-педагогической литературе используются понятия "ситуационная задача", "контекстная задача", "практико-ориентированная задача", "задача с практическим содержанием". Проанализированные нами типы задач носят деятельностный характер, что соответствует требованиям ФГОС ООО, и могут стать компонентами методики подготовки учащихся к реализации проектной деятельности.

Под проектной задачей мы понимали задачу, в которой через систему или набор заданий целенаправленно стимулируется система детских действий, направленных на получение ещё никогда не существовавшего в практике ребёнка результата («продукта»), и в ходе решения которой происходит качественное самоизменение учащихся.

Мы предлагаем использовать проектные задачи, как на разных этапах урока химии, так и во внеурочной деятельности. Определены критерии сформированности готовности учащихся к проектной деятельности. Составленные учащимися проектные задачи по химии можно представить как результат самостоятельной проектно-исследовательской деятельности. В процессе этой деятельности обучающиеся учатся находить, анализировать, перерабатывать информацию, создавать и представлять информационный продукт.

Литература

1. Акулова О.В. Конструирование ситуационных задач для оценки компетентности учащихся [Текст]: Учебно-методическое пособие для педагогов школ / О.В. Акулова, С.А. Писарева, Е.В. Пискунова. - СПб.: КАРО, 2008. - 96 с.
2. Жулькова Н.В. Роль и место ситуационных задач в современном уроке. [Текст] / Жулькова Н.В. // Химия в школе. – 2013. – №9 – С.45 - 48.

НОВЫЕ ПОДХОДЫ К ПРЕПОДАВАНИЮ ХИМИЧЕСКИХ ДИСЦИПЛИН СТУДЕНТАМ – ТЕХНОЛОГАМ ПИЩЕВОЙ И ЛЕГКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

**Неделькин В.И., Зачернюк Б.А., Соловьева Е.Н., Чернова Н.С.,
Захарова С.В., Никитина Т.С.**

*Московский государственный университет технологий и управления
им. К.Г. Разумовского, Москва, Земляной вал, 73, e-mail: zachern@rambler.ru*

Качественная подготовка студентов-технологов пищевой и легкой промышленности невозможна без тщательного освоения химических дисциплин. Учитывая практически ежегодное сокращение часов плановых аудиторных занятий по химическим дисциплинам, отводимых студентам учебными планами, требуется не только совершенствовать традиционные технологии обучения (лекции, лабораторные, практические занятия и т.д.) и вынужденно адаптировать их, но и использовать новые, в частности, обучение по дополнительным образовательным программам (ДОП).

В целях повышения уровня химического образования будущих технологов пищевой и легкой промышленности преподавателями кафедры «Неорганическая и аналитическая химия им. Клячко Ю.А.» был разработан ряд ДОП: «Избранные главы общей и неорганической химии», «Аналитический контроль качества и безопасности продукции пищевых биотехнологий», «Химические материалы и процессы в текстильной и легкой промышленности» и др. Каждая из этих программ состоит из нескольких разделов, которые не дублируют содержание традиционных учебных дисциплин. Слушатель может выбрать один или несколько разделов программы, согласно направлению подготовки. Обучение по ДОП помогает студенту получить более полное представление о химических науках и овладеть соответствующими компетенциями. Учитывая ограниченное время контакта с преподавателем в аудитории в рамках реализации основной образовательной программы, использование ДОП особенно полезно для студентов заочной формы обучения.

Сочетание в учебном процессе традиционных технологий обучения, самостоятельной работы и обучения по ДОП положительно сказывается на результатах аттестации знаний студентов.

Разработанные программы также рассчитаны и на внешних слушателей.

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ В РЕАКЦИИ $\text{Fe}^{3+} + 2\text{I}^- \rightleftharpoons \text{Fe}^{2+} + \text{I}_2$: ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Николайчук П.А., Куваева А.О.

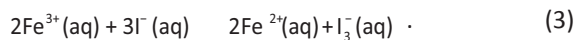
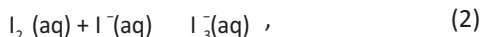
*Челябинский государственный университет,
454001, Челябинск, Братьев Кашириных, 129, e-mail: nra@csu.ru*

Реакция в растворе между ионами железа (III) и иодид-ионами



прекрасно подходит для демонстрации концепции химического равновесия студентам. Этот эксперимент включён в классические и современные руководства к лабораторному практикуму по физической химии^{1,2} и широко используется в российских университетах. Однако, оригинальная методика содержит очень серьёзную методологическую ошибку. Определение равновесных концентраций основано на допущении о том, что йод, выделяющийся в реакции (1), титруется тиосульфатом натрия. Однако, это неверно, поскольку тиосульфат реагирует не только с йодом, но и с ионами железа

с образованием комплекса $[\text{Fe}(\text{S}_2\text{O}_3)_2]^{-}$. Кроме того, оригинальный эксперимент принимает во внимание только образование свободного йода и не учитывает возможного протекания следующих реакций:



Протестировано множество методов прямого титриметрического определения ионов Fe^{3+} , Fe^{2+} , I^{-} или I_2 в водных средах, и разработан модифицированный вариант эксперимента, основанный на argentометрическом определении иодид-ионов в реакционной смеси. Предложена процедура обработки экспериментальных данных, принимающая во внимание одновременное образование как свободного йода, так и трийодидного комплекса, хотя это значительно усложняет вычисления и требует дополнительных данных о константе равновесия реакции (2). Также обсуждена возможность потенцио-, кондукто- и фотометрического определения точки конца титрования для реакций (1) и (3).

Литература

1. Практикум по физической химии: учебное пособие для вузов. Изд. 3-е, под ред. С.В. Горбачёва. М.: Высшая школа, 1974. 496 с.
2. Практикум по физической химии. Изд. 4-е, под ред. Н.К. Воробьёва. М.: Химия, 1975. 368 с.

ДИСЦИПЛИНА «КОЛЛОИДНАЯ ХИМИЯ НАНОЧАСТИЦ» В ПИЩЕВОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Павлов А.Н., Бондарев Ю.М., Корнилов К.Н.

*Московский государственный университет технологий и управления
им. К.Г. Разумовского, 109004, Москва, Земляной вал, 73, e-mail:pavlov-481@yandex.ru*

В рамках ФГОС ВО нами реализуется новая дисциплина «Коллоидная химия наночастиц» («КХН»). Необходимость этих знаний обусловлена задачей формирования у студентов, обучающихся по пищевым и перерабатывающим направлениям подготовки бакалавров Московского государственного университета технологий и управления (МГУТУ) им К.Г. Разумовского, компетенций, позволяющих на основе изучения общих закономерностей химических и коллоидно-химических процессов, в зависимости от состава и свойств участвующих в них веществ и условий взаимодействия, определить возможность использования нанотехнологий в основных отраслях пищевой промышленности.

Курс «КХН» сформировался на стыке нескольких наук: химии, физики, биохимии, материаловедения, атомной спектроскопии, информатики и представляет собой логическое завершение цикла дисциплин «Физическая химия» и «Коллоидная химия», который рассматривает особые свойства наночастиц, способы их получения, методы определения размеров, объемные и поверхностные свойства. Отличие новой дисциплины от классического курса «Коллоидная химия» состоит в особом акцентировании внимания на особенностях коллоидно-химических свойств наноразмерных объектов пищевых масс. Успешное освоение дисциплины позволяет поднять на новый уровень значимость коллоидных свойств наночастиц в процессах технологической переработки пищевого сырья и готовой продукции, поскольку высокодисперсные системы широко представлены в различных отраслях пищевой промышленности: сахарной (нерастворимая часть диффузного сока), молочной (наноразмерные капли при гомогенизации молока), хлебопекарной (мука, тесто), винодельческой (дисперсная фаза коллоидных систем), крахмалопаточной (частички крахмала), масложировой (создание защитной поверхности сыров) и других.

Основоположником курса «КХН» и автором одноименной научной монографии¹ является старейший профессор МГУТУ им К.Г. Разумовского, д.т.н., заслуженный деятель науки РФ, ветеран ВОВ А.Д. Зимон, который впервые применил коллоидные системы наночастиц для пищевых продуктов.

Литература

1. Зимон А.Д., Павлов А.Н. Коллоидная химия наночастиц. М.: Научный мир, 2012. – 224 с.

ФОРМИРОВАНИЕ КОМПЕТЕНЦИЙ ПРИ ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Павлова Э.Т., Батуева И.С., Баторова Г.Н.

*Бурятский государственный университет,
670000, Улан-Удэ, Смолина, 24а, e-mail: erzhen@mail.ru*

Дисциплина «Химия» входит в базовую часть профессионального цикла образовательных программ подготовки высшего медицинского, фармацевтического, биологического, географического, экологического, геологического образования и является одной из фундаментальных естественных наук, направленных на дальнейшее совершенствование естественнонаучного кругозора личности и способствующих развитию образного мышления и творческому росту выпускников.

Основной целью изучения химии является формирование у обучающихся обще-профессиональных компетенций:

- а) владения базовых знаний фундаментальных разделов химии в объеме, необходимом для освоения химических основ в медицине, фармации, физике, технике, биологии, геологии, экологии и природопользовании;
- б) владения методами и навыками проведения химического эксперимента;
- в) владения знаниями о динамических процессах в живых и неживых организмах, окружающей среде и техносфере;
- г) владения методами отбора и анализа проб, проведения химико-аналитического анализа.

Сложность измерения оценивания компетентности студента в области химии состоит в том, что она проявляется в определенных ситуациях. Преподавателями химического факультета Бурятского государственного университета в целях обеспечения и повышения качества подготовки обучающихся:

- используются новые подходы представления учебного материала, включающие научные трактовки известных понятий, новые современные тенденции и проблемы химии;
- разрабатываются фонды оценочных средств, учитывающие отличительные особенности каждой компетенции, которыми должен обладать выпускник определенной образовательной программы;
- уделяется особое внимание условиям, при которых можно наблюдать и оценивать компетенции;
- применяется балльно-рейтинговая система, предусматривающая получение преимуществ способными студентами, активно и добросовестно занимающихся в течение всего периода обучения химии.

СИСТЕМА ПОДГОТОВКИ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ КАДРОВ В СООТВЕТСТВИИ С ФЦП РФ «РАЗВИТИЕ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ» НА 2014 - 2020 ГОДЫ

Семенова И.В.

*Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ),
107023, Москва, Б. Семеновская, 38, e-mail: vzpi_semenova@mail.ru*

Федеральная целевая программа (ФЦП) РФ «Развитие науки и технологий» на 2014 -2020 утверждена постановлением Правительства РФ от 21.05.2013 № 424. Начиная с 2007 года в МГОУ им. В.С. Черномырдина, а после его реорганизации в МАМИ в 2013 – 2014 проводилась подготовка студентов по методу, созданному в соответствии с основными положениями, сформулированными в государственных программах¹. Обучение студентов проходит на основе передовых достижений науки и технологий, внедренных в отечественную промышленность на протяжении последних 5-10 лет. Для помощи студентам в дополнении к учебникам² создан новый комплекс учебно-методической литературы³⁻⁶, охватывающий все виды учебных занятий.

Литература

1. Семенова И.В. Инновационная методика преподавания дисциплины «Общая химическая технология» при подготовке бакалавров. XIX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии. Т.4 Волгоград. 2011. С.531
2. Семенова И.В. Промышленная экология. Уч. пособие. М: ИЦ « Академия». 2009. - 530с.
3. Губонина З.И., Семенова И.В. Экология и инновации в технологии неорганических веществ. Уч. пос. М; МГОУ. 2011. -. 220 с.
4. Семенова И.В. Общая химическая технология. Ч.1. Сера и серная кислота. Уч. пос. М; МГОУ. 2012. -. 143 с.
5. Семенова И.В. Общая химическая технология. Лабораторно-расчетный практикум. М; МГОУ. 2012. -. 56 с.
6. Семенова И.В. Промышленная экология. Мет. указания. М: МГОУ. 2013. -. 38 с.

РЕГИОНАЛЬНЫЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПРОЕКТЫ ПО ХИМИИ КАК СРЕДСТВО РАЗВИТИЯ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ ИНТЕРЕСОВ ШКОЛЬНИКОВ И ПОВЫШЕНИЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО МАСТЕРСТВА ПЕДАГОГОВ

Соболев А.Е.,^а Исаев Д.С.^б

*^аТверской государственный технический университет,
170026, Тверь, набережная А.Никитина, 22, e-mail: sobolev@tstu.tver.ru*

^бМОУ СОШ №43, 170028, Тверь, Склизкова, 95

Важнейшими задачами Ассоциации учителей и преподавателей химии Тверской области являются содействие интеллектуальному развитию школьников, создание условий для профессионального роста педагогов, популяризация химии и пропаганда химических знаний¹.

Для реализации этих задач Ассоциация ежегодно проводит несколько открытых региональных конкурсов, участие в каждом из которых абсолютно бесплатно как для школьников, так и для их учителей.

Целью конкурса «Мир химии – 2016» является создание открытого каталога авторских учебных презентаций. Конкурс проводится по 21 номинации (презентации по учебным темам, «Имена в истории химии», «Ученые-химики Тверского края», «Химическая книга рекордов», «Химия и другие науки», «Химия будущего» и др.); всего 997 рубрик.

Конкурсы «Оригинальная задача» и «Химическая игротека» направлены на выявление лучших авторских олимпиадных заданий и дидактических игр по химии, популяризацию олимпиадного движения. По итогам каждого конкурса издаются сборники методических разработок.

С целью выявления и поддержки одаренных школьников Ассоциация учителей и преподавателей химии Тверской области ежегодно проводит для всех желающих учащихся 8-10-х классов региональную олимпиаду «Химоня». Олимпиада пользуется большой популярностью – так, в 2015 году в ней приняли участие 262 школьника из 16 муниципалитетов Верхневолжья. Победители «Химони» получают приглашения на бесплатные занятия в Летнюю школу олимпийского резерва, которую Тверская Ассоциация учителей химии также проводит ежегодно.

Созданная система региональных образовательных проектов позволяет активизировать профессиональную деятельность педагогов и повысить интерес школьников к учебному предмету «Химия».

Литература

1. Sobolev A., Isaev D. 8th International Technology, Education and Development Conference INT-ED2014, 2014, Valencia, 2699-2706.

ПРИМЕРЫ РАЗНОУРОВНЕВЫХ ЗАДАНИЙ ПО ХИМИИ

Торсыкбаева Б.Б., Жуманова У.Т.

Университет Астана, Казахстан, 010000, Астана, М. Ауезова, 46/1,
e-mail: maha-1505@mail.ru

Коренная модернизация педагогической системы обучения в школе возможна в рамках использования образовательных технологий, ориентированных на результат и на «среду погружения». Одной из таких технологий является технология «Трехмерной методической системы обучения (ТМСО)». В качестве образца учебного процесса инновационной модели в условиях применения данной технологии приводим разработку одного урока по теме: «Степень электролитической диссоциации. Сильные и слабые электролиты»

Изучение данной темы в работе представлено тремя этапами: а) задания на актуализацию знаний; б) самостоятельное усвоение новой темы;

в) этап обратной связи (этап оценивания уровня формирования знаний и умений)

На первом этапе предлагаются вопросы, раскрывающие механизм процесса электролитической диссоциации.

На втором этапе ученик усваивает основные понятия данной темы: степень электролитической диссоциации (α), ионное произведение воды, pH раствора, константа (K) электролитической диссоциации. Дается понимание основных закономерностей: зависимость степени электролитической диссоциации от различных факторов; связь между степенью диссоциации, константой диссоциации и концентрацией растворов; степень диссоциации слабых электролитов.

Третий этап (оценка знаний) включает 3 уровня: 1-пороговый уровень, 2-алгоритмический уровень, 3-эвристический уровень.

На 1-м уровне оценивается знание основных понятий по теме: электролитическая диссоциация, сильные и слабые электролиты, константа и степень электролитической диссоциации. Дается задание дописать уравнения электролитической диссоциации кислот HI , HCl ; оснований RbOH , NaOH и соли NaCl .

На 2-м уровне ученику предлагаются более сложные задания, например: составьте формулы солей из следующих ионов: а) Na^+ и NO_3^- ; Li^+ и HSO_4^- ; б) K^+ и SO_4^{2-} ; Mg^{2+} и HSO_4^- ; в) Al^{3+} и Cl^- ; Ba^{2+} и HS^- .

На 3-м уровне ученик осуществляет поиск новых путей решения при выполнении теоретических заданий о характеристиках электролитической диссоциации, о классификации электролитов. Для оценки практических умений ученика предлагаются задачи на определение степени электролитической диссоциации и pH растворов электролитов.

Результаты выполненных заданий заносятся в таблицы, которые фиксируются в электронном журнале.

РАЗВИТИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ГРАМОТНОСТИ УЧАЩИХСЯ ПО ТЕМЕ «ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ»

Торсыкбаева Б.Б.,^а Жаналиева Р.Н.^б

^аУниверситет Астана, Казахстан, 010000,

Астана, М. Аuezова, 46/1, e-mail: maha-1505@mail.ru

^бУниверситет Мирас, 160012, Казахстан, Шымкент, Г.Иляева, 3,

e-mail: rashida_zanalie@mail.ru

Основные понятия химии – это «вещество» и «химическая реакция». Каждую секунду в мире происходит неисчислимое множество реакций. Изучение темы «Химические реакции» в работе представлено тремя блоками: а) теоретический; б) интеллектуальный; в) практический¹.

В теоретическом блоке даются задания для определения типов реакций: соединения, разложения, замещения и обмена.

Интеллектуальный блок представлен 5-ю шагами:

1) знать: реакции разложения, соединения, обмена, замещения и с помощью каких опытов можно доказать эти реакции?

2) понимать: какие из приведенных уравнений соответствуют различным типам реакций;

3) проводить: анализ классифициции типов химических реакций по различным признакам;

4) уметь: подвести итог полученных знаний с помощью химических уравнений

5) оценить: типы реакций по характеру и виду взаимодействия.

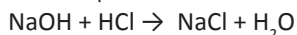
В практическом блоке приводятся опыты на типы реакций:

1. *Реакция разложения*. Разложение калийной селитры. Что наблюдается в результате этой реакции?

2. *Реакция соединения*. Горение красного фосфора. Как доказывается образование кислоты?

3. *Реакция замещения*. Взаимодействие цинка с соляной кислотой. Что вы наблюдали в результате этой реакции?

4. Реакция обмена. Реакция нейтрализации.



Что вы наблюдали в результате этой реакции?

Далее для закрепления темы проводится обучающий тест.

Литература

1. Караев Ж.А. Кобдикова Ж.У. Актуальные проблемы модернизации педагогической системы на основе технологического подхода, Алматы, ТОО «Издательство «Зерде», 2014, 312с.
2. Габриелян О.С. «Химия» методическое пособие 8 – 9 кл. М «Дрофа» 2001.
3. Торсыкбаева Б.Б., Даулетбаева Г.К. «Развитие функциональной грамотности учащихся на уроках химии «Электролитическая диссоциация». «Аруна». г. Алматы. -2013.-с.68.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В ВОЕННОМ ВУЗЕ

Шпилёва Е.В.

*АНО Центр «Наш район - наш дом», 394063, Воронеж, 25 Января, 28,
e-mail: shpilyowa@yandex.ru*

В условиях современной жизни стали предъявляться особые требования к специалистам, которым часто приходится решать нестандартные задачи для обеспечения практического внедрения новых идей. Это в полной мере относится к военным специалистам, которых должны отличать любознательность, энергичность, способность к риску, восприимчивость к новым идеям, оригинальность мышления.

Для воспитания всех этих качеств и повышения эффективности учебного процесса в целом необходимо: 1) развивать в будущем специалисте креативность; 2) добиваться мотивации учебного процесса, формируя естественнонаучное мировоззрение. Сегодняшний выпускник средней школы, а значит и абитуриент, плохо представляет себе единую картину мира, взаимосвязь и взаимопроникновение наук, как инструмент решения многих технических и, очень остро стоящих сейчас, экологических проблем. Поэтому необходимо рассматривать примеры взаимодействия изучаемых наук, их обоюдного обмена идеями, объектами и методами исследования.

Курсант, изучая химию, часто не представляет себе ее практического значения, ее мировоззренческую роль, а о связи естественных наук не задумывается вообще¹. Сейчас уже очевидно, что, только обладая естественнонаучным мировоззрением можно оптимально организовать деятельность человека при ограниченных природных ресурсах. Поэтому привитие естественнонаучного мировоззрения при изучении химии позволит будущим военным специалистам более правильно решать не только узкоспециальные, но и постоянно возникающие серьезнейшие экологические проблемы, которые особенно остро стоят в армейской среде, где считается, что любая боевая задача должна быть выполнена любыми средствами, и только в последнее время начал ставиться вопрос об их адекватности и степени ущерба, наносимого окружающей среде.

Литература

1. Шпилёва Е.В. Пути развития образовательного процесса в военном вузе //Международный научно-исследовательский журнал, Екатеринбург: МНИЖ – 2015. – № 1 Часть 3. – С. 109 - 111.

ОРГАНИЗАЦИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СЛУШАТЕЛЕЙ КУРСОВ ПОВЫШЕНИЯ КВАЛИФИКАЦИИ (НА ПРИМЕРЕ УЧИТЕЛЕЙ ХИМИИ)

Шумилин А.С., Якунина И.Е.

*Институт повышения квалификации и профессиональной переподготовки
работников образования Тульской области,
300041, Тула, Ленина, 22, e-mail: shumilin-as@mail.ru*

Быстрое развитие образования, его модернизация, смена и усовершенствование ведущих парадигм ставит перед организациями дополнительного профессионального образования, постоянно обновляющиеся цели и задачи в их сфере деятельности. Непрерывность профессионального роста – одно из требований ФГОС к кадровому составу педагогического коллектива, осуществляющего образовательную программу. Согласно ФГОС повышение квалификации должно обеспечиваться освоением учителями дополнительных профессиональных программ по профилю педагогической деятельности не реже чем один раз в три года. В связи с этим особую важность приобретает качество образовательных программ курсов повышения квалификации – их содержание, обновление и компетенции которые они формируют, в том числе при выполнении внеаудиторной самостоятельной работы.

В ГОУ ДПО ТО «ИПК и ППРО ТО» для учителей химии реализуются следующие программы: «Актуальные проблемы теории и методики преподавания химии в контексте ФГОС общего образования» (126 ч.), «Биология и химия в школе: отражение современных тенденций и научный эксперимент в школе в контексте ФГОС общего образования» (144 ч.), «Подготовка учащихся к итоговой аттестации по химии в 9 и 11 классах» (36 ч.). Программы построены из модулей, среди которых на изучение предметный модуль является самым крупным.

На долю самостоятельной работы слушателей строго отводится 25% от максимальной учебной нагрузки. Контроль за самостоятельной работой слушателей курсов повышения квалификации осуществляется частично с привлечением дистанционных методов обучения. Так слушатели курсов выполняют «входное» и «выходное» тестирование, а также промежуточные тестирования по каждой теме занятия. Также слушатели на протяжении всего обучения выполняют проектное задание, которое защищают после успешного выполнения «выходного» тестирования. Каждый вид самостоятельной работы оценивается согласно утвержденной бально-рейтинговой системе. Зачет выставляется по достижению минимального порогового значения.



САТЕЛЛИТНЫЕ СИМПОЗИУМЫ

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
В ПЯТИ ТОМАХ**

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016





INTERNATIONAL SYMPOSIUM

FROM EMPIRICAL TO PREDICTIVE CHEMISTRY

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
В ПЯТИ ТОМАХ

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016



КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

INTEGRAL ESTIMATION OF XENOBIOTICS' TOXICITY WITH REGARD TO THEIR METABOLISM IN HUMAN ORGANISM

Dmitriev A.V., Rudik A.V., Filimonov D.A., Lagunin A.A., Druzhilovsky D.S., Ivanov S.M., Tarasova O.A., Pogodin P.V., Konova V.I., Bezhentsev V.M., Poroikov V.V.

Institute of Biomedical Chemistry named after V.N. Orekhovich, Pogodinskaya, 10-8, Moscow, 119121, Russia, e-mail: vladimir.poroikov@ibmc.msk.ru

Most xenobiotics including pharmaceutical agents are metabolized in the human body by the biotransformation enzymes. The biological activity, toxicity, and other properties of the metabolites may differ significantly from those of the initial substances. Based on different principles computational methods are used for modeling of the individual stages of interaction between the xenobiotics and metabolic enzymes¹; there are expert systems that allow building metabolic trees by prediction², and methods that predict only sites of metabolism, without generation of metabolites and metabolic trees. The purpose of our work is to develop a general approach to the assessment of xenobiotics' toxicity based on the prediction of their metabolism in the human body.

We have created a training set containing data about several thousands of reactions catalyzed by the major enzymes metabolizing xenobiotics in the human body. We developed methods for generating structures of metabolites and metabolic trees with estimation of the probability of each metabolite. Then, the general toxicity of xenobiotic is estimated taking into account toxicity of the initial substrate, intermediate and final products of the metabolites. We carried out the validation of the method and showed its applicability to solving practical problems. The advantages and limitations of computer methods of assessment of the toxicity of xenobiotics and scenarios of their use, to improve the safety and efficacy of new pharmaceutical agents, will be discussed.

References

1. Kirchmair J., Williamson M.J., Tyzack J.D., Tan L., Bond P.J., Bender A., Glen R.C. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2012, 52, 617.
2. Long A. *Drug Discovery Today. Technologies*, 2013, 10, 147.

The Russian Science Foundation, grant 14-15-00449, has supported the work.

NEW METHODS OF COMPUTATIONAL MATERIALS DISCOVERY

Oganov A.R.^{a,b,c}

^a*Stony Brook University, Stony Brook, NY 11794-2100, USA, e-mail: artem.oganov@sunysb.edu*

^b*Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo Innovation Center,
Nobelya, 3, Moscow, 143026, Russia*

^c*Moscow Institute of Physics and Technology,
Institutskiy pereulok, 9, Dolgoprudny, 141700, Russia*

Until recently, the problem of computational prediction of materials with desired properties was considered to be unsolvable. Fortunately, a number of methods enabling crystal structure prediction, and methods enabling prediction of properties based on crystal structure, have made this goal reachable. I will discuss two most popular methods – (1) evolutionary method USPEX (<http://uspex-team.org>) and (2) data mining methods. I will discuss discoveries of novel unexpected chemical compounds, theoretical studies of nanomaterials, search for superhard materials, thermoelectrics, and our newly developed methods – Mendeleevian search – which solves the central problem of theoretical materials science, namely, the prediction of the material with the best possible properties for any given application.

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

SEARCH AND MODIFICATION OF NOVEL BETA-LACTAMASE INHIBITORS

**Antipin R.L.,^a Majouga A.G.,^a Grigorenko V.G.,^a Zyk N.V.,^a Beloglazkina E.K.,^a
Beshnova D.,^b Lamzin V.,^b Egorov A.M.^a**

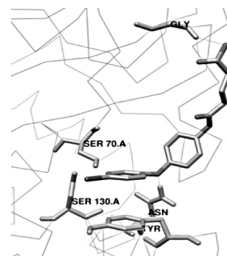
^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

^bEuropean Molecular Biology Laboratory, c/o DESY, Notkestrasse 85,
22603 Hamburg, Germany

The appearance of microorganisms resistance to beta-lactam antibiotics is a threat to the use of these drugs in clinical practice. The most common limitation is the expression of the bacterial enzymes - beta-lactamases. The aim of this study is to find a new beta-lactamase inhibitors, based on computer modeling, synthesis and biological testing of the compounds obtained.

Docking

Initially, a database of protein structures was analyzed, from which the structure of the FTA1 complex with enzyme has been chosen. That structure is isostructural to a protein allosteric site of beta-lactamase. This structure was used as a starting material, which was carried out on the basis of the search for new structural beta-lactamase inhibitors.



Synthesis

Series of derivatives of *p*-phenoxyaniline containing various substituents in the benzene ring and at the nitrogen atom was prepared. The overall structure of the synthesized compounds is shown in Figure 1.

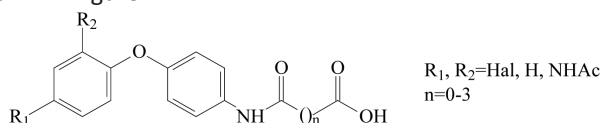


Figure 1. The general structure of the synthesized inhibitors

Biological tests

Determination of inhibitory potency of the compounds was obtained from a recombinant form of beta-lactamases TEM-1 by CENTA substrate. It was found that 2,4-dihloro moiety and a carboxyl group is necessary to inhibit the enzyme.

References

1. J.R. Horn and B.K. Shoichet. *J. Mol. Biol.*, 2004, **336**, 1283–1291.

This investigation was made with the support of RFBR, grant 14-04-01195..

COMPUTER-AIDED DESIGN OF NEW FLUORINE-CONTAINING NON-OPIOID ANALGETICS

Baev D.S.,^a Frolova T.S.,^{a,b} Tolstikova T.G.^{a,b}

*^aN.N. Vorozhtsov Institute of Organic Chemistry, SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 9,
Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: baev@nioch.nsc.ru*

^bNovosibirsk State University, Pirogova, 2, Novosibirsk, 630090, Russia

Currently an actual problem of medicinal chemistry is to provide new non-opioid analgetics with high efficiency and selectivity, and low toxicity. Searching promising fluorine containing inhibitors of cyclooxygenase-2 was performed using the computer modeling of the ligands in the binding site of the target based on the principles of combinatorial chemistry¹. An evolutionary algorithm was applied to the selection of the best ligands on the basis of the minimum binding energy of interaction with X-ray structural model of cyclooxygenase-2² as a result of molecular docking³. The modelled compounds will be synthesized and its anti-inflammatory activity will be studied using standard pharmacological screening models.

References

1. Durrant J.D., Lindert S., McCammon J.A. J Mol Graph Model 2013, **44**, 104-12.
2. Wang J.L., Limburg D., Graneto M.J., Springer J., Hamper J.R., Liao S., Pawlitz J.L., Kurumbail R.G., Maziasz T., Talley J.J., Kiefer J.R., Carter J. Bioorg Med Chem Lett 2010, **20(23)**, 7159-63.
3. Trott O., Olson A.J. J Comput Chem 2010, **31(2)**, 455-61.

MAKING SUBATOMIC ELECTRONIC DESCRIPTORS PREDICTIVE: THE CASE OF HALOGEN BONDS

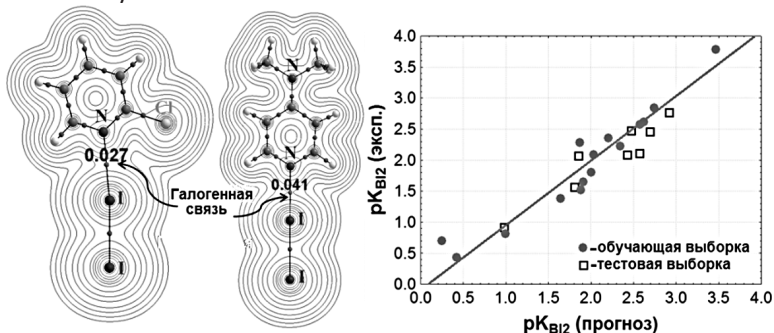
Bartashevich E.V.,^a Grigoreva E.A.,^a Yushina I.D.,^a Tsirelson V.G.^b

^aSouth-Ural state university, prospekt Lenina, 76, Chelyabinsk,
454080, Russia, e-mail: kbartash@yandex.ru

^bD.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9,
Moscow, 125047, Russia

Availability of the accurate electron density obtained from a wave function or from X-ray diffraction experiment allows to derive the structural descriptors at the subatomic level. Now, it is necessary to make possible the prediction of chemical binding properties by immersing these descriptors to the concept of structure-property relationships.

In this work we apply the combination of subatomic electron-density descriptors, as the delocalization indices^{1,2}, the source function^{2,3}, the interatomic energy calculated using Interacting Quantum Atom method^{2,4}, the atomic dipole moments as well as the energy characteristics at bond critical points of electron density to characterize a halogen bond. The N...I halogen bond features for the complexes of N-containing organic molecules with diiodine have been studied. In particular, we found that the delocalization indices of halogen N...I bond, $\delta(N, I)$, are well correlated⁵ with the basicity pK_{B12} according to the iodine basicity scale.



We have also tested the new approach considering the internal electronic pressure to look at the halogen bond from another perspective.

References

1. Bader R.F.W., Stephens M.E. *J. Am. Chem. Soc.* 1975, **97**, 7391.
2. Keith T.A., AIMALL, Version 15.09.27, Professional. <http://aim.tkgristmill.com>
3. Gatti C. In *Electron Density and Chemical Bonding II*. 2012, **147**, 193.
4. Blanco M.A., Pendas A.M., Francisco E.J. *J. Chem. Theory Comput.* 2005, **1**, 1096
5. Bartashevich E.V., Troitskaya E.A., Tsirelson V.G. *Chem. Phys. Letters* 2014, **601**, 144.

This work was supported by Russian Foundation for Basic Research, grants 16-03-00057a and 14-03-00961.

EXPLORATION OF THE CHEMICAL SPACE OF METAL BINDERS USING GENERATIVE TOPOGRAPHIC MAPPING

Baskin I.I.,^{a,b,c} Solov'ev V.P.,^d Varnek A.^c

^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: igbaskin@gmail.com

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 4/5, Kazan, 420111, Russia

^cUniversity of Strasbourg, Strasbourg, France

^dA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

Generative Topographic Mapping¹ (GTM) is a non-linear dimensionality-reduction technique widely used to visualize the data as projections onto 2-dimensional space. In chemistry, GTM maps can efficiently be used to visualize and analyze ensembles of chemical data (molecules or reactions) encoded by molecular descriptors.^{2,3} On these maps, similar compounds are usually grouped together which helps to discover different chemotypes presented in the dataset. Structure-property relationships can be established using GTM *activity landscape* forming by an additional third coordinate which corresponds to the property. Landscape represents a smooth 3D surface where "active" compounds (with high property values) are localized in "hills" area, whereas "inactive" ones are situated in "valleys".⁴ Mapping a new compound onto such landscape allows one to predict quantitatively its property.⁴

In this study, GTM was used to analyze a chemical space of known 3000 organic ligands (L) able to bind 50 different metal cations (M). Obtained GTM maps allowed us to detect zones of ligands selectivity and promiscuity with respect to certain metals. Activity landscapes built for stability constant logK of ML complexes in water allowed us perform quantitative predictions of binding profiles of studied molecules.

References

1. Bishop C.M., Svensén M., Williams C.K.I. *Neural Comput.* 1998, **10**, 215.
2. Kireeva N., Baskin I.I., Gaspar H.A., Horvath D., Marcou G., Varnek A. *Mol. Inform.* 2012, **31**, 301.
3. Gaspar H.A., Baskin I.I., Marcou G., Horvath D., Varnek A. *J. Chem. Inf. Model.* 2015, **55**, 84.
4. Gaspar H.A., Baskin I.I., Marcou G., Horvath D., Varnek A. *Mol. Inform.* 2015, **34**, 348.

HETEROSTRUCTURES BASED ON GRAPHENE AND TMD LAYERS: MODELING OF THEIR ATOMIC AND ELECTRONIC STRUCTURES

Chernozatonskii L.A., Demin V.A., Kvashnin A.G., Kvashnin D.G., Sorokin P.B.

*Emanuel Institute of Biochemical Physics, RAS, Kosygina, 4, Moscow,
119334, Russia, e-mail: cherno@sky.chph.ras.ru*

Transition metal dichalcogenides (TMD) have layer structures similar to graphene¹, with which they can form heterostructures. So this fact does perspective the investigation of their electronic and optic properties, and also their application as new generation elements of two-dimensional (2D) heterostructures.

Here the results of *ab-initio* quantum chemical modeling of electron constructions of the new heterostructures:

Bi-layer of graphene-molybdenum disulfide with included Re and Mo atoms between layers³ and on the layers⁴, structures with replacement of one atom of molybdenum to rhenium atom, and the addition of rhenium between the layers of graphene and MoS₂; bilayered MoS₂/ZnO and four G/MoS₂/ZnO/ heterostructures⁵;

heterostructures C₆₀/MoS₂, G/C₆₀/MoS₂/G with middle-layer of fullerenes C₆₀.⁶

Transport properties of new hybrid nanoribbons based on two phases of molybdenum disulfide (2H-semiconductor and 1T-metal) are studied.⁷

We discuss the most appropriate methods and computing program for calculating of nanostructures based on transition metals dichalcogenides and carbon, as well as the prospects for the use of such heterostructures.

References

1. Chhowalla M. et al. *Nat. Chem.* 2013, **5**, 263
2. Geim A.K. & Grigorieva I.V. *Nature*, **499**, 419-425 (2013).
3. Demin V.A., Chernozatonskii L.A. *JETP Lett.*, 2015, **101**, 107.
4. Kvashnin D., Sorokin P., Seifert G., Chernozatonskii L.A. *PCCP*, 2015, DOI:10.1039/C5CP04286K
5. Chernozatonskii L.A., Kvashnin A.G., Sorokin P.B. *JPCC*, 2016 (submitted)
6. Chernozatonskii L.A., Kvashnin A.G., Sorokin P.B. *Appl.Phys.Lett* (submitted)
7. Kvashnin D.G., Sorokin P.B., Chernozatonskii L.A. *JCP*, 20016 (submitted)

The work was supported by RNF, project 14-12-01217.

IN SILICO SEARCH AND CHEMICAL DESIGN OF EFFECTORS TO OVERCOME BACTERIAL RESISTANCE TOWARDS BETA-LACTAM ANTIBIOTICS

Egorov A.M.,^a Grigorenko V.G.,^a Rubtsova M.Yu.,^a Andreeva I.P.,^a Majouga A.G.,^a Antipin R.L.,^a Beshnova D.A.,^b Kallio J.,^b Lamzin V.S.^b

^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: alex.m.egorov@gmail.com

^bEuropean Molecular Biology Laboratory (EMBL), c/o DESY, Notkestrasse 85,
22603 Hamburg, Germany

β -Lactams represent the most widely used group of antibiotics with broad spectrum of antibacterial activity. However, most bacteria can develop antibiotic resistance, typically caused by beta-lactamase enzymes. Existing inhibitors of beta-lactamases can prevent antibiotic degradation arising from beta-lactam ring hydrolysis, but due to the additional development of resistance to these compounds, they are not sufficiently effective. Thus, the identification of new inhibitors and new mechanisms of lactamase inhibition is a priority.

To address this challenge, we computationally screened 8 million organic molecules using the ViCi software, which we specially developed for this purpose. The software permits the rapid screening against a known inhibitor template and selects the closest matching compounds in terms of shape and electrostatic composition. Four known low-affinity lactamase inhibitors were given to the software as a starting point.

Despite the ubiquity of the various strains of beta-lactamases, access to the full set of characterized clinical samples is a serious problem. Biobank of recombinant strains of *E.coli* - producing a variety of class A beta-lactamases, and efficient expression system for production of the recombinant class A beta-lactamases in *E.coli* cells have been elaborated in order to permit their study *in vitro* and *in vivo*. Recombinant beta-lactamase TEM-171 was produced and used to assay the top compounds suggested by ViCi screening. New potential effector bound to the allosteric site of TEM-1 was identified, having an order of magnitude higher *in vitro* affinity and inhibition power for the enzyme than the template. Chemical design and modification of the effector resulted in enhanced inhibition effect on the beta-lactamase.

The work was supported by the RFBR, Project 15-54-74007.

THE INVESTIGATION OF THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE STABILIZED GOLD CLUSTERS IN THE THEORETICAL FRAMEWORK

Golosnaya M.N., Nikitina N.A., Pichugina D.A., Kuz'menko N.E.

Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia, e-mail:mashagolosnaya@gmail.com

Ligand-protected gold(I) compounds (the most common ligands include phosphines or thiolates or halides) have generated a strong interest because of their characteristic luminescence, catalytic properties, and biological applications. The clusters can be described by the $[L_sAu_nX_m]^q$ formula, where Au_n is gold core stabilized by m electron-withdrawing X ligands and s weakly bound L ligands. Although, the same theory is used for a description of these clusters, the mechanism of interaction between SR - or PR_3 - and gold core is different. Therefore, the aim of the work was to establish the quantum-chemical method, which is equally well described the various interactions between the nuclei of atoms and ligands.

In this work we studied the effect of the ligand nature on the structure and electronic properties of the gold clusters $[Au_4(dpmp)_2X_2]^{2+}$ (*dpmp*—bis(diphenylphosphinomethyl) phenylphosphine) ($X = -C\equiv CH, -CH_3, -SCH_3, -F, -Cl, -Br, -I$) and $[Au_{20}(XCH_3)_{16}]$ ($X = S, Se, Te$). For clusters $[Au_4(dpmp)_2X_2]^{2+}$ we investigated decomposition, ligand exchange reaction and oxidation by molecular oxygen. Calculated HOMO–LUMO gap decreases in the order: $-F > -Cl > -Br \sim -C\equiv CH > -CH_3 > -I > -SCH_3$. $[Au_4(dpmp)_2(C\equiv CH)_2]^{2+}$ is a suitable precursor for synthesis of variety clusters by ligand exchange reactions. The reactions of O_2 and $[Au_4(dpmp)_2Hal_2]^{2+}$ were simulated; superoxo-, peroxo- and oxide-complexes were found. The oxide-complexes are the most stable. The reaction is accompanied by the formation of $OOH(s)$, which is active radical in many catalytic processes. The cluster protected by fluorine ligands indicates the highest reactivity.

For clusters $Au_{20}(XCH_3)_{16}$ the most stable isomer is found for all ligands. We investigated binding energy of the cluster's fragments, vertical ionization potential (VIP) and vertical electronic affinity (VEA). The HOMO–LUMO gap decreased in the series of $[Au_{20}(SCH_3)_{16}]$, $[Au_{20}(SeCH_3)_{16}]$, $[Au_{20}(TeCH_3)_{16}]$. The calculated values of VIP decreases in the order $-SCH_3 > -SeCH_3 > -TeCH_3$, in opposite to VEA data. Thus, $[Au_{20}(SeCH_3)_{16}]$ and $[Au_{20}(TeCH_3)_{16}]$ have opportunity in the oxidation reactions due to low VIP.

HIGH-LEVEL CALCULATIONS OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND MAGNETIC PROPERTIES OF THE HEAVY METAL COMPLEXES OF REDOX-ACTIVE LIGANDS

Gritsan N.P.,^{a,b} Dmitriev A.A.,^{a,b} Konchenko S.N.,^{b,c} Zibarev A.V.^{b,d}

^aV.V. Voevodsky Institute of Chemical Kinetics and Combustion, SB RAS, Institutskaya, 3, Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: gritsan@kinetics.nsc.ru

^bNovosibirsk State University, Pirogova, 2, Novosibirsk, 630090, Russia

^cA.V. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 3, Novosibirsk, 630090, Russia

^dN.N. Vorozhtsov Institute of Organic Chemistry, SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 9, Novosibirsk, 630090, Russia

Metal complexes of redox-active ligands are of great importance due to their catalytic activity and unusual magnetic properties.¹ Understanding the electronic structure and properties of such systems is a non-trivial problem that can only be solved using both a large set of experimental techniques and comparison of their results with quantum chemical calculations. The most difficult task is to correctly predict the properties of the heavy 5d- and 4f-metal complexes exhibiting fundamentally important relativistic effects.

Recently,² we demonstrated that the electronic structure of the rhenium complex with dioxolene ligand can be correctly predicted only using the explicitly correlated CASSCF/NEVPT2 approach with a non-perturbative account of spin-orbit coupling. Magnetic properties of the polycrystalline samples were very well reproduced using *ab initio* SINGLE-ANISO procedure.

Even more complicated task is to quantitatively predict magnetic properties of lanthanide complexes. Using CASSCF/SO-RASSI approach with a non-perturbative treatment of spin-orbit coupling, we calculated electronic structure of the lanthanide complexes of redox-active ligand, i.e. $[\text{Ln Cp}_2^*(\text{RN}=\text{)}_2\text{S}]$ (**1-3**, Ln = Sm, Eu, Yb, respectively, and R = SiMe₃). The results indicate that these paramagnetic complexes are best described as Ln³⁺ and $[\text{Me}_3\text{SiN}=\text{)}_2\text{S}]^{+}$

References

1. Benelli C., Gatteschi D. Introduction to Molecular Magnetism. From Transition Metals to Lanthanides. Wiley-VCH, 2015.
2. Abramov P.A., Gritsan N.P., Suturina E.A. et al. *Inorg. Chem.* 2015, **54**, 6727.

DOCKING ACCURACY: QUANTUM-CHEMICAL APPROACH AND THE ROLE OF SOLVENT

Kutov D.C., Sulimov A.V., Katkova E.V., Kondakova O.A., Sulimov V.B.

OOO "Dimonta", Nagornaya, 15-8, Moscow, 117186, Russia, e-mail: vs@dimonta.com

The adequate choice of the docking target function impacts greatly both on the accuracy of the ligand positioning and on the accuracy of the protein-ligand binding energy calculation. Comparison of different target functions, based on MMFF94¹ force field as well as on quantum-chemical method PM7² taking or not the solvent into account was performed using the original FLM³ docking program, which searches a lot of energy local minima of the protein-ligand system on a multidimensional energy surface. Each function was tested on the same test set of protein-ligand complex with known structures and constants of inhibition.

A noticeable positioning improvement (low-energy minima were close to the crystallized position of the ligand) was observed when taking into account the interaction with water in implicit models. The transition from the MMFF94 force field to quantum-chemical description of molecules in semi-empirical PM7 method also gives the improvement trend in ligand positioning. The binding energy values calculated using semi-empirical PM7 method taking into account in an implicit water model COSMO turned out to be the closest to the experimental binding values. This method found the global minimum near the position of the crystallized ligand both for energy and for the standard deviation of the ligand position from the crystallized one (RMSD) for 90% of the complexes.

References

1. Halgren T.A. *Journal of Computational Chemistry*, 1996, **17**, 490-519.
2. Stewart J. J. P., *Journal of Molecular Modeling*, 2013, **19**, 1-32.
3. Oferkin I.V., Katkova E.V., Sulimov A.V., Kutov D.C., Sobolev S.I., Voevodin V.V., Sulimov V.B.. *Advances in Bioinformatics*, 2015, **2015**, ID 126858.

The reported work was financially supported by the Russian Scientific Fund, Agreement 15-11-00025.

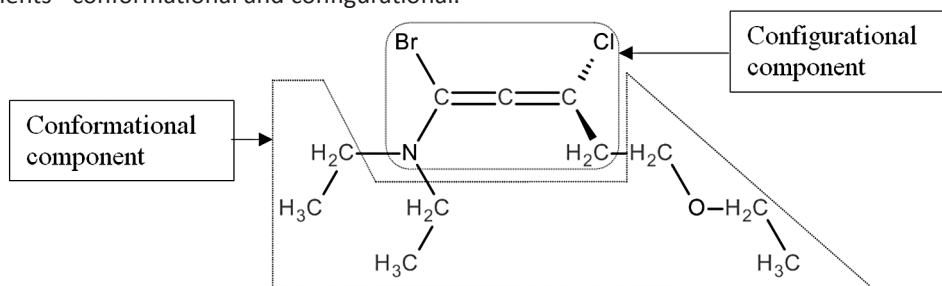
HYBRID (2+0.X)D-QSAR MODELS. CONSIDERATION OF STEREOCHEMICAL FEATURES FOR COMPOUNDS IN TOPOLOGICAL REPRESENTATIONS OF MOLECULAR STRUCTURE

Kuz'min V.E., Mouats A.

A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute, NAS of Ukraine, Lustdorfskaya doroga, 86, Odessa, 65080, Ukraine, e-mail: theorchem@gmail.com

The widespread ordinary 2D-QSAR models do not take into account the stereochemical features of molecules. There are a approaches series, for example¹⁻³ where the special techniques are used for the differentiation of stereoisomers within the 2D models of the molecular structure. All of these approaches describe the stereochemistry of the compounds with chiral centers only.

In this work we propose a universal approach for the description of any of the chiral systems. It is based on the simplex representation of molecular structure^{4,5}. In the proposed approach the spatial (3D) structure of a chiral molecule can be separated on two components - conformational and configurational.



Fraction of configurational component (0.X) is necessary and sufficient "increment" to the topological (2D) molecular structure description for adequately representing its stereochemical features, besides, the conformation of the molecule is not fixed and is not considered.

Scope and efficiency of the developed approach is demonstrated on examples various QSAR tasks for compounds with different types of chirality

References

1. Lukovits I., Linert W. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2001, **41**, 1517
2. Golbraikh A., Bonchev D., Tropsha A. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2001, **41**, 147.
3. Del Rio A., Gasteiger J. *QSAR Comb. Sci.* 2008, **27**, 1326.
4. Kuzmin V.E., Chelombitko V.A., Yudanov I.V., Stelmakh I.B., Rublev I.S., *J. Structural Chem.* 1998, **39**, 452.
5. Kuz'min V., Artemenko A., Muratov E. *J. Comput. Aided Mol. Design* 2008, **22**, 403.

EFFECTS OF SOLVATION ON THE DIFFUSION AND RECOMBINATION OF IONS IN DENSE GASES AND SIMPLE LIQUIDS

Lankin A.V.

*Joint Institute for High Temperatures, RAS, 125412, Moscow, Izhorskaya, 13-2,
e-mail: Alex198508@yandex.ru*

The work examines three factors that influence to processes of ion recombination: influence of the effect of solvation on the mobility and diffusion coefficient of the ions¹; interaction solvation complexes between themselves and the complicated mechanism of recombination process²; the effects of Coulomb nonideality³. The molecular dynamics method is used. The formulas describing the kinetics of ion recombination in a wide range of medium parameters is obtained.

1) The ion recombination rate constant is described by the Langevin model in the limit of low values of the concentrations of ions. But a significant problem is description of the ion mobility dependence on the chemical nature of the ion, as well as the composition and parameters of the medium. It is studied ion solvation and its impact on ion mobility depending on the nature of the ion-molecular interaction potential¹.

2) Ion recombination may pass by a complex mechanism with a reversible intermediate formation of a metastable clustered pair in the case of formation quite strong solvation complexes. This factor can have a significant impact on the character dependence of the constant recombination rate on the concentration of ions in the medium. The formula that describes this relationship is obtained².

3) MD simulation results show that, despite taking place in the literature of ideas about the absence of dependence of the recombination rate in the diffusion mode from Coulomb nonideality⁴, in fact this dependence is saved. The formula describing the dependence of the recombination rate of ions from both the ion concentration and density of the medium is obtained³.

References

1. Lankin A.V., Norman G.E., Orekhov M.A., *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2016, **90**, 962
2. Lankin A.V., *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2016, **90**
3. Lankin A.V. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2016
4. Bates D.K., *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 1982, **15**, L119.

This work was supported by the President's of Russian Federation Grant MK-9285.2016.8.

METHODS OF MOLECULAR MODELING IN BIOCHEMICAL AND BIOMEDICAL PROBLEMS. CHOLINESTERASES FAMILY

Lushchekina S.V.,^a Masson P.,^b Nemukhin A.V.,^{a,c} Varfolomeev S.D.^{a,c}

^aEmanuel Institute of Biochemical Physics, RAS, Kosygina, 4, Moscow, 119334, Russia, e-mail: sofya.lushchekina@gmail.com

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

^cMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

Acetylcholinesterase (AChE) and butyrylcholinesterase (BChE), enzymes belonging to cholinesterase family, are subjects of biochemical and biophysical research aimed to develop drugs against Alzheimer disease, *myasthenia gravis*, study of individual sensitivity to drugs and antidotes against poisons.

Traditionally molecular docking is used for development of drugs. In case of complex inhibition kinetics molecular dynamics methods are necessary to describe mechanisms of binding and dissociation of protein-ligand complex. In case of study of mechanism of slow-binding inhibition of AChE by potential anti-myasthenia drug C547 results of molecular modeling were supported by X-ray crystallography data [1,2]. Molecular dynamics was also successfully used to demonstrate role of AChE in aggregation of β -amyloid peptide and development of Alzheimer disease. For two novel polymorphic modifications of BChE gene molecular dynamics helped to reveal mechanism of loss of catalytic activity by the enzyme, induced by point mutation, remote from the active site. [3,4].

References

1. Masson P., Lushchekina S.V., *Arch. Biochem. Biophys.*, 2016, **593**, 60-68.
2. Kharlamova A.D, Lushchekina S.V., *et al. Biochem. J.*, 2016, DOI: 10.1042/BCJ20160084.
3. Delacour H., Lushchekina S. *et al.*, *PLoS One*, 2014, **9**, e101552.
4. Delacour H., Lushchekina S. *et al.*, *Biochem. Pharmacol.*, 2014, **92**, 476-483.

Work was supported by Russian Foundation for Basic Research, project 13-00-40286-K and Russian Scientific Foundationm, project 14-13-00124.

PREDICTION OF OPTIMAL REACTION CONDITIONS

Madzhidov T.I.,^a Lin A.I.,^{a,b} Nugmanov R.I.,^a Klimchuk O.,^b Antipin I.,^a Varnek A.^b

^a*Kazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry, Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: timur.madzhidov@kpfu.ru*

^b*University of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France*

Synthesis of complex structures became a central problem of organic chemistry. The complexity of structures prevents rapid synthesis of given structures due to the fact that choice of synthetic strategy and adjustment of reaction conditions becomes more and more challenging. Many approaches for the computer-assisted synthesis design were proposed. However, only recently some works were addressed to prediction of optimal reaction conditions. Usually, the choice of reaction conditions proceeds in essentially empirical way: the chemists rely either on their own experience or on information for similar reactions retrieved from the literature.

Recently it became clear that computational technologies could come to the scene and assist chemists in prediction of optimal solvents, catalysts and other conditions. However, only first steps were done in this direction. Recently, Struebing et al.¹ published a mixed quantum mechanics – linear free energy relationship based approach for prediction of optimal solvent for bimolecular reactions. Marcou et al.² built classification model to predict optimal type solvent and type of catalyst for Michael reaction using machine learning methods. Brief review of these works will be presented.

New approach that extracts expert knowledge on optimal conditions of deprotection reactions from large amount of raw and “big” reaction data in a fully automatic workflow will be presented. The approach is based on Condensed Graph of Reaction³ approach. It was applied to approx. 142000 hydrogenation reactions taken from Reaxys database.

The tool for prediction of optimal conditions for these reactions based on similarity principle was developed. The hypothesis was that similar reactions proceed in similar conditions. The approach allows assessing optimal conditions for desired deprotection reaction. Clear advantage of the approach over expert knowledge acquired from the “manual” analysis of the literature will be demonstrated.

References

1. Struebing H. et al. *Nat. Chem.* 5, 952–957 (2013).
2. Marcou G. et al *J. Chem Inf. Model.* 55, 239-250 (2015).
3. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 19, 693-703 (2005).

The research was supported by Russian Scientific Foundation, grant 14-43-00024. We thank the Reaxys database (Elsevier, Netherlands) for providing us with the experimental reaction data and ChemAxon company for the software license.

QSPR VS GC: STRUCTURAL INTERPRETATION OF CRITICAL PROPERTIES

Mokshyna E.G.,^a Polishchuk P.G.,^b Nedostup V.I.,^a Kuz'min V.E.^a

*a*A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute, NAS of Ukraine, Lustdorfskaya doroga, 86,
Odessa, 65080, Ukraine, e-mail: MokshinaElena@ukr.net
*b*Palacký University, 771 47 Olomouc, Czech Republic

The most fundamental and long-studied properties of compounds are those connected with phase transitions. The critical properties – critical temperature, pressure and volume – distinguish among them due to their non-variance and connectedness to the equations of state. Despite their high accuracy the experimental measurements of critical properties remain highly energy consuming and costly. Therefore, for a long time the attempts have been made to develop rigorous predictive models. But the researchers were interested not only in numeric predictions, but defining an influence of molecular structural on the critical properties. Mainly these studies resulted in the many group-contribution (GC) methods, which adopted additive schemes towards structural interpretation.

In the current study we employed the universal approach¹ for structural interpretation of QSAR/QSPR models. We calculate a contribution of a molecular fragment to an investigated property as a difference between the predicted property value (for the particular compound) and the predicted property value for the same compound after removal of the considered fragment. Thus it is feasible to estimate contributions of any arbitrary atoms combinations (atoms in selected fragments can be directly linked or not) or single atoms. Using collected data we developed SVM, PLS, Random Forest and Gradient Boosting Machine regression models using simplex representation of molecular structure descriptors. All models showed high predictive performance and therefore were eligible for interpretation. Only the most frequently occurring fragments were considered to avoid bias introduced by rarely occurring fragments.

For the critical temperatures the fragments with the largest positive influence were aromatic, non-aromatic cyclic and fragments containing the carbonyl group; the fragments with the largest negative influence were those containing fluorine atoms and those containing double and triple carbon-carbon bonds. The tendencies for the critical pressures were opposite to those of the critical temperatures, the fragment with the largest positive influence being disulphide group. For the critical volumes reasonably the bulkiest fragments had the largest positive influence. The results of the interpretation were compared to the contributions of fragments in the GC methods, and the general trends are preserved in both approaches. The application of the universal approach proved to be comparable to the classical thermodynamics methods, and also allowed to discover new influencing fragments.

References

1. Polishchuk P.G., Kuz'min V.E., Artemenko A.G., Muratov E.N. Mol. Inf. 2013, 32 (9-10), 843-853.

COMPUTER MODELING OF MOLECULAR PROCESSES IN PROTEINS

Nemukhin A.V.

*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia
Emanuel Institute of Biochemical Physics, RAS, Kosygina, 4, Moscow, 119334, Russia,
e-mail: anem@lcc.chem.msu.ru*

Our current project at the intersection of biomacromolecular chemistry, quantum theory of molecular structure and computer technologies aims to predict action of polymorphic variants of the most important human enzymes. Since enzymes are targets of majority of modern drugs, the clarification of structure and function of polymorphic variants of enzymes, reflecting variability of genes of each individual, is an essential stage of establishment of personified healthcare. Other actual sides of the project are related to the sharply increased performance of computer modeling of structure and properties of macromolecular systems due to availability of modern supercomputers of tera- and petaflops performance, as well as improvements of software for multiscale simulations of complex chemical systems. In our studies, we construct all-atom three-dimensional structural models for selected human enzymes, calculate energy profiles of chemical reactions of substrates in the active sites and analyze impact of possible polymorphic variants, i.e. point mutations in protein macromolecules, on reaction routes. The use of quantum mechanical - molecular mechanical (QM/MM) methods as well as molecular dynamics methods with the QM/MM potentials is essential for the goals of the project. In particular, we use the original algorithms of the QM/MM approaches oriented on modern supercomputers. The project is focused on human hydrolases, important for biomedical applications: polymorphic variants of butyrylcholinesterase (BChE), carboxylesterase (CES1) and GTPase Ras. Correlations of mutants of these enzymes with developments of heavy pathologies or complications upon therapeutic drug treatment, such as Alzheimer disease or oncology, are known.

Support from the Russian Science Foundation, project 14-13-00124, is acknowledged.

SUPERCOMPUTER MODELING OF MOLECULAR POLYMORPHISM OF HUMAN ENZYMES

Nemukhin A.V.

*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia
Emanuel Institute of Biochemical Physics, RAS, Kosygina, 4, Moscow,
119334, Russia, e-mail: anem@lcc.chem.msu.ru*

Our current project at the intersection of biomacromolecular chemistry, quantum theory of molecular structure and computer technologies aims to predict action of polymorphic variants of the most important human enzymes. Since enzymes are targets of majority of modern drugs, the clarification of structure and function of polymorphic variants of enzymes, reflecting variability of genes of each individual, is an essential stage of establishment of personified healthcare. Other actual sides of the project are related to the sharply increased performance of computer modeling of structure and properties of macromolecular systems due to availability of modern supercomputers of tera- and petaflops performance, as well as improvements of software for multiscale simulations of complex chemical systems. In our studies, we construct all-atom three-dimensional structural models for selected human enzymes, calculate energy profiles of chemical reactions of substrates in the active sites and analyze impact of possible polymorphic variants, i.e. point mutations in protein macromolecules, on reaction routes. The use of quantum mechanical - molecular mechanical (QM/MM) methods as well as molecular dynamics methods with the QM/MM potentials is essential for the goals of the project. In particular, we use the original algorithms of the QM/MM approaches oriented on modern supercomputers. The project is focused on human hydrolases, important for biomedical applications: polymorphic variants of butyrylcholinesterase (BChE), carboxylesterase (CES1) and GTPase Ras. Correlations of mutants of these enzymes with developments of heavy pathologies or complications upon therapeutic drug treatment, such as Alzheimer disease or oncology, are known.

Support from the Russian Science Foundation (project 14-13-00124) is acknowledged.

IONOTROPIC GLUTAMATE RECEPTORS: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION AND QSAR STUDIES OF LIGAND-RECEPTOR INTERACTIONS

Palyulin V.A., Karlov D.S., Lavrov M.I., Radchenko E.V., Zefirov N.S.

*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: vap@qsar.chem.msu.ru*

Malfunctioning of glutamatergic system leads to serious neurological disorders and is associated with neurodegenerative diseases. The molecular dynamics simulation and QSAR studies of ligand-receptor interactions were performed for two important types of glutamate receptors: NMDA and AMPA receptors. They are ligand-gated ionotropic receptors consisting of four subunits forming the ion channel, ligand-binding domains, and amino-terminal domains. The NMDA receptor antagonists, reversible ion channel blockers, and negative allosteric modulators can serve as neuroprotective compounds, while positive allosteric modulators of AMPA receptors improve memory and cognition.

The analysis of motions of amino-terminal domains of GluN1 and GluN2B subunits of NMDA receptor bound with either positive or negative modulators has revealed their possible role in the transition between the open-channel and closed-channel states of the receptor. In combination with the results of QSAR studies this data are useful in the rational design of new negative NMDA receptor modulators.

The molecular modeling and molecular dynamics simulation for a series of AMPA receptor positive allosteric modulators (PAMs) bound on the interface between two glutamate-binding domains have demonstrated a reasonable correlation of MM-GBSA binding energy with experimental pEC_{50} values.

Molecular Field Topology Analysis (MFTA) developed by us was quite helpful in the modeling of ligand selectivity and multi-target activity.

The combination of the considered techniques allowed us to design new scaffolds for PAMs and have lead to the development of a picomolar positive AMPA receptor modulator with a record high potency, which in animal models improves memory and cognition and successfully passed a preclinical stage.

The developed advanced QSAR models for blood-brain barrier permeability serve as an additional filter in the design of neuroprotective compounds.

References

1. Karlov D.S., Radchenko E.V., Zefirov A.N., Palyulin V.A., Pentkovski V.M., Zefirov N.S. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 2012, **424**, 687.
2. Karlov D.S., Lavrov M.I., Palyulin V.A., Zefirov N.S. *Izv. Akad. Nauk, Ser. Khim.*, 2016, 581.

QSAR MODELLING OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES

Pirtskhalava M., Vishnepolsky B., Grigolava M.

*Beritashvili Center of Experimental Biomedicine (IBCEB), Gotua, 14, Tbilisi, 0160, Georgia,
e-mail: m.pirtskhalava@lifescience.org.ge*

Antimicrobial peptides (AMPs) are anti-infectives that may represent a novel and untapped class of biotherapeutics. In the lab of bioinformatics of IBCEB the Database of Antimicrobial Activity and Structure of Peptides (DBAASPv.2 - accessible at <http://dbaasp.org>) has been developed. DBAASP provides the information and analytical resources to the scientific community in order to develop antimicrobial compounds with the high therapeutic index.

QSAR studies in order to develop predictive model for AMP are generally based on discriminative analysis and essentially machine learning methods. These methods, as a positive training set, have used a full set of antimicrobial peptide sequences, not taking into account variation in mechanisms of action, structure, mode of interaction with membrane and other differences. Contrary to available approaches, we think that strategy of prediction should be based on the fact that there are at least four kinds of AMPs for which four independent algorithms of prediction have to be developed in order to get high efficacy. We can distinguish: linear cationic antimicrobial peptides (LCAP), cationic peptides stabilizing structure by interchain covalent bond, peptides rich in proline and arginine and anionic antimicrobial peptides .

Simple predictive model which can discriminate AMP from non-AMP have been developed for LCAP. Sequences have been taken from DBAASP. As descriptors the sequence-based physical-chemical characteristics responsible for capability of the peptide to interact with an anionic membrane were considered. On the basis of these characteristics, a new simple algorithm of prediction is developed and evaluation of the efficacies of characteristics done. The results show that three descriptors: hydrophobic moment, charge density and location of the peptide along the membranes, are enough to discriminate of linear AMP from non-AMP.

HOW CHEMOINFORMATICS CAN HELP CHEMISTS?

Tetko I.V.^{a,b,c}

^aHelmholtz Zentrum München - Research Center for
Environmental Health (GmbH), Neuherberg, Germany

^bBigChem GmbH, Neuherberg, Germany

^cKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: itetko@vcclab.org

This presentation will overview recent development of On-line CHEmical database and Modeling (OCHEM <http://ochem.eu>) platform.¹ The models for melting and pyrolysis points developed using about 300k measurements mined from patent data² are useful to accurately predict these properties for new molecules. They can be also used within Yalkowsky equation to estimate solubility of molecules in water. The solubility of chemical compounds in DMSO³ can be important to avoid problems with preparation of solutions in biochemical assays. The logP model for Pt(II)/Pt(IV) complexes⁴ is important for chemists working with development of new anti-cancer drugs. Moreover, the same methodology can be applied to predict other physico-chemical properties of metal complexes. The prediction of AMES⁵ as well as estrogen receptor binding⁶ can spoil potential carcinogens and endocrine disruptors. The read biodegradability model can identify compounds, which will not be persistent in nature. I will also show how the OCHEM platform can be used to analyze data, find inconsistent measurements and develop highly prediction models or/and to discover molecular transformations contributing to the largest changes of properties using the Matched Molecular Pair analysis.⁷ The application of OCHEM to analyze chemical reactions will be exemplified using the data of SN2 reactions.

The development and public availability of on-line models is expected to change the way we currently publish computational studies and will increasingly promote usage of theoretical models in chemistry.⁸

References

1. Sushko I. et al. *J. Comput.-Aided. Mol. Des.* 2011, **25**, 533-54.
2. Tetko I.V., Lowe D., Williams A. *J. Cheminform.* 2016, **8**, 2.
3. Tetko I.V. et al. *J. Chem. Inf. Model.* 2013, **53**, 1990-2000.
4. Tetko I.V. et al. *J. Inorg. Biochem.* 2016, **156**, 1-13.
5. Sushko I. et al. *J. Chem. Inf. Model.* 2010, **50**, 2094-2111.
6. Mansouri K. et al. *Env. Health. Perspect.*, 2016, in press.
7. Sushko Y. et al. *J. Cheminform.* 2014, **6**, 48.
8. Tetko I.V. *J. Comput.-Aided. Mol. Des.* 2012, **26**, 135-6.

ON THE IMPORTANCE OF DATA CURATION IN QSAR MODELING

Tropsha A.

UNC Eshelman School of Pharmacy, UNC Chapel Hill, CB 7568 Beard Hall,
NC 27599, USA, e-mail: alex_tropsha@unc.edu

With the rapid accumulation of experimental data, scientists increasingly rely on computational models to direct their studies. However, data published even in the highest-ranking peer reviewed journals may suffer from poor reliability. Researchers employing non-curated data are taking the risk of corrupting their results due to the following “five I’s” issues: incomplete, inaccurate, imprecise, incompatible, and irreproducible data points. This consideration emphasizes the need for data curation as the ultimate success of model-driven experimental design depends inherently on the accuracy of data used for model development.

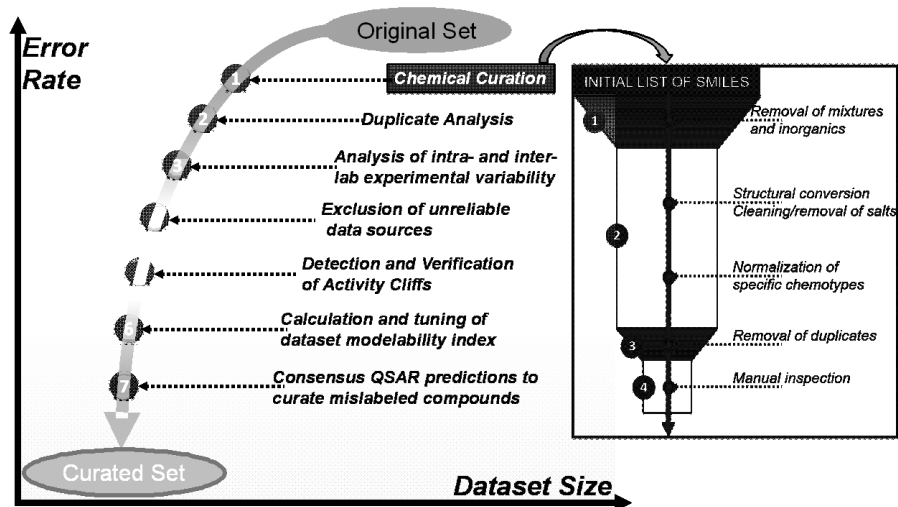


Figure 1. General scheme for chemical and biological data curation.

We have developed a chemical and biological data curation workflow (Fig. 1)^{1,2} that relies on existing cheminformatics approaches to flag, and in some cases, correct likely erroneous entries in large chemogenomics datasets. We will discuss important elements of this workflow and illustrate them with specific examples. We posit that the adherence to the best practices for data curation by both experimental and computational scientists will improve data reproducibility and accelerate progression from data to knowledge in chemical biology research.

References

1. Fourches D. et al., *J Chem. Info. Mod.* **2010**, 50:1189.
2. Fourches D., Muratov E., Tropsha A. *Nat Chem Biol.* **2015**, 11:535.

GENERATIVE TOPOGRAPHIC MAPPING: UNIVERSAL TOOL FOR CHEMICAL SPACE ANALYSIS

Varnek A.

*University of Strasbourg, rue Blaise Pascal 1, Strasbourg
67000, France, e-mail: varnek@unistra.fr*

In this presentation, we describe Generative Topographic Mapping (GTM) - universal approach to visualize chemical space, to predict activity profiles, to conduct virtual screening and to compare databases of chemical compounds. Unlike other popular methods of data visualization (PCA, SOM, etc), for a given molecule GTM provides with the data probability distribution functions (PDF), both in the high-dimensional space defined by molecular descriptors and in 2D latent space ^{1,3}. This opens a possibility to build classification or regression models and to introduce their applicability domains ². Numerous tests show that the performance of GTM-based models is similar to that of popular machine-learning methods (SVM, RF, etc) ⁴. Moreover, GTM allows one to build QSAR models not only for individual activities, but for whole pharmacological profiles. GTM offers a valuable solution of Big Data problem since it is able to analyze chemical spaces of large databases containing millions compounds (ChEMBL, suppliers DB) ⁵.

Various applications of GTM to visualization and analysis of “optimal” chemical spaces ⁶ of biologically active molecules, chemical reactions and protein-ligand interactions are considered.

References

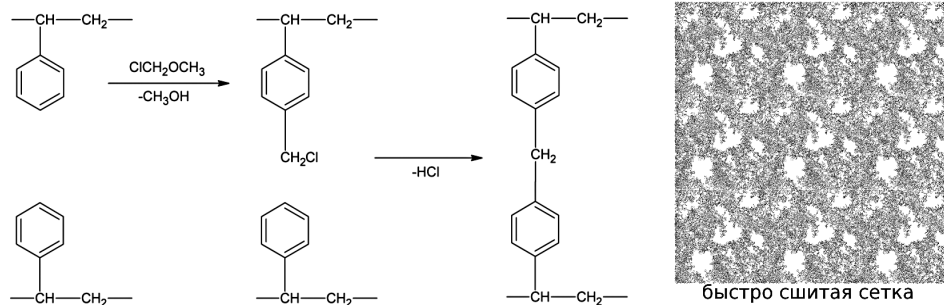
1. Kireeva N., Baskin I.I., Gaspar H.A., Horvath D., Marcou G., Varnek A. *Molecular Informatics*, 2012, **31**, 201-312
2. Gaspar H.A., Marcou G., Arault A., Lozano S., Vayer P., Varnek A. *J. Chem. Inf. Model.*, 2013, **53** (4), 763-772
3. Chupakhin V., Marcou G., Gaspar H., Varnek A. *Computational and Structural Biotechnology J.*, 2014, **10** (16), 33-37
4. Gaspar H.A., Baskin I.I., Marcou G., Horvath D., Varnek A. *Molecular Informatics*, 2015, **34** (6-7), 348-356
5. Gaspar H., Baskin I.I., Marcou G., Horvath D., Varnek A. *J. Chem. Inf. Model.*, *J. Chem. Inf. Model.*, 2015, **55** (1), 84-94
6. Sidorov P., Gaspar H.A., Helena, Varnek A., Marcou G., Horvath D. *J Comput Aided Mol Des.* 2015, **29** (12), 1087-1108

HYPERCROSSLINKED POLYMER NETWORKS: MULTISCALE COMPUTER SIMULATION

Vasilevskaya V.V., Glagolev M.K., Lazutin A.A.

*A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, RAS, Vavilova, 28,
Moscow, 119991, Russia, e-mail: vvvas@polly.phys.msu.ru*

A multi-scale molecular dynamics simulation technique^{1,2} was used to study the structure of hypercrosslinked polystyrene. The algorithm comprised consecutive stages: molecular dynamics atomistic simulation of polystyrene solution, the mapping of atomistic structure onto coarse-grained model, the crosslink formation, the reverse mapping, and finally relaxation of the structure dissolved in dichloroethane and in dry state. It was found that during the synthesis the crosslinks are distributed non-uniformly. The inhomogeneous distribution of crosslinks leads to effective microphase separation of polymer resulting in formation of densely packed polymer fields and empty voids. Seemingly due to such structure hypercrosslinked gels have rather high elastic modulus and large specific surface. It was shown that the rate of cross-linking affects³ the structure of "synthesized" hypercrosslinked networks: slowly cross-linked polymer networks have smaller specific surface, lower average density and larger pores than those cross-linked at high rate.³ The calculated values of density and elastic modulus of the networks are in quantitative correspondence with experimental data.



References

1. Lazutin A.A., Glagolev M.K., Vasilevskaya V.V., Khokhlov A.R. *J. Chem. Phys.*, 2014, 140, 134903
2. Glagolev M.K., Lazutin A.A., Vasilevskaya V.V. *Macromol.. Symposia*, 2015, 348, 14-24
3. Glagolev M.K., Lazutin A.A., Vasilevskaya V.V., Khokhlov A.R. *Polymer*, 2016, 86, 168-175.

The research was supported by Russian Foundation for Basic Research, project 14-03-00073.

CONSENSUS ENSEMBLE NEURAL NETWORK MODELING OF MAILLARD REACTION INHIBITORS

**Vassiliev P.M., Spasov A.A., Kuznetsova V.A., Vorfolomeeva V.V.,
Yanalieva L.R., Kochetkov A.N.**

*Volgograd State Medical University, Pavshikh Bortsov sq., 1, Volgograd,
400131, Russia, e-mail: pvassiliev@mail.ru*

Non-enzymatic glycosylation of proteins causes the development of complications of diabetes mellitus¹. Maillard reaction is non-specific and is implemented through many different mechanisms. Now there are not antiglycation drugs approved for clinical use. Thus creation of systemic model for *in silico* search for Maillard reaction inhibitors is the actual.

The consensus model was designed in the form of four systems of double-layer perceptron neural network ensembles². The model binds four evaluations of antiglycation activity³ of new compounds tested in $1 \cdot 10^{-3}$ M and $1 \cdot 10^{-4}$ M concentrations and their *in silico* prediction estimations for next bioactivities: dipeptidyl peptidase-4 inhibitors, PPAR- γ agonists, glycogen phosphorylase inhibitors, Maillard reaction inhibitors, cross-link breakers, α -glycosidase inhibitors, glucokinase activators.

The calculation of the primary prediction evaluations was performed using PASS system⁴, IT Microcosm⁵, quantum-chemical QSAR-modeling⁶, docking by AutoDock Vina⁷. The average accuracy values of the consensus ensemble prediction are for pronounced antiglycation activity $F_0=90.7\%$, $F_a=79.5\%$, $F_n=95.7\%$, for high antiglycation activity $F_0=95.0\%$, $F_a=80.3\%$, $F_n=97.6\%$.

The created systemic model is used to direct design and search for novel highly active Maillard reaction inhibitors.

References

1. Ansari N.A., Rashid Z. *Biomedical Chemistry*, 2010, **56(2)**, 168.
2. Neural networks. STATISTICA Neural Networks: Methodology and technologies of modern data analysis. Hot line – Telecom, Moscow, 2008.
3. Jedsadayamata A. *Naresuan University Journal*, 2005, **13(2)**, 35.
4. Filimonov D.A., Poroykov V.V. *State registration certificate № 2006613275 Russia*, 2006.
5. Vassiliev P.M., Kochetkov A.N. *State registration certificate № 2011618547 Russia*, 2011.
6. Vassiliev P.M., Spasov A.A., et al. *Abstracts of XXII Russian National Congress «Man and Drug»*, 2015, Moscow, 184.
7. Trott O., Olson A.J. *J. Comp. Chem.*, 2010, **31(2)**, 455.

The work is funded by the Russian Science Foundation, 14-25-00139 project.

A THEORETICAL STUDY OF THE HYDRATION EFFECT ON A SUPERBASIC CENTER

Vitkovskaya N.M.^a, Kobychhev V.B.^a, Larionova E.Yu.^{a,b}, Trofimov B.A.^c

^a*Irkutsk State University, K. Marxa, 1, Irkutsk, 664003, Russia, e-mail: vita@cc.isu.ru*

^b*East-Siberian Institute of the MIA of Russia, Lermontova, 110, Irkutsk,
664074, Russia, e-mail: lari555@mail.ru*

^c*A.E. Favorsky Irkutsk Institute of Chemistry, SB RAS, Favorskogo, 1, Irkutsk, 664033, Russia*

A superbasic center ($\text{KOH} \cdot 5\text{DMSO}$ and $\text{NaOH} \cdot 4\text{DMSO}$) hydration influence on the course of typical reactions with acetylene participation, ethynylation and vinylation, have been studied within the MP2/6-311++G**//B3LYP/6-31+G* framework with non-specific solvation effects included via the PCM model.

A water molecule insertion into both the pseudo-octahedral $\text{KOH} \cdot 5\text{DMSO}$ and trigonal bipyramid $\text{NaOH} \cdot 4\text{DMSO}$ complexes was not accompanied by any significant distortion of a coordination polyhedron. Activation barriers of the H_2O molecule migration from one position of monohydrate complex to another one are less than 1.3 kcal/mol in $\text{NaOH} \cdot 4\text{DMSO} \cdot \text{H}_2\text{O}$ and 0.7 kcal/mol in $\text{KOH} \cdot 5\text{DMSO} \cdot \text{H}_2\text{O}$. Among dihydrate complexes, similar stability is characteristic of ones that contain the $\text{HOH} \cdots \text{HO}^- \cdots \text{HOH}$ and $\text{HO} \cdots \text{HOH} \cdots \text{HOH}$ chained hydrogen bonds.

The activation energy of hydroxide-ion (incorporated into the $\text{KOH} \cdot 5\text{DMSO} \cdot \text{H}_2\text{O}$) addition to the acetylene triple bond was estimated to $\Delta H^\ddagger = 22.3$ kcal/mol and $\Delta G^\ddagger = 28.6$ kcal/mol. This activation energy increases to $\Delta G^\ddagger = 31.2$ kcal/mol when an additional water molecule included, that reflects the hydroxide ion activity decrease under its partial hydration.

In the methanol vinylation reaction with a participation of $\text{KOH} \cdot 5\text{DMSO}$ an introduction of the additional water molecule results in a significant decrease of the alcohol acidity and the higher activation barrier from $\Delta G^\ddagger = 26.6$ kcal/mol to $\Delta G^\ddagger = 31.7$ kcal/mol. The methanol vinylation with $\text{NaOH} \cdot 4\text{DMSO}$ participation $\text{NaOH} \cdot 4\text{DMSO}$ is initially connected with a higher activation energy $\Delta G^\ddagger = 30.4$ kcal/mol and a low degree of methanol conversion to sodium hydroxide ($\Delta G = -0.4$ kcal/mol) that reduces even further ($\Delta G = -0.2$ kcal/mol) when the additional water molecule included.

This work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under the State Assignment in Scientific Research No. 2014/51 (Project 206) and the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 15-03-03880-a).

MODELING OF ACETYLENE REACTIONS IN THE KOH/DMSO SUPERBASIC MEDIUM

Vitkovskaya N.M.,^a Larionova E.Yu.,^{a,b} Kobychiev V.B.,^a Orel V.B.,^a
Skitnevskaya A.D.,^a Trofimov B.A.^c

^aIrkutsk State University, K. Marxa, 1, Irkutsk, 664003, Russia, e-mail: vita@cc.isu.ru

^bEast-Siberian Institute of the MIA of Russia, Lermontov, 110, Irkutsk,
664074, Russia, e-mail: lari555@mail.ru

^cA.E. Favorsky Irkutsk Institute of Chemistry, SB RAS, Favorskogo, 1, Irkutsk, 664033, Russia

Superbasic catalysts and reagents are an important tool of modern organic synthesis. Many fundamental results relating to acetylene chemistry were obtained with their help [1]. A theoretical model of the KOH/DMSO superbase uses a cluster-continuum approach with an explicit considering $\text{KOH} \cdot n\text{DMSO}$ ($n = 0, 1$, and 5) complexes, allowing accounting both specific and non-specific solvation effects (MP2/6-311++G**//B3LYP/6-31+G*, IEFPCM) [2]. The calculated activation energies for classic reactions of methanol and methanethiolvinyl-ation with acetylenes show a good agreement with the experimentally observed differences in reactivity of acetylenes, that demonstrates the reliability of the proposed description for the mechanisms under consideration.

Stereoselective C-vinylation of ketones with phenylacetylene is caused by a possibility of the intermediate carbanion isomerization. The cascade assembly of vinyloxybutadiene and dioxabicyclo[3.2.1]octanes mechanisms are represented with series of successive vinyl-ation, ethynylation and isomerization steps. In all the reactions studied, a nucleophilic addition to acetylene was found to be a limiting stage; in total, realization of each consecutive stage results in the sequential significant decrease of the reactive system energy.

References

1. Trofimov B.A. *Sovremennyye problemy organicheskoy khimii* [Modern Problems in Organic Chemistry], 2004, 14, 131 (in Russian).
2. Vitkovskaya N.M., Larionova E.Yu., Skitnevskaya A.D., et al. *Russ. Chem. Bull.*, 2013, 62, 27.

This work was financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation under the State Assignment in Scientific Research No. 2014/51 (Project 206) and the Russian Foundation for Basic Research (Project No. 15-03-03880-a).

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

MAPPING OF THE CHEMICAL UNIVERSE VS AVAILABLE CHEMICAL SPACE OF LEAD-LIKE COMPOUNDS

Afonina V.A.,^{a,b} Horvath D.,^a Varnek A.^a

^aLaboratoire de Chimoinformatique, UMR 7140, CNRS-Univ.
Strasbourg, 1 rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, France

^bKazan Federal University, Kremlevskaya, 18, Kazan,
420008, Russia, e-mail: valiaafo@yandex.ru

The chemical “Universe”¹ is the ensemble of all possible molecules, which is believed to contain at least 10^{33} organic molecules of possible interest for drug discovery². The “available drug-like chemical space” is formed by all the $\sim 10^8$ synthesized molecules, and is a small subset of the entire chemical space. It is also extremely biased, due to public health and economic factors, in favor of products of cheap chemical synthesis targeted against major diseases, with a robust business potential.

By contrast, the recent exhaustive enumeration of all compounds with up to 17 atoms³ (GDB17) provides an unbiased view of the chemical Universe. Albeit restricted to lower-size drug-like compounds, this collection is a much-needed baseline against which one may highlight the various biases and diversity “holes” affecting the so-far available compound collections. This is the undertaking of the present work, aimed at comparing the “baseline” GDB17 to size-matching subsets (≤ 17 heavy atoms) of publicly available compound libraries ChEMBL and PubChem, respectively.

A sample of $\sim 10^7$ compounds from GDB17 was compared to the complete ChEMBL17 (10^5 entries of ≤ 17 heavy atoms) and PubChem17 (10^7 entries) subsets. This comparison is driven by Generative Topographic Mapping, a probabilistic topology-preserving dimensionality reduction method, which projects the N -dimensional chemical space (here, ISIDA atom-pairs descriptors) onto a two-dimensional space.^{4,5} Mapping of compound sets of above-mentioned sizes required an in-depth rethinking of map generation strategies. Both the use of representative, small frame sets and the use of the entire GDB17-subset were shown to be technically envisagable strategies for map building, and results highlighted various interesting differences between the three compound collections.

References

1. Reymond J.-L. et al. *Medicinal Chemistry Communications* 2010, **1**, 30-38.
2. Polishchuk P.G., Madzhidov T.I., Varnek A. *Journal of Computer-Aided Molecular Design* 2013, **27**, 675–679.
3. Ruddigkeit L. et al. *Journal of Chemical Information and Modeling* 2012, **52**, 2864-2875.
4. Bishop C.M., Svensén M., Williams C.K.I. *Neurocomputing* 1998, **21**, 203–224.
5. Gaspar H.A. et al. *Journal of Chemical Information and Modeling* 2015, **55**(1), 84–94.

THEORETICAL ASSESSMENT OF TAUTOMERIC EQUILIBRIUM CONSTANTS IN SOLUTION: QSPR VS QM

**Gimadiev T.R.,^{a,b} Madzhidov T.I.,^a Nougmanov R.I.,^a Baskin I.I.,^c
Antipin I.S.,^a Varnek A.A.^{a,b}**

^aUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 4/5, Kazan,
420111, Russia, e-mail: Timur.gimadiev@gmail.com

^cMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

Chemical reactivity, spectral and physico-chemical properties of compounds are highly dependent on equilibrium between different tautomeric forms, but usually the form that is the most stable in water is considered in chemical databases or QSAR/QSPR modeling. Since many experiments are carried out in non-aqueous media or water-organic solvent mixtures, prediction of the tautomers' population as a function of solvent represents a real challenge.

In this work, we report QSPR modeling of tautomer equilibrium constants ($\log K_T$) in different solvents and water-organic solvent mixtures. Two types of external test were selected for examination of produced model and comparison with other methods. Each reaction was encoded as Condensed Graph of Reaction (CGR)[1], that were used for ISIDA fragment descriptors generation [2]. Solvents were encoded by 15 descriptors representing solvent polarity, polarizability, H-acidity, basicity [1] and temperature. QSPR models were built using SVM method with parameters optimized by genetic algorithm. They have reasonable predictive performance: consensus RMSE was about 0.65 $\log K_T$ units in 30 x 5-fold cross validation for universal models and 0.34-0.97 for specific models. RMSE of tautomer form distribution prediction on the universal model is about 17% (for consensus model predictions for test sets during cross-validation). The sign of $\log K_T$ defines the dominant tautomer, and the performance of models is measured as correctly predicted sign (CPS) ratio. The most stable tautomer was correct in 84% of cases. Test1 was predicted with RMSE 1.63 and CPS 54%, Test2 - with RMSE 0.73 and CPS 87%. However, when we excluded the zone of high noise of model from -0.7 to 0.7 $\log K_T$ (which corresponds to RMSE of test in CV of models), the CPS increased to 84% and 100% for Test1 and Test2, respectively.

For comparison, $\log K_T$ in several pure solvents were also assessed by quantum chemical (QC) calculations. For both external validation sets DFT B3LYP/6-311++G(d,p) with continuum solvation model was applied. RMSE of prediction for Test1 and Test2 was 5.8 and 1.62 with CPS 48% and 74% respectively. So, developed QSPR models perform better than QC calculations on given basis set.

References

1. Madzhidov T.I., Polishchuk P.G., Nougmanov R.I., Bodrov A.V., Lin A.I., Baskin I.I., Varnek A.A., Antipin I.S. Russian Journal of Organic Chemistry, 2014, 50 (4), 459-463.
2. Varnek A., Fourches D., Horvath D., Klimchuk O., Gaudin C., Vayer P., Solov'ev V., Hoonakker F., Tetko I.V., Marcou G. Current Computer-Aided Drug Design, 2008, 4 (3), 191-198.

PREDICTION OF RATE CONSTANT OF SN2 AND E2 REACTIONS USING CONDENSED GRAPH OF REACTION APPROACH

Gimadiev T.R.,^{a,b} **Madzhidov T.I.**,^a **Nougmanov R.I.**,^a **Bodrov A.V.**,^c
Antipin I.S.,^a **Varnek A.A.**^{a,b}

^aUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 4/5, Kazan,
420111, Russia, e-mail: Timur.gimadiev@gmail.com

^cKazan State Medicine University, Butlerova, 49, Kazan, 420012, Russia

Reaction rate constants are extremely important characteristics that make it possible not only to evaluate the dynamics of chemical processes but also to calculate product yields, to estimate the selectivity of competing processes, and so on. At the same time, modern chemists use mostly phenomenological rules to qualitatively estimate the effects of certain.

In this work we show an application of Condensed Graph of Reaction(CGR) as successful approach for modeling of reaction properties. As an input data two data sets of SN2 and E2 reactions were used. Chemical transformations corresponding to E2 and SN2 reactions, their conditions, and logarithms of rate constants (logk) were manually extracted from [1]. In total, 1043 reactions were extracted for E2 and 2100 reactions for SN2 with different conditions, solvents and their mixtures. Each one was encoded by Condensed Graph of Reaction (CGR), that were used for ISIDA fragment descriptors generation [2] with additional descriptors representing solvent polarity, polarizability, H-acidity, basicity [3] and temperature. QSPR models were built using SVM method with parameters optimized by genetic algorithm. The quality of models was evaluated using the determination coefficient (Q^2) and the mean square deviation of the predicted values from the experimental ones (the root-mean square error, RMSE). Five-fold cross-validation procedure was repeated 30 times. The so-called consensus model in which all intermediate models generated in the course of the cross-validation are

retained and used to predict logk for new reactions was used as the final one. Consequently, 150 predictions are obtained for each object and they are averaged which allows a decrease in the prediction error and an increase in the model stability due to the reduction of prediction noise. Resulting predictions gave $Q^2_{\text{cons}}=0.75$, $\text{RMSE}_{\text{cons}}=0.69$ for E2 dataset and $Q^2_{\text{cons}}=0.72$, $\text{RMSE}_{\text{cons}}=0.81$. Therefore, CGR approach showed good performance in predicting reaction rate constants by means of classic fragment based models.

References

1. Pal'm V.A. Usp. Khim., 30, No. 9, 1069 (1961).
2. Varnek A., Fourches D., Horvath D., Klimchuk O., Gaudin C., Vayer P., Solov'ev V., Hoonakker F., Tetko I.V., Marcou G. Current Computer-Aided Drug Design, 2008, 4 (3), 191-198
3. Madzhidov T.I., Polishchuk P.G., Nugmanov R.I., Bodrov A.V., Lin A.I., Baskin I.I., Varnek A.A., Antipin I.S. Russian Journal of Organic Chemistry, 2014, 50 (4), 459-463.

PREDICTIVE MODEL FOR HYDROGEN BONDED COMPLEXES WITH SINGLE AND COOPERATIVE HYDROGEN BONDS

Glavatskikh M.V.,^{a,b} Madzhidov T.I.,^b Solov'ev V.P.,^c Horvath D.,^a Marcou G.,^a Varnek A.A.^{a,b}

^aUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 4/5, Kazan, 420111, Russia, e-mail: mvglavatskikh@gmail.com

^cA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

This work is devoted to building a QSPR model for the prediction of Hydrogen Bond (HB) complexation strength. Hydrogen Bonding is the most investigated and the most important type of intermolecular interaction. The instances in which Hydrogen Bond plays a fundamental role are varied and span from drug-ligand interaction to self-assembling systems. Thus, the necessity of quick and precise calculations of the Halogen Bond thermodynamic parameters which reflect the strength of the interaction is in high demand.

The data used herein is based on Gibbs energy dG for 1:1 hydrogen bond complexation of various organic donors and acceptors in CCl_4 at 298K¹⁻³. Models based on ISIDA local descriptors were performed using Support Vector Machine (SVM) and Multiple Linear Regression (eMLR) methods on a set of 3388 organic complexes and validated in 3-fold cross validation. A consensus model returning the mean of values predicted by the most successful individual SVM models, based on various ISIDA fragmentation schemes^{4,5}, and including applicability domain assessment strategies (bounding box, standard deviation of consensus prediction) was challenged to predict ΔG for the HB complexation of an external test set of 641 complexes with single HBs and a set of 22 complexes of cooperative HBs, and its subsets. Different strategies of model validation have been suggested in order to investigate various scenarios with respect to presence / absence of the same H-bond acceptors and donors in the training and test sets. The $RMSE$ value of 2.17 kJ/mol for the most robust predicted class is within the experimental uncertainties.

References

1. Raevskii O.A., Solov'ev V.P., Grigor'ev V.Y. *Thermodynamic Characteristics of Hydrogen Bond of Phenols with Organic Bases*, VINITI, Moscow, 1988
2. Laurence C., Gal J.-F. *Lewis Basicity and Affinity Scales. Data and Measurement*, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, 2010
3. Terent'ev V.A. *Thermodynamics of Hydrogen Bond*, University of Saratov Kuibyshev, 1973
4. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J. Computer-Aided Mol. Design*, 2005, 19, 693-703
5. Ruggiu F., Solov'ev V., Marcou G., Horvath D., Graton J., Le Questel J.-Y., Varnek A. *Mol. Informatics*, 2014, 33, 477 – 487

PREDICTIVE MODELS FOR HALOGEN BOND BASICITY SCALE pK_{I_2}

Glavatskikh M.V.,^{a,b} Madzhidov T.I.,^b Solov'ev V.P.,^c Horvath D.,^a Marcou G.,^a Varnek A.A.^{a,b}

^aUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^bKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 4/5, Kazan, 420111, Russia, e-mail: mvglavatskikh@gmail.com

^cA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

This work is devoted to QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) models building of Halogen Bond basicity scale pK_{I_2} . The scale is based on the experimental 1:1 (B:I₂) complexation constant $\log K_{I_2}$ of organic compounds (B) with diiodine (I₂) as a reference halogen-bond donor in alkanes at 298 K. Models based on ISIDA local descriptors were performed using Support Vector Machine (SVM) and Multiple Linear Regression (eMLR) methods on a set of 598 organic compounds. A consensus model returning the mean of values predicted by the most successful individual SVM models, based on various ISIDA fragmentation schemes, and including applicability domain assessment strategies (bounding box, standard deviation of consensus prediction). This model has then been challenged, on the external test set of 11 *polyfunctional* compounds, for which unambiguous assignment of the measured effective complexation constant could not be assigned to either of halogen acceptor site. At this stage, developed models were used to predict $\log K_{I_2}$ of the acceptor sites followed by an estimation of the predicted effective complexation constant with the help of the ChemEqui program. The best consensus models perform well both in cross-validation (root mean squared error $RMSE = 0.45\text{--}0.56 \log K_{I_2}$ units) and external ($RMSE = 0.55$) set. The models are implemented on our website (<http://infochim.u-strasbg.fr/webserve/VSEngine.html>) together with the estimation of their applicability domain and an automatic detection of potential Halogen bond acceptors.

References

1. Laurence C., Graton J., Berthelot M., El Ghomari M.J. *Chemistry-a European Journal* 2011, 17, 10431-10444
2. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J. Computer-Aided Mol. Design*, 2005, 19, 693-703
3. Ruggiu F., Marcou G., Varnek A., Horvath D. *Mol. Informatics*, 2010, 29, 855 – 868
4. Ruggiu F., Solov'ev V., Marcou G., Horvath D., Graton J., Le Questel J.-Y., Varnek A. *Mol. Informatics*, 2014, 33, 477 – 487
5. Solov'ev V.P.; Tsivadze A.Y. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces* 2015, 51, 1-35.

VIRTUAL SCREENING OF *MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS* PROTEIN KINASE PKNB INHIBITORS USING ENSEMBLE DOCKING

Gordeeva V.D.,^a Osolodkin D.I.^b

^a*Moscow Institute of Physics and Technology, Institutskiy pereulok, 9, Dolgoprudny, 141700, Russia, e-mail: gordeeva.veronika@phystech.edu*

^b*Chumakov Institute of Poliomyelitis and Viral Encephalitides, Moscow, 142782, Russia*

The serine/threonine protein kinase PknB has been shown to be involved in processes of division and elongation of *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb*) and has been identified as an attractive drug target for tuberculosis therapy¹.

Structure-based screening approach is widely used in the early phases of drug discovery. Most current docking algorithms can treat only ligands as flexible, one approach to account for protein flexibility is ensemble docking. In the present work, we develop virtual screening method based on molecular docking into multiple crystal structures for *Mtb* kinase PknB inhibitors.

All available in Protein Data Bank (PDB) crystallographic structures of PknB were preprocessed using UCSF Chimera. Structures were aligned by the hinge residues' back-bone (residues 92-97). The validation database contained known PknB inhibitors² and decoys developed using DecoyFinder. Ligands were prepared using AmberTools и OpenBabel. Docking was performed with the flexible anchor-and-grow algorithm available in DOCK6.7³ using different scoring functions (Grid score, Contact score, Continuous score, Hawkins GB/SA score) and structural constraints (the hydrogen bonds with the GLU93 and the VAL95.) To evaluate the performance of ranking molecules the ROC method was employed.

According to our study, structures 1MRU, 2FUM, 3F69 form nondegenerate ensemble and Grid score leads to optimum early enrichment. Based on virtual screening of Kinase SARfari database were potential inhibitors PknB of interest for further biological screening identified.

References

1. Av-Gay Y., Everett M. The eukaryotic-like Ser/Thr protein kinases of *Mycobacterium tuberculosis*. *Trends Microbiol.* 2000. **Vol. 8**, № 5: 238–244.
2. Loughheed K.E. et al. Effective inhibitors of the essential kinase PknB and their potential as anti-mycobacterial agents. *Tuberculosis (Edinb).* Elsevier Ltd, 2011, **Vol. 91**, № 4: 277–286
3. Brozzel S. et al.. Evaluation of DOCK 6 as a pose generation and database enrichment tool *J. Comput. Aided Mol Des.*, 2012, **Vol. 6**:749-773.

KNODLE – A MACHINE LEARNING-BASED TOOL FOR PERCEPTION OF ORGANIC MOLECULES FROM 3D COORDINATES

Kadukova M.N.,^a Grudinin S.^{b,c,d}

^a*Moscow Institute of Physics and Technology, Institutskiy pereulok, 9, Dolgoprudny, 141700, Russia, e-mail: mn.kadukova@gmail.com*

^b*University Grenoble Alpes, LJK, F-38000 Grenoble, France*

^c*CNRS, LJK, F-38000 Grenoble, France*

^d*Inria, France*

Information about the chemical properties of atoms and bonds between them is very important for many computational methods in structural biology, medicine and bioinformatics. For example, the proper assignment of atom types and bond orders is crucial for the success of virtual screening methods in drug-design¹ as well as for the performance of some knowledge-based potentials².

We developed a prediction model based on nonlinear Support Vector Machines (SVM), implemented in a KNowledge-Driven Ligand Extractor called Knodle, a software library for the recognition of atomic types, hybridization states and bond orders in the structures of small molecules. The model was trained using an excessive amount of structural data collected from the PDBbindCN database.

Accuracy of the results and the running time of our method is comparable with other popular methods, such as NAOMI, fconv, and I-interpret.

On a set of 3,000 protein-ligand structures collected from the PDBBindCN general data set (v2014), the current version of Knodle along with NAOMI have a comparable accuracy of approximately 3.9% and 4.7% of errors, I-interpret made 6.0% of errors, while fconv produced approximately 12.8% of errors. On a more general set of 332,974 entries collected from the Ligand Expo database, Knodle made 4.5% of errors.

Overall, our study demonstrates the efficiency and robustness of nonlinear SVM in structure perception tasks.

Knodle is available at <https://team.inria.fr/nano-d/software/Knodle>.

References

1. Waszkowycz B., Clark D.E., Gancia E. *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* 2011, **2**
2. Neudert G., Klebe G. J. *Chem. Inf. Model.*, 2011, **51**

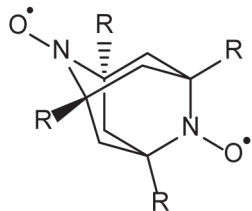
EFFECT OF SUBSTITUENTS ON THE PARAMETER OF INTRAMOLECULAR EXCHANGE INTERACTION IN N,N'-DIOXY-2,6-DIAZAADAMANTANE BIRADICAL

Khafizov N.R.,^a Madzhidov T.I.,^a Kadkin O.N.,^b Antipin I.S.^a

^aKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry, Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: nail-kh@yandex.ru

^bZavoisky Kazan Physical-Technical Institute, RAS, Sibirskii Trakt, 10/7, Kazan, 420029, Russia

Density-functional calculations of a series of stable organic biradicals on the basis of a N,N'-dioxy-2,6-diazaadamantane core with different substituents have been performed using the UB3LYP/6-311++G(2d,2p) method. Using breaking symmetry approach¹, the values of the exchange interaction parameter, J , between the two spin centers are calculated. The chemical formulas of the studied organic biradicals are follows:



R= H, CH₃, C₂H₅, C₃H₇, *i*-C₃H₇, F, Cl, Br, CF₃, CCl₃, CBr₃, CH₂Cl, CH₂Br, CH₂C₅H₆, CH₂OH, OCH₃

It is shown that the intramolecular exchange interaction is mainly ferromagnetic in nature, but the J parameter gradually decreases, changing to antiferromagnetic interaction for the last four substituents, in the following sequence: CH₂OH > H > CBr₃ > CCl₃ > CH₃ > C₂H₅ > C₃H₇ > *i*-C₃H₇ > F > Br > > OCH₃ > Cl > CH₂Cl > CH₂Br > CH₂C₅H₆ > CF₃ (see table).

Table 1. Values of the intramolecular exchange interaction parameter, J (cm⁻¹), for different R

CH ₂ OH	H	CBr ₃	CCl ₃	CH ₃	C ₂ H ₅	C ₃ H ₇	<i>i</i> -C ₃ H ₇
14.19	11.87	11.65	9.26	6.56	5.22	4.43	4.39

F	Br	OCH ₃	Cl	CH ₂ Cl	CH ₂ Br	CH ₂ C ₆ H ₅	CF ₃
1.45	1.34	0.33	0.13	-1.93	-2.35	-2.46	-7.33

It is concluded that the J parameter depends on the electron-donating/electron-withdrawing effects, geometry, and bulkiness of the substituents in the 1, 3, 5, and 7 positions of an adamantane core, and their specific interactions with the nitroxide radical groups.

References

1. Noodleman L., *J. Chem. Phys.* 1981, **74**, 5737.
2. Noodleman L., Baerends E. J., *J. Am. Chem. Soc.* 1984, **106**, 2316.

QSPR MODELS OF PHYSICAL PROPERTIES OF IONIC LIQUIDS: VALUABLE SUPPORT OF DATA QUALITY ANALYSIS

Klimchuk O., Delouis G., Marcou G., Varnek A.

*Laboratory of Chemoinformatics, University of Strasbourg, 1 rue Blaise Pascal,
67008, Strasbourg, France*

The ionic liquids (IL) are considered as design solvents constructed as an appropriate combination of an organic cation and anion. However, the number of possible cation-anion combinations is very large (some 10^{18}) which makes unrealistic their synthesis and experimental studies. Thus, the models able to predict various physical properties of IL are indispensable to design a desirable material.

In this work we report QSPR models for three most important IL properties – melting point, viscosity and conductivity. The training data were carefully selected from the literature and curated. Since absorbed water significantly affects IL properties, the compounds for which water content (%w) was not reported or those containing more than 0.05% water were discarded.

The models were built using the Principal Least Square (PLS), the ridge regression (RR) and the ϵ -SVR and different types of the ISIDA fragment descriptors. For each machine-learning method, the best individual models involving particular kinds of fragments have been selected for the consensus calculations on the external test sets. In cross-validation, the models achieved a reasonable accuracy which is comparable with estimated experimental errors (2 mS/cm for conductivity, 30 K for melting point and 50 cP for viscosity).

Two different data sets were selected models validation. *Test set 1* contained literature data that were not used in the model building. *Test set 2* assembled the data experimentally measured by our partner for a set of ILs provided by the Solvionic company. These calculations revealed significant improvement of the prediction performance due to models Applicability Domain (AD) – a combination of fragment control, bounding box and individual model convergence approaches.

The outliers' analysis helped us to pinpoint erroneous data. Close look at the original publications shows that these data points could be interpreted by incompleteness of experimental procedure of their measurements (e.g., %w is not reported or is too high). In this context, QSPR models may serve as a valuable support to analyze a quality of IL data.

References

1. Ruggiu F., Marcou G., Varnek A., Horvath D., Mol. Inf., 29 (2010) 855.

QSAR MODELS FOR PAMPA AND THEIR STRUCTURAL INTERPETATION

Kulinsky M.A.,^a Polischuk P.G.,^b Kuz'min V.E.^a

^aA.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute, NAS of Ukraine, Lustdorfskaya doroga, 86, Odessa, 65080, Ukraine, e-mail: docmax@inbox.ru

^bPalacký University Olomouc, Křížkovského 8, 771 47, Olomouc, Czech Republic

Pampa (parallel artificial membrane permeability assay) - permeability test using parallel artificial membrane (membrane phospholipid bilayer). It allows you to simulate the passive penetration (diffusion) and is a low-cost alternative to cellular models for the primary ADME screening of research compounds. This method is also widely used for measuring permeability in the early stages of the drug discovery, particularly for predicting the absorption of substances in the gastrointestinal tract.

The modeling dataset included 281 structurally diverse drug substances. The values of PAMPA permeability were obtained by Double Sink method¹. All compounds were divided into two classes.

Classification QSAR models have been produced based on 2D simplex descriptors and gradient boosting machine (GBM), support vector machine (SVM) and Random Forest (RF) statistical approaches. For developing models software tool SIRMS-QSAR² has been used. For all models five-cross validation was carried out.

The best accuracy and Cohen's k coefficient of developed QSAR models were obtained by Random Forest method (0.82 and 0.64, respectively). The accuracy of consensus model was 0.81 and Cohen's k coefficient – 0.63. With the help of previously developed universal approach³ was performed structural interpretation of obtained QSAR models and were identified fragments which affect studied property the most.

Obtained information can be useful in screening and prediction of ADME properties of biologically active compounds.

References

1. Avdeef A. Absorption and Drug Development, 2nd Ed., Wiley-Interscience: Hoboken, NJ, 2012.
2. <http://www.qsar4u.com>.
3. Polishchuk P.G., Kuz'min V.E., Artemenko A.G., Muratov E.N., Molecular Informatics, 2013, **32**, 843.

OPPORTUNITIES AND EFFICIENCY OF QSPR MODELS FOR INORGANIC COMPOUNDS

Kuz'min V.E., Ognichenko L.N., Timukhin E.V., Zinchenko V.F.

*A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute, NAS of Ukraine, Lustdorfskaya doroga, 86,
Odessa, 65080, Ukraine, e-mail: theorchem@gmail.com*

The overwhelming majority of QSAR/QSPR models are used for organic compounds (OC). At the present time there are few examples of QSPR solutions for inorganic compounds (IC)¹⁻⁶. The conceptual differences in the structural modeling of organic and inorganic compounds are the reason for this. The number of atom types for OC is much smaller than for IC, but the OC have more structural variety (molecular graphs) than the classical IC. The concept of molecule is rather conventionally for many crystal inorganic compounds, isomerism phenomenon (except for coordination compounds) is not widespread for IC. Thus, the majority of molecular structural descriptors used in QSAR/QSPR models are of little use to the inorganic compounds.

Thereupon, in the present work the approach based on the 1D-QSPR models is proposed for the IC⁷. In this approach the numbers of different combinations of atoms (from one to four) included in the gross formula of compound are used as descriptors. Atoms are characterized by labels that reflect their position in the element periodic table, electronegativity, ionic radius and other easily interpreted characteristics.

The efficiency of the developed approach is demonstrated for sets containing about a hundred different IC (oxides, halogenides, chalcogenides and other derivatives of various metals) which are potential components of optical materials. The appropriate 1D-QSPR models were developed for the melting points and the refractive indices of investigated IC.

References

1. Changjun Feng. *Chin. J. Anal. Sci.* 2002, **18**, 27.
2. Toropova A.P., Toropov A.A., Maksudov S.Kh. *Chem. Phys. Letters* 2006, **428**, 183
3. Lailong Mu, Hongmei He, Changjun Feng *Chinese J. of Chem.* 2007, **25**, 743.
4. Lailong Mu, Changjun Feng, Hongmei He *MATCH* 2007, **57**, 111.
5. Lailong Mu, Changjun Feng, Hongmei He *MATCH* 2007, **58**, 591.
6. Goudarzi N., Goodarzi M., Chamjangali M.A., Fatemi M.H. *Chinese Chem. Letters* 2013, **24**, 904.
7. Kuz'min V.E., Muratov E.N., Artemenko A.G., Gorb L.G., Qasim M., Leszczynski J. *Chemosphere* 2008, **72**, 1373.

Creation of the DATABASE AND EXPERT SYSTEM FOR HETEROGENEOUS HYDROGENATION in CONTINUOUS-FLOW

Latypov E.I.,^a **Neklyudov S.A.**,^b **Klimchuk O.**,^c **Antipin I.S.**,^{a,b} **Varnek A.**^{b,c}

^a*A.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS,
ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: ainaraslan@mail.ru*

^b*Kazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia*

^c*University of Strasbourg, Strasbourg, France*

The one of the actual problem nowadays is prediction of organic reactions conditions. Hydrogenation is one of the most common and important reactions in the organic chemistry, significant in the science as well in the industry. In these latter days technologies of the hydrogenation in continuous-flow conditions develop especially active, due to variety advantages: an experiment needs minimum quantity of reagents, required time is 15-30 minutes, experiment's conditions can be changed easily and experiment is fully automated (from the input of reagents to products collection stage).

In this work reactions of heterogeneous hydrogenation of aromatic compounds, that containing benzyl and nitro-group, are researched by using ThalesNano H-Cube reactor. This continuous-flow reactor allows hydrogenating in automated mode in various conditions (pressure, temperature, flow rate) with catalysts exchange. The metals of platinum group (Pt, Pd, Ru, Rh) and Pd(OH)₂, supported on solid carriers (activated carbon, Al₂O₃, CaCO₃, BaSO₄) are used as catalysts. Obtained reaction mixtures are analyzed by gas chromatography–mass spectrometry (GC-MS).

On the basis of the received data, creation of the expert system that allows predicting optimal conditions for hydrogenation reactions in continuous-flow reactors is planned. That will give an opportunity for synthetic chemists to choose optimal conditions for hydrogenation reactions without searching many various experimental conditions.

The work was supported by the Russian Research Foundation, project 14-43-00024.

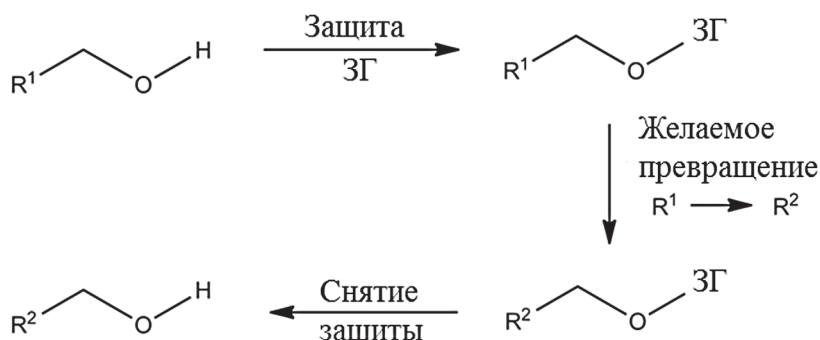
ASSESSMENT OF PROTECTIVE GROUPS REACTIVITY FROM DATA ANALYSIS

Lin A.I.,^{a,b} Madzhidov T.I.,^a Nugmanov R.I.,^a Antipin I.,^a Klimchuk O.,^b Varnek A.^b

^aKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry, Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: arkadij.lin@rambler.ru

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

Protective Group (PG) is a special chemical group which protects Functional Group (FG, OH group on the Figure below) during the synthesis. These groups help chemists to perform their reactions without any risk to transform undesirable parts of molecule.



The PG reactivity depends on the conditions in the reaction of deprotection (catalyst, solvent, additive). We have developed an approach able to annotate the PG reactivity in an automatic way as it is done in "Greene's Protective Groups in Organic Synthesis"¹. Our script, written in Python3, analyzes the Reaxys database, contained more than 142 000 reactions of catalytic hydrogenation, extracts reactions with PGs, considered in the Green's reactivity charts¹ (about 48 000 reactions), and standardizes the description of reaction conditions using the dictionary of synonyms, developed by the authors. It should be noted that we used the Condensed Graph of Reaction (CGR) approach² to apply usual chemoinformatics tools for the reactions. Statistical analysis of PG reactivity as a function of catalyst has been performed. The comparison of its results with the Green's reactivity charts¹ showed that we have contradictions in about 10% of all recommendations what might be explained by the Charts¹ resulted from manual analysis of rather limited number of reactions.

At the moment our program can be used as an offline-service for the PG reactivity assessment.

References

1. Wuts P.G.M. *Greene's Protective Groups in Organic Synthesis*; Wiley, 2014.
2. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J Comput Aided Mol Des* **2005**, 19, 693.

This work was supported by the Russian Science Foundation, contract 14-43-00024.

SIMILARITY-BASED ASSESSMENT OF OPTIMAL REACTION CONDITIONS

Lin A.I.,^{a,b} Madzhidov T.I.,^a Nugmanov R.I.,^a Antipin I.,^a Klimchuk O.,^b Varnek A.^b

^aKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry, Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: arkadij.lin@rambler.ru

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

A priori assessment of optimal reaction conditions for a given transformation is the holy grail of synthetic organic chemistry. Unfortunately, it is very hard for chemist to predict reaction conditions for new transformation based only on his/her own experience.

In this presentation we demonstrate a new expert web-system, able to predict optimal conditions for reactions of catalytic hydrogenation. For this purpose, we reformulated classical expression about the similarity, which now reads as follows: "Similar reactions go under similar conditions". We have analyzed the database, contained more than 48 000 reactions of catalytic hydrogenation, taken from Reaxys. Reaction have been encoded into hashed fingerprints and classified into 2 classes: transformation occurs and some other transformation occurs but not the interested one. As a transformation we took the process of deprotection (cleavage of Protective Group). To apply usual chemoinformatics tools to reactions we used the Condensed Graph of Reaction (CGR) approach¹.

The system finds reactions, similar to user's query, and selects the most similar examples from the first and the second classes. As a similarity metrics we used Tanimoto coefficient. To select the class, the system compares the difference between the Tanimoto coefficients for the 1st class and for the 2nd with the threshold value ΔT . If $|T_1 - T_2| > \Delta T$, it means that the user's reaction should occur under conditions, similar to those for the reaction from the 1st class. Applying the Receiver Operating Characteristic (ROC) analysis we have found an optimal value of ΔT equaled to 0.05. The system's performance has been assessed in Leave-One-Out (LOO) cross validation and on the external test set containing reactants with one or several Protective Groups. *The Balanced Accuracy* in LOO is about 0.9, whereas in the external set reaction conditions for 10 out of 12 reactions were correctly predicted.

At the moment, the system is in the implementation phase. It will be located on our web-server (cimm.kpfu.ru) and it will be available in the near future.

References

1. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J Comput Aided Mol Des* **2005**, 19, 693.

This work was supported by the Russian Science Foundation, contract 14-43-00024.

AUTOMATIC REACTION PROCESSING AND STANDARDIZATION WORKFLOW

Nugmanov R.I.,^a Madzhidov T.I.,^a Varnek A.^{a,b}

^a*Kazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: stsouko@live.ru*

^b*University of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France*

A priori assessment of optimal reaction conditions for a given transformation is the holy grail of synthetic organic chemistry. Usually, the choice of reaction conditions proceeds in essentially empirical way: the chemist relies either on his/her own experience or on information for similar reactions retrieved from the literature. However, the exponential growth of current chemical information makes the task of analysis and generalization extremely difficult for the human mind alone and requires special approaches and tools in order to efficiently extract such knowledge from raw data. Both information retrieval and automatic knowledge extraction suffer from the only one problem: despite a very large amount of reaction data exist in the literature that are manually collected by such database vendors like CAS (100 mln reactions in database) and Reaxys (60 mln reactions in database) the quality of extracted data in database is not satisfactory.

The problem could be caused not only by errors in the structure extraction but also by intrinsic features of chemical compounds like tautomerisation, epimerisation, racemization and others. These problems are usually solved by means of structure standardization and automatic or manual data curation procedures.

However for databases of chemical reactions there are problems that never appeared for chemical substances additionally to regular structure standardization issues.

We present a prototype of the system for reaction standardization. It consists from different modules responsible for special steps or reaction cleaning. For the time being it could not resolve all mentioned problems but already allows solving the most common ones: atom-to-atom mapping errors by using CGR approach¹, unbalanced reactions, salts and tautomerisation.

References

1. Hoonakker F., Lachiche N., Varnek A. Condensed Graph of Reaction: considering a chemical reaction as one single pseudo molecule. *Int. J. Artif. Intell. Tools* **20**, 253–270 (2011).

CONCEPTUAL DFT AND MOLECULAR DOCKING COMBINATION FOR UNDERSTANDING LIGAND-RECEPTOR BINDING MODE

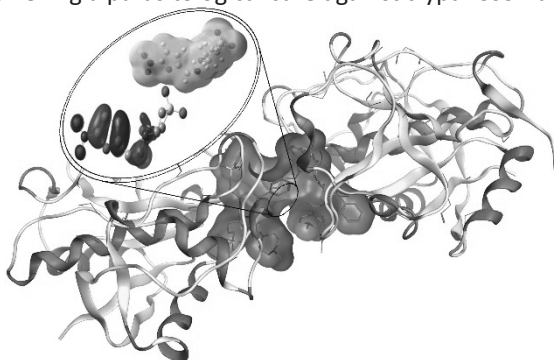
Salah T.,^a Belaidi S.,^a Melkemi N.,^a Daoud I.^b

^aGroup of computational and pharmaceutical chemistry, LMCE laboratory, University of Biskra, Biskra, 07000, Algeria, e-mail: toufik.salah@hotmail.com

^bLaboratory of natural products and bio actives-las nabio, Department of chemistry, Aboubakr Belkaid University, Tlemcen, 13000, Algeria

Current knowledge about chagas disease, the potentially life-threatening illness, caused by the protozoan parasite (*T.Cruzi*), has led to the development of new drugs and the understanding of their mode of action.^{1,2}

Chemists face a bewildering amount and diversity of data in their quest to discover the physical and chemical properties of substances. Therefore, conceptual density functional theory offered a perspective for the interpretation/prediction of experimental/theoretical reactivity data,^{3,4} although, enhanced reactivity can be affected by steric hindrance effects, which is not encapsulated in the definition of the reactivity indicators, for this reason, we propose the combination of conceptual DFT and Molecular Docking axes for understanding the electronic and steric behaviors of receptor-binding mode of trypanocidal compounds to guide design and achieving a parasitological cure against *trypanosoma cruzi*.⁵



All the obtained results from conceptual DFT, Molecular Docking and literature experiments were found to be in accordance. This, improve the affinity of this investigation in understanding *Trypanosoma cruzi* inhibition.

References

1. Belaidi S., Salah T., Melkemi N., Sinha L., Prasad O., J. Comput. Theor. Nanosci. 2015, 12, 2421.
2. Salah T., Belaidi S., Melkemi N., Tchouar N. Rev. Theor. Sci. 2014, 3, 355.
3. Geerlings P., De Proft F., Langenaeker W. Chem. Rev. 2003, 103, 1793.
4. Geerlings P., De Proft F. Phys. Chem. Chem. Phys. 2008, 10, 3028.
5. Trott O., Olson J. J. Comput. Chem. 2010, 30, 455.

CHEMICAL SPACE OF HYDROGENATION REACTIONS: VISUALIZATION AND ANALYSIS

Sidorov P.O.,^{a,b} Lin A.I.,^a Madzhidov T.I.,^a Varnek A.^{a,b}

^aKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: pavel.o.sidorov@gmail.com

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

While modern databases contain millions of chemical compounds and reactions, the analysis of such a data still stays a challenge for computational chemistry: first, the raw data has to be cleaned and curated carefully, and second, most conventional methods cannot process such an amount of entities. This work presents the analysis of a dataset of hydrogenation reaction coupled with protection/deprotection process, extracted from Reaxys database.

The dataset consists of more than 48000 reactions, curated and annotated with a certain leaving group. Each molecule is represented as a Condensed Graph of Reaction (CGR) – a pseudo-molecule form where forming and cleaving bonds are referred as dynamical¹. ISIDA Fragment descriptors² (sequences of atoms and bonds of length 2 to 6) are used.

The method used in this work is Generative Topographic Mapping³ (GTM) – a non-linear method of dimensionality reduction, which allows building interpretive 2D maps, useful for both visualization and modeling. GTM has several intrinsic parameters, and a scan has been done to choose the best ones. The choice was based on a number of measures: model likelihood and goodness of clustering (Gamma function, distribution and distance consistency, kernel density estimation)⁴.

The resulting map provides with an interesting insight into the studied dataset. Most big classes (for example, cleavage of a benzyl group from aliphatic alcohol) form distinct clusters. The zones where several classes overlap are often populated with a type of reaction that has not been taken into consideration when classes were assigned (a side reaction or a cleavage of several different groups simultaneously).

References

1. Hoonakker F., Lachiche N., Varnek A., Wagner A. *J. Artificial Intelligence Tools*, 2011, **20**, 253.
2. Varnek A., Fourches D., Hoonakker F., Solov'ev V.P. *J. Computer-Aided Molecular Design*, 2005, **19**, 693.
3. Kireeva N., Baskin I., Gaspar H., Horvath D., Marcou G., Varnek A. *Mol. Inf.*, 2012, **31** (3-4), 301.
4. Ovchinnikova S.I., Bykov A.A., Tsivadze A.Yu., Dyachkov E.P., Kireeva N.V. *J. Cheminform.*, 2014, **6**, 20.

DEVELOPMENT OF WEB SERVICE FOR MODELLING OF CHEMICAL REACTIONS

Varlamov O.P.,^a Nugmanov R.I.,^a Madzhidov T.I.,^a Marcou G.,^b Horvath D.,^b Varnek A.^{a,b}

^aKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia, e-mail: stsouko@live.ru

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

Modern information technologies, such as technologies of machine training, are widely used in chemistry for search of dependences like "structure - property".

A large number of resources for work with molecules is created, there are available tools for creation and operating by chemical information in databases (JChem, Bingo), there are web resources for modeling "structure - property" at molecules (OChem).

At the same time for chemical reactions is not yet created accessible tools that enable experts in the field of chemoinformatics to grant access to their models.

In this work web service for work with chemical reactions was created. The mechanism for quality check atom-atom mapping with use of software, and also in the interactive mode is offered. The algorithm is developed for identification of types of reactions.

Project developed on Python3/Flask-restful and Pony ORM/PostgreSQL on NGINX/uwsgi host (server side) and JavaScript with Bootstrap (client side).

During this research the tools for prediction models also created. Chemical reaction in generated models has represent in the form of a condensed graph (CGR, Condensed Graph of Reaction)¹. The additional parameters as temperature and solvent characteristics has also included into set of structure descriptors. (Q)SPR has found using method of support vector machine (SVM) or Random forest. The model performance was assessed by the determination coefficient Q^2 (squared correlation coefficient) between the predicted and experimental values as well as by the root mean square errors (RMSE) or Balance Accuracy (BA) or Kappa-statistics.

The webservice is available at <http://cimm.kpfu.ru>

References

1. Hoonakker F., Lachiche N., Varnek A. Condensed Graph of Reaction: considering a chemical reaction as one single pseudo molecule. *Int. J. Artif. Intell. Tools* **20**, 253–270 (2011).

MICROSCOPIC MECHANISM OF SUPERCONDUCTING TRANSITION TEMPERATURE FORMING FOR $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

Yuryeva E.I.^{a,b,c}

^a*The Ural State College named after I.I. Polzunov, prospekt Lenina, 28,
Yekaterinburg, 620014, Russia*

^b*Ural state agrarian university, Karla Liebknehta, 42, Yekaterinburg, 620075, Russia*

^c*Ural Technical Institute of Communications and Information Technology (Branch) SEI HPE
Siberian State University of Telecommunications and Information Sciences, Repina, 15,
Yekaterinburg, 620000, Russia, e-mail: yuryeva55@mail.ru*

From the work¹ it follows that if we consider the inelastic interaction of a free conduction electron with lattice of atomic cores the temperature $T_c = \frac{2}{n} \frac{|P_{ce}(N_e) - P_{ce}(N_e - 1)|}{k_B}$ will be the superconducting transition temperature because at this case the scattering of conduction electrons on the lattice cores will be absent.

In this paper, taking the value of $T_c (n_2 = 2) = 110$ K for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ from the work¹ for the upper limit of the interval of calculated superconducting transition temperatures, and $T_c (n_1 = 3) = 73$ K value for the lower boundary of this range and using a formula $T_c = \frac{n_1 + n_2}{n_1 n_2} \frac{|P_{ce}(N_e) - P_{ce}(N_e - 1)|}{k_B}$, we roughly estimated the value of the superconducting transition temperature for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$: T_c (approximate) = 91.5 K.

Considering the experimental value² 92 K of the superconducting transition temperature for the $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ as a true value of the T_c , we defined the boundary of our absolute error $\Delta T_c = 0.5$ K.

As a result, we have found that the value of the superconducting transition temperature for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, calculated in this study, with an absolute error of 0.5 K was within the range of $T_c = 91.5 \pm 0.5$ (K). The relative error of the approximate value of the superconducting transition temperature for $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ obtained in this paper was 0.5%.

References

1. Yuryeva E.I. The relaxational model of superconducting transition temperature forming and its possible application // The Workbook of Extended Abstracts of V International Conference FPS-15. October 5-9, 2015 r., Malakhovka – Moscow. Moscow, LPI 2015. P. 93.
2. Taraskon J.M., Barloux P., Miceli P.F., Green L.H., Hull G.W., Eibschutz M., Sunshine S.A. Structural and physical properties of metal (M) substituted $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{M}_x\text{O}_{7-y}$ perovskit // Physical Review B. 1988. V. 37, N 13. P. 7458 - 7469.

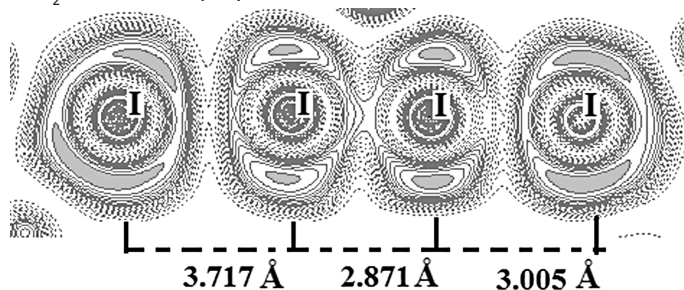
QUANTITATIVE TRENDS IN THERMAL AND SPECTRAL PROPERTIES FOR ORGANIC POLYIODIDES CONTAINING I_2

Yushina I.D., Mikhailov S.A., Bartashevich E.V.

*South-Ural state university, prospekt Lenina, 76, Chelyabinsk,
454080, Russia, e-mail: idu-xda@mail.ru*

Polyiodides with bound I_2 find application as iodophors and components of dye-sensitized solar cells. Predicting of practically important properties of polyiodides is still a topic of interest, though the most popular trend is structural approach based on the analysis of geometrical parameters of noncovalent interactions. However, the usage of this approach is limited in cases when the variety of iodides from I^- to complex polyiodides is treated consistently.

A row of crystals with organic cations, including asymmetric triiodides $I^-...I_2$, pentaiodides I_5^- and polyiodides of complex structure $I_3^-...I_2...I_3^-$ was studied with the help of Raman spectroscopy and thermal analysis techniques. In all cases the decomposition start temperature was below 130 °C and valence vibration of bound I_2 in Raman spectra was located within the range 140–180 cm^{-1} . These experimental parameters were used as the criteria of bound I_2 existence in polyiodide anions.



Our experimental data were enriched with quantum-chemical calculations with periodic boundary conditions (DFT/B3LYP method, basis sets DZVP, TZP and DZP-DKH in program packages CRYSTAL14 and TOPOND). Analysis of electron localization function (ELF) [3] was made in the studied crystals, the features of ELF redistribution in the region within polyiodide anions were found. It was shown that the wavenumbers for I–I valence vibration quantitatively correlate with local ELF values in the corresponding bond critical points. Consistent usage of experimental and theoretical methods can give a clue to predicting the influence of bound I_2 on physicochemical properties of polyiodides.

References

1. Megen M., Reiss G.J. *Inorganics*. 2013, **1**, 3.
2. Yushina I.D., Kolesov B.A., Bartashevich E.V. *New J. of Chem.* 2015, **39**, 6163.
3. Bader R.F.W., Johnson S. *et al. J. Phys. Chem. A*. 1996, **100**, 15398.

SOFTWARE RELIABILITY OF PAYMENTS AND PREDICTIONS IN SOLUTION OF MULTIDIMENSIONAL PROBLEM SIMULATION OF EQUILIBRIUM

Yusupov R.A., Bakhteev S.A., Khalilova A.R.

Kazan National Research Technological University, Karla Marxa, 68, Kazan, 420015, Russia, e-mail: yusupovraf@yandex.ru

Equilibrium modeling systems requires use of a large number of parameters (temperature, pressure, reactant concentration etc). The number of derivatives of the compounds formed from basic compounds, an average of more than thirty. The number of calculated parameters for a total of more than forty. Thus, there is the problem of ensuring reliability incorporated into the mathematical model parameters. The basis for ensuring the reliability of multi-dimensional solutions of the problems are:

1. The experimental data obtained in a large scope of the basic parameters of the studied system and a variety of experimental methods.

2. Calculation methods (mainly numerical methods) with a visual display of spaces of solutions and experimental data on the partition of the region with the dimension of no more than three or four.

4. Adoption of the MNC in absolute or weighted as a criterion making. The criterion of discrimination, adoption patterns MNSP. Fisher and Student criteria considered abstract and inadmissible without evidence of conformity of a random process. Criterion solutions corresponds to the area of the experimental and calculated curves can be used only in special cases.

5. Sharing the three main numerical methods for making both the simplex method (the method of tabulation), the Monte Carlo method, the method inertialess ball.

6. Respect the sequence of calculations: the use of a priori information in the literature; drawing up the material balance and the formation of the phase equations; calculation of the number of particles in the system; carrying out calculations with simple system states, for example, at low concentrations the presence of basic compounds and a homogeneous phase.

For example, metal ion systems - water - ion hydroxyl ispolzemye as a precursor for the target compounds reagent is a demonstration of the above algorithm.

The work was performed as part of the approved job № 4.1584.2014 / For competitive state of the job on 2014-2016 gg. Measurements were carried out on the equipment CCU KNRTU.

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

DATABASE-ASSISTED SOLVING OF INVERSE PROBLEM IN CHEMICAL KINETICS

Mitrichev I.I., Mironova E.A., Jhensa A.V., Koltsova E.M.

Dmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, e-mail: imitrichev@muctr.ru

The inverse problem in chemical kinetics (IPCK) falls into the category of ill-posed problems, i.e., those problems that show the nonuniqueness of the solution. Among the variety of solutions one should choose those solutions that fit experimental observations. To that end, it is necessary to process and save on a computer a great amount of heterogeneous experimental data in an easy accessible during IPCK solution form. Creation of a database suits well for this purpose.

Methodology of database (DB) application in the IPCK solution process consists of several steps:

1. input of experimental data for reaction kinetic mechanism steps into the database;
2. the automatic construction of kinetic parameter search ranges on the basis of the information from the DB;
3. kinetic parameter estimation.

To implement the stage 1 of the methodology a computer application with graphical user interface was written in C++. This application facilitates data input. User can set catalyst properties, kinetic parameters, which include parameters accounting for induced catalyst inhomogeneity (lateral interactions)¹.

A kinetic parameter DB for several catalytic reactions, such as CO oxidation and CO-NO on Pt catalyst was created, and an estimation of the parameters of these reactions with a glance to literature values was performed. This allowed for a significant reduction of uncertainty intervals of kinetic parameter values. For example, the uncertainty interval was reduced from 16,1-135,5 kJ/mol (almost non-identifiable parameter) to 27,9-30,7 kJ/mol (well identified parameter) for N₂O decomposition on Pt. The application of methodology discussed let us facilitate the input data specification for the kinetic parameter estimation, and drastically save researcher's time.

References

1. Kee R. J., Coltrin M. E., Glarborg P. Chemically reacting flow: theory and practice. – John Wiley & Sons, 2005. – 928 p.

The work was financially supported by RFBR, project 14-07-00960.

THEORETICAL PREDICTIONS OF pK_a VALUES FOR SOME NITROPHENOLS

Pustolaikina I.A., Voznyuk S.S., Kutzhanova K.Z., Kurmanova A.F.

*Y.A. Buketov Karaganda State University, Universitetskaya, 28, Karaganda,
Kazakhstan, e-mail: irinamoroza@mail.ru*

Phenols and their derivatives show the ability to donate a proton and to react as acids:



There are nineteen isomers nitrophenols by the number and position of the substituents: three isomers of mononitro phenol, six isomers of dinitro phenol, six isomers of trinitro phenol, three isomers of tetranitro phenol and one isomer of pentanitro phenol. We found pK_a values from handbooks only for ten nitrophenols. Valid reference data for other nine isomers are absent because the difficulty of pK_a experimental evaluation for poorly soluble in water and often unstable compounds. It was interesting to evaluate theoretically the acidity of nine nitrophenols by using methods of quantum chemistry.

It has been shown¹⁻³, that protonation energy can be used for quantum-chemical characteristics of acids strength. Deprotonation energy of acid can be estimated quantum chemically as the difference between total energy of acid HA and A⁻ anion, formed by deprotonation of acid. Deprotonation energy of ten nitrophenols by DFT/ UB3LYP 6-31G CPCM (solvent - water) method with the help of Gaussian-2009 software package was estimated. Direct proportional relationship between nitrophenols acidity and deprotonation energy, estimated by quantum chemical methods, was demonstrated:

$$pK_a = 174,8 * DE_{\text{депрот.}} - 75,971, \quad (2)$$

The obtained dependence (2) was used for the theoretical estimation of nine nitrophenols acidity, the reference pK_a value of which in the literature is absent.

References

1. Pustolaikina I.A. Bulletin of KSU. «Chemistry» series, 2009, 3(57), .4-9.
2. Pustolaikina I.A. Bulletin of KSU. «Chemistry» series, 2011, 3(63), 3-8.
3. Pustolaikina I.A., Batirova E.R., Asheeva A.A., Kurmanova A.F., Kutzhanova K.Zh. Theoretical and experimental Chemistry: Abstracts of the Vth International scientific conf., 2014, Karaganda, 39.

AN EXPERIENCE IN MOLECULAR DYNAMICS APPLICATION TO SIMULATION OF SUPRAMOLECULAR ORGANIZATION OF PHTHALOCYANINE DERIVATIVE

Sotsky V.V., Moskvina D.O., Usoltseva N.V.

*Ivanovo State University, Ermaka, 39, Ivanovo, 153025, Russia,
e-mail: nv_usoltseva@mail.ru*

The combination of molecular mechanics and molecular dynamics allows to simulate large systems, including the ability of detailed consideration of liquid crystals. However, there are no literature data for the all-atom molecular mechanics models, allowing to reproduce the supramolecular organization of the liquid crystal materials forming the columnar phases, including phthalocyanine derivatives. Initially, the aim of investigation was the selection of parameters to 2,3,9,10,16,17,23,24-octapentylphthalocyanine (H_2 -Pc-(C_5)₈) exhibiting a hexagonal columnar mesophase.

Simulations of the system consisting of 125 molecules (22250 atoms) of H_2 -Pc-(C_5)₈ were carried out in the original software MDSimGrid GPU. The parameters correspond to AMBER force field combining with OPLS-AA force field. The potential energy of the system is represented as follows:

$$U(\vec{r}) = U_{\text{bonds}} + U_{\text{angles}} + U_{\text{torsions}} + U_{\text{vdW}} + U_{\text{electrostatic}}$$

Because the partial charges for the simulated compound are absent in both fields, their calculation was carried out by the DFT method in GAMESS software package. Next, a series of molecular dynamics simulation in a wide range of temperatures corresponding to isotropic, columnar hexagonal and crystalline phase were carried out. The simulation interval at each temperature was 20 ns.

It was discovered that in the case of using all-atom model there is no formation of the ordered hexagonal phase and only isotropic – amorphous state transition was observed. Simplification of the simulated system by neglecting the partial charges of the alkyl substituents leads to the reproduction of columnar hexagonal and crystalline phases. Thus, to reproduce the properties of the compounds which form the columnar phase, all-atom molecular dynamics model in represented form is not applicable. Simplification of the periphery description (it is advisable to use a model of united atoms, described in the literature), or complementation of the current all-atom model by more accurate methods for electrostatic interactions description is necessary.

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, grant 4.106.2014K.

QSAR- MODELING OF ACETYLCHOLINESTERASE INHIBITORS

Vasiliew M.N.,^a Khayrullina V.R.,^a Gerchikov A.Ja.,^a Zarudiy F.S.^b

^aBashkir state university, Z. Validi, 32, Ufa, 450074, Russia, e-mail: vasilyev_maksim16121990@mail.ru;

^bBashkir State Medical University, Lenin, 3, Ufa, 450000, Russia, e-mail: zarudii.f@yandex.ru

A quantitative analysis of relationships between structures of different classes of biologically active compounds from data base ChEMBL¹ and their acetylcholinesterase catalytic activity of albino mice inhibition efficiency was made by the program GUSAR (General Unrestricted Structure Activity Relationships)¹⁻². In general 6 statistically significant QSAR-models ($R_{\text{train set}}^2 > 0.8$, $R_{\text{test set}}^2 > 0.5$, $Q^2 > 0.7$) for prediction of IC_{50} values for various inhibitors derivatives against acetylcholinesterase outbred white mice rats were created based on MNA- and QNA-descriptors, as well as consensus of their combinations. These models can be used for quantitative prediction of potential anti-tumor drugs against acetylcholinesterase. Atoms and structural fragments of the studied structures influencing on increase and decrease acetylcholinesterase inhibition were identified by GUSAR visualization of quantitative "structure-activity" relationships in the created models. The results of structural analysis of the contribution of the different functional groups in the activity of acetylcholinesterase inhibition can be considered in the molecular design of active substances of known anticancer drugs in order to enhance the efficiency of their inhibitory action acetylcholinesterase.

References

1. ChEMBL: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>.
2. Filimonov D.A., Zakharov A.V., Lagunin A.A., Poroikov V.V. *SAR and QSAR in Environmental Research*, 2009, **20**, 679.
3. Masanda V.H., Mahajana D.T., Patil K.N., Dawale N.E., Hadda T.B., Alafeefy A.A., Chinchkhede K.D. *Der Pharma Chemica*, 2011, **3**, 517.

This work was supported by the RFBR grant 14-04-97035 and project № 4.299.2014 / K, running within the design of the public tasks in the field of Education and Science of the Russian Federation scientific activity.

STERIC COMPLEMENTARITY OF N-ARILALKILCYTISINE DERIVATIVES WITH THE ACTIVE CENTER OF NICOTINIC ACETYLCHOLINE RECEPTOR

**Vasilyev M.N.,^a Khayrullina V.R.,^a Asfina D.R.,^a Abdullina D.R.,^a
Gerchikov A.I.,^a Zarudy F.S.^b**

^aBashkir state university, Z. Validi, 32, Ufa, 450074, Russia,
e-mail: vasilyev_maksim16121990@mail.ru;

^bBashkir State Medical University, Lenin, 3, Ufa, 450000, Russia, e-mail: zarudii.f@yandex.ru

The steric complementarity of 28 derivatives of the N-arylalkilcytisine with active center of nicotinic acetylcholine receptor was studied by the method of molecular docking with AutoDock 4.2¹. The information of biological activity of these organic substances is provided in work Tasso et al.². It provides that 80% of investigated compounds characterized by average energy of binding of binding with active center of the enzyme. Biologically active conformations for all structures are found. The binding sites of these compounds with the active center of nicotinic acetylcholine receptor are identified.

References

1. <http://autodock.scripps.edu/>
2. Tasso B., CanuBoido C., Terranova E., Gotti C., Riganti L., Clementi F., Artali R., Bombieri G., Meneghetti F., Sparatore F. *Journal of medicinal chemistry*, 2009, **52** (14), 4345-4357.

This work was supported by RFBR grant 14-04-97035 and project № 4.299.2014 / K, executed under the project of the state order of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation in the field of scientific research.

DESCRIPTORS BASED ON CONTINUOUS INDICATOR FIELDS FOR 3D-QSAR STUDIES

Zhokhova N.I., Baskin I.I.

*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia,
e-mail: zhokhovann@gmail.com*

CIF descriptors are based on the concept of Continuous Indicator Fields (CIF),¹ a particular case of Continuous Molecular Fields.^{2,3} Each CIF descriptor is defined by an isotropic Gaussian function centered at a specific point in the physical space. The positions of these points can be chosen by applying hierarchical cluster analysis to Cartesian coordinates of all atoms in all molecules in the aligned training set. The value of a CIF descriptor for a molecule is equal to the overlap integral between this function and the sum of analogous Gaussian functions centered on all atoms in the molecule. The resulting matrix of CIF descriptors can be used to build 3D QSAR models.

There are several advantages of using CIF descriptors over the original methodology of building CIF 3D QSAR models based on kernels.¹ Firstly, CIF descriptors can efficiently be computed for big data sets. Secondly, any machine learning method, regression or classification; linear or non-linear, can be applied to build 3D QSAR models. Thirdly, CIF descriptors can be aggregated to form 3D analogs of fragment descriptors, which can be used to interpret 3D QSAR models from structural viewpoint.

CIF descriptors are implemented in R scripts and available as a part of the Continuous Molecular Fields project.⁴ They were used in conjunction with Support Vector Machines and several other machine learning methods to build 3D QSAR models for several benchmarking data sets.

References

1. Sitnikov G.V., Zhokhova N.I., Ustynyuk Yu.A., Varnek A., Baskin I.I. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 2015, **29**, 233.
2. Baskin I.I., Zhokhova N.I. *J. Comput. Aided Mol. Des.* 2013, **27**, 427.
3. Baskin I.I., Zhokhova N.I. *Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics*, 2014, Springer, **17**, 433.
4. <http://sites.google.com/sites/conmolfields/>

COMPUTER SEARCH DIHYDROPYRIMIDINE DEHYDROGENASE INHIBITORS AMONG URACIL DERIVATIVES

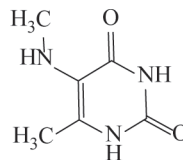
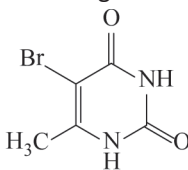
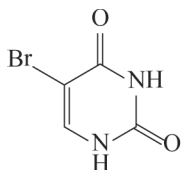
Zigangirov A.S.,^a Khayrullina V.R.,^a Gimadieva A.R.,^b Nasjirova R.F.,^a Mustafin A.G.,^{a,b} Zarudiy F.S.^c

^aBashkir state university, Z. Validi, 32, Ufa, 450074, Russia, e-mail: Veronika1979@yandex.ru

^bUfa Institute of Chemistry, RAS, prospekt Oktyabrya, 71, Ufa, 450054, Russia

^cBashkir State Medical University, Lenin, 3, Ufa, 450000, Russia

The steric complementarity of 38 derivatives of uracil with the active dihydropyrimidine dehydrogenase centers (DPD) was studied by the method of molecular docking with AutoDock 4.2¹⁻² program. Three compounds which sterically conform to the binding site of the enzyme were found. The compounds are comparable with the reference inhibitors in numerical values of the free energies of binding to DPD: uracil and 5-fluorouracil.



References

1. <http://autodock.scripps.edu/>
2. van Kuilenburg A.B.P., Haasjes J., Richel D.J., Zoetekouw L., van Lenthe H., de Abreu R.A., Maring J.G., Vreken P., Gennip A.H. *Clinical Cancer Research*, 2000, **12**, 4705.

This work was supported by the RFBR grant 14-04-97035 and project № 4.299.2014 / K, running within the design of the public tasks in the field of Education and Science of the Russian Federation scientific activity.



INTERNATIONAL SYMPOSIUM

SELF-ASSEMBLY AND SUPRAMOLECULAR ORGANIZATION

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
В ПЯТИ ТОМАХ

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016



КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

LONG-DISTANCE ELECTRONIC COMMUNICATION IN SELF-ASSEMBLED ARCHITECTURES

Bassani D.M.

*Institute of Molecular Sciences, University of Bordeaux,
33405, Talence, France, e-mail: d.bassani@ism.u-bordeaux1.fr*

In recent years, the development of nanoscale molecular devices has emerged as a viable route to intelligent functional materials operating at the molecular level. For applications in organic electronics, the organization of electrophilic moieties is a prerequisite. Such organization, which can be attained by making use of supramolecular interactions, can lead to materials exhibiting controlled electron and energy transfer processes. A major feature of the self-assembly process is that individual components will spontaneously combine in a predetermined fashion due to the presence of complementary molecular recognition sites. An advantage of supramolecular architectures is their ability to accommodate geometries not easily obtained by conventional synthesis, such as proximal arrangements of distant orthogonal units. This can lead to interesting photochemical and photophysical behavior, such as the observation of additional electronic interactions, or the control of excited-state processes.¹⁻⁴

References

1. *Chem. Soc. Rev.* **2014**, 43, 4179
2. *NPG Asia Mat.* **2014**, 6, e116.
3. *ACS Nano*, **2016**, 10, 998; *Macromolecules* **2013**, 46, 1591.
4. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 9584; *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2012**, 14, 8859.

MOLECULAR TECTONICS BASED ON PORPHYRIN DERIVATIVES: CHIRALITY AND DIRECTIONALITY

Bulach V., Marets N., Vulpe E., Hosseini M.W.

Laboratoire de Tectonique Moléculaire, UMR 7140, University of Strasbourg, 4, rue Blaise Pascal, 67000 Strasbourg, France, e-mail: bulach@unistra.fr

Pursuing our approach in molecular tectonics based on porphyrin derivatives, we have explored the possibility of designing in the solid state enantiomerically pure materials based on the porphyrin backbone. The preparation and structural characterization in the crystalline phase, by single-crystal X-ray diffraction, of chiral infinite Metal-Organic frameworks (MOFs) based on chiral porphyrins will be presented in the first part of the talk.

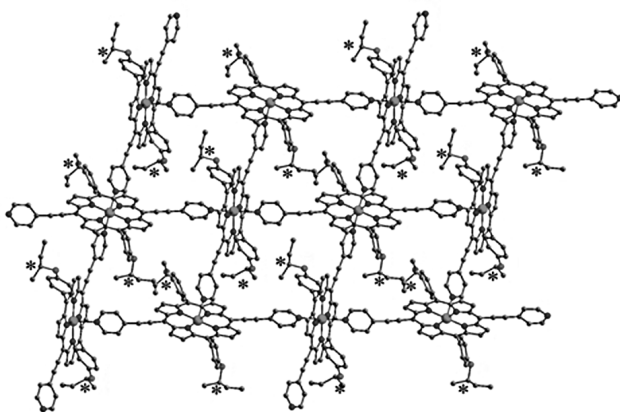


Figure 1. A portion of a 2D chiral coordination network obtained from a chiral Zn-porphyrin

The second part of the talk will be devoted to the formation of directional networks, obtained either in the crystalline phase or by physisorption on graphite surface. These assemblies result from the interaction of acentric porphyrins bearing two different coordination sites with a suitable transition metal ion.

References

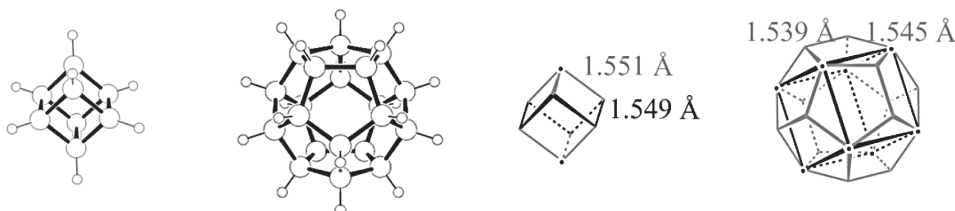
1. Bulach V., Hosseini M.W. "Porphyrin-based tectons in molecular tectonics", In *"Handbook of Porphyrin Science"*, Eds. K. Kadish, K. Smith and R. Guilard, World Scientific, 2011, **13**, 299 - 391.
2. Marets N., Bulach V., Hosseini M.W. *New J. Chem.* 2013, **37**, 3549.
3. Sguerra F., Bulach V., Hosseini M.W. *Dalton Trans.*, 2012, **41**, 14683.
4. El Garah M., Marets N., Bonacchi S., Mauro M., Ciesielski A., Bulach V., Hosseini M.W., Samori P. *J. Amer. Chem. Soc.* 2015, **137**, 8450.
5. Studener F., Müller K., Marets N., Bulach V., Hosseini M.W., Stohr M. *J. Chem. Physics.*, 2015, **142**, 101926.

PLATONIC-SOLID GEOMETRY HYDROCARBONS CUBANE AND DODECAHEDRANE CHANGE THEIR SYMMETRY UPON ENTERING A CRYSTAL LATTICE: CPMAS ^{13}C NMR STUDIES

Bechmann M.,^a Mueller N.,^a Glaser R.^{a,b}

^aInstitute of Organic Chemistry, Johannes Kepler University Linz, Austria

^bDepartment of Chemistry, Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva 84105, Israel,
e-mail: rglaser@bgu.ac.il



The atomic coordinates of crystalline cubane and dodecahedrane afford only *pseudosymmetric* O_h and I_h geometries, since the very small deviations in bond lengths and bond angles are not perceivable to our eyes (see above-left). We were challenged to find a more visually definitive method to illustrate the crystallographic finding that their true solid-state point group symmetries are lowered to S_6 and T_h , respectively. Cubane has six asymmetrically-chirotopic off-axis carbons in the form of a *puckered ideal hexagon* (1.549 Å/side) and a pair of enantiotopic C_3 -chirotopic on-axis carbons. In dodecahedrane there are six pairs of enantiotopic achirotopic off-axes carbons and eight C_3 -chirotopic on-axis carbons forming the vertices of a 2.493 Å/side *ideal cube*. It was reasoned that differences in the local magnetic fields around the diastereotopic nuclei would be sensitive enough to provide anisochronous signals in the ^{13}C CPMAS NMR spectra in the ratio of 6:2 (cubane) and 12:8 (dodecahedrane). The spherical molecules undergo rapid fast topomerizations of their diastereotopic nuclei at ambient temperature to afford single time-averaged signals. Reduced mobility at 100 Kelvin afforded two well-resolved cubane signals close to the expected ratio of 6:2. The corresponding dodecahedrane spectrum showed sharp peaks from a mixture of polymorphic crystalline forms. This finding is commensurate with Peter Schreiner's observation that sublimation of dodecahedrane deposited both needles and prisms on the cold finger. Our investigation is still in progress. Ambient temperature CPMAS build-up relative initial rates show that cubane is ca. four times more mobile than dodecahedrane.

References

1. Glaser R. *Symmetry, Spectroscopy and Crystallography: The Structural Nexus*, Wiley-VCH, Weinheim, 2015.

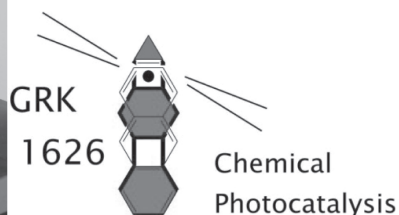
VISIBLE LIGHT PHOTOCATALYSIS – MOLECULAR AND SUPRAMOLECULAR ASPECTS

König B.

Institute of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry and Pharmacy, University of Regensburg, 93040 Regensburg, Germany, e-mail: burkhard.koenig@ur.de

Light is a fascinating reagent for chemistry: It provides a lot of energy to drive endothermic process or overcome kinetic barriers and it leaves no trace in the reaction mixture. Although the use of visible light in chemistry is an old topic,¹ applications in energy generation and organic synthesis have received a lot of attention over the last years.

The lecture presents the key concepts of visible light photoredox catalysis and selected recent results from our laboratories.^{2,3} Particular the use of more than one photon to activate stable bonds for synthesis is discussed.^{4,5}



References

1. Ciamician G. *Science* 1912 September 27.
2. Hering T., Mühldorf B., Wolf R., König B. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, **55**, 5342.
3. Meyer A.U., Slanina T., Yao C.J., König B. *ACS Catal.* 2016, **6**, 3695.
4. Ghosh I., König B. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016 DOI: 10.1002/anie.201602349.
5. Ghosh I., Ghosh T., Bardagi J.I., König B. *Science* 2014, **346**, 725.

MESOPOROUS MIL-101 : HOST-GUEST CHEMISTRY AND FUNCTIONAL PROPERTIES

Fedin V.P.

*A.V. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 3,
Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: cluster@niic.nsc.ru*

In this paper, a new effective strategy for post synthetic supramolecular modification of mesoporous metal-organic framework material MIL-101 is considered. This approach has been successfully used for development of new highly effective CO₂ adsorbents, novel hybrid photocatalysts, and also materials with high proton conductivity.

We successfully obtained a novel hybrid material PANI@MIL-101 by intra channel polymerization of aniline in the mesoporous metal-organic framework MIL-101. Introduction of N-rich polyaniline molecule significantly improved binding affinity of material to CO₂ and PANI@MIL-101 demonstrates low isosteric heat of CO₂ adsorption $Q_{st} = -22$ kJ/mol. The hybrid material demonstrated BET surface area 631 m²/g, adsorption capacity of CO₂ 2.26 mmol/g at 273 K and 1.62 mmol/g at 293 K (1.2 bar). PANI@MIL-101(Cr) doesn't adsorb N₂ at 273 K and demonstrates the highest selectivity of CO₂ over N₂. These features in addition to high chemical stability and good recyclability of CO₂ make the hybrid material a perspective adsorbent for selective recovery of CO₂ from a flue gas.

The new hybrid photocatalyst — Bi(III) impregnated in the metal-organic framework matrix — has been obtained and tested, displaying an outstanding activity which exceeds that of pure BiOCl preparing in the similar synthetic conditions. These results allow us to propose that this strategy can be successfully expanded further 1) to other Bi(III) oxohalides and 2) to other MOFs with different porosity, controlling the size of BiOX particles and access of various organic substrates. This will yield a new family of highly active photocatalysts.

A new class of materials with high proton conductivity was obtained by inclusion of imidazolium or benzimidazolium triflate into the nanocages of MIL-101. These hybrid materials demonstrate high proton conductivity $\sigma \sim 10^{-1}$ S/cm at 230 °C and RH 15%.

This work was supported by the Russian Science Foundation, Grant 14-23-00013.

ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

RATIONAL DESIGN, SYNTHESIS AND PROPERTIES OF FUSED-RING-EXPANDED PHTHALOCYANINES AND AZA-BODIPYS

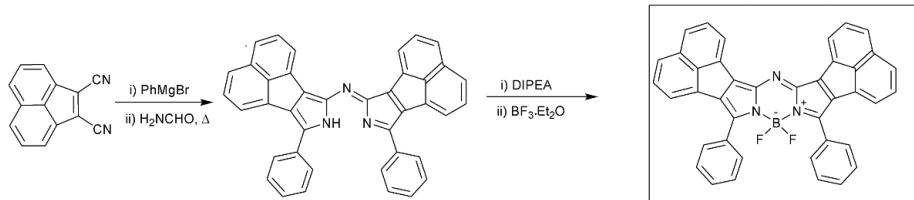
Mack J.,^a Majumdar P.,^a Harris J.,^a Lizhi Gai,^b Maohu Shi,^b Tebello Nyokong,^a Zhen Shen^b

^aDepartment of Chemistry, Rhodes University,

Grahamstown 6140, South Africa, e-mail: j.mack@ru.ac.za

^bState Key Laboratory of Coordination Chemistry, Nanjing National Laboratory of Microstructures, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University, Nanjing 210093, China

The potential utility of non-benzo fused-ring-expanded phthalocyanine¹ and azadipyromethene boron difluoride (aza-BODIPY)² analogues for photodynamic therapy and near infrared (NIR) region sensor applications is well-established. Attempts to prepare fused-ring-expanded aza-BODIPY analogues with benzene, pyrazine and naphthalene rings have demonstrated that their properties can vary markedly when different fused ring systems are fused on the 2-carbons of the two pyrrole ring moieties.^{3,4} The synthesis of an NIR absorbing acenaphthalene fused-ring-expanded aza-BODIPY dye is reported.⁵ 1,2-dicyanoacenaphthylene was used as a precursor. To our knowledge, despite this phthalonitrile analogue being reported over 40 years ago,⁶ it has not been used previously to synthesize phthalocyanine or aza-BODIPY compounds.



In contrast with the analogous naphtho-fused compound,³ the acenaphthalene-fused analogue was found to be stable. Further progress on the synthesis of non-benzo fused-ring-expanded and -appended phthalocyanine and BODIPY analogues will be described.

References

1. Kudrevich S.V., van Lier J.E., Galpern M.G., Luk'yanets E.A. *Can. J. Chem.* 1996, **74**, 508.
2. Lu H., Mack J., Yang Y., Shen Z. *Chem. Soc. Rev.* 2014, **43**, 4778.
3. Lu H., Shimizu S., Mack J., You X.-Z., Shen Z., Kobayashi N. *Chem. Asian J.* 2011, **6**, 1026.
4. Mack J., Wildervanck M., Nyokong T. *Turk. J. Chem.* 2014, **38**, 1013.
5. Majumdar P., Mack J., Nyokong T. *RSC Adv.* 2015, **5**, 78253.
6. Herold D.A., Rieke R.D. *J. Org. Chem.* 1979, **44**, 1359.

THIACALIX[4]ARENE-FUNCTIONALIZED VESICLES AS PHOSPHORESCENT INDICATORS FOR PYRIDOXINE DETECTION IN AQUEOUS SOLUTION

Solovieva S.E.,^{a,b} Burilov V.A.,^a Mironova D.A.,^a Ibragimova R.R.,^a Antipin I.S.^{a,b}

^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

^bA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: svsol@iopc.ru

Thiacalix[4]arene derivatives adopting 1,3-*alternate* conformation have a great potential as artificial amphiphilic ligands. In this work amphiphilic tetracarboxylate derivatives of p-tert-butylthiacalix[4]arene were obtained by click reactions of the corresponding azido derivatives with acetylene dicarboxylic acid. Embedding of the amphiphilic tetraacids in DPPC vesicles was studied by DLS, AFM, turbidity techniques and by probing with merocyanine 540. The obtained DPPC–calixarene vesicles are effective antennae for Tb(III) ion luminescence.

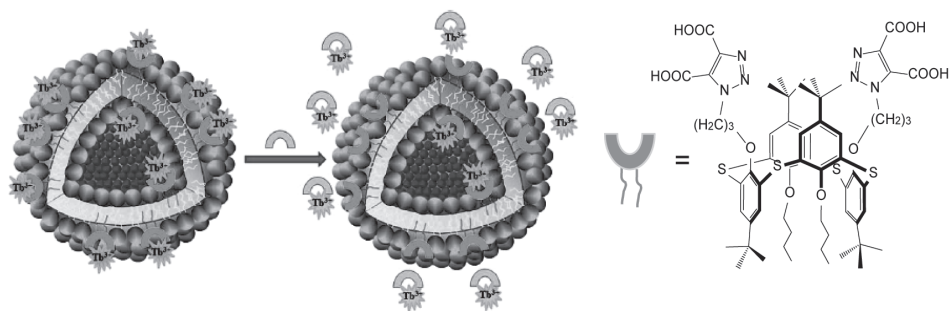


Figure 1. Schematic representation of “stripping” principle of analyte detection based on calixarene-Tb(III) decorated vesicles.

It allows the use of DPPC–calixarene-Tb(III) vesicles for the selective detection of analytes with a higher affinity for Tb(III) due to cation removal from the calixarenes in the DPPC bilayer. It was found that pyridoxine hydrochloride can be selectively detected at the 7 μ M concentration in the presence of a 100 fold excess of different biologically important molecules, like amino acids, adenosine phosphates, sugars, amines and ammonium salts.

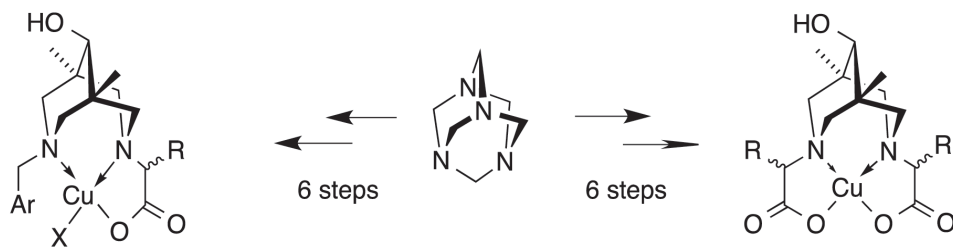
This work was supported by the Russian Science Foundation, project 14-13-01151.

SUPRAMOLECULAR AND COORDINATION CHEMISTRY OF 3,7-DIAZABICYCLO[3.3.1]NONANES IN APPLICATION FOR PET

Vatsadze S.Z.

*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: zurabych@gmail.com*

This report summarizes the results of four long time work in the field of 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane's (bispidine) chemistry¹ and points out novel directions of research for the future². In the first part of the lecture the current achievements and known features of this type of ligands are discussed including the possibility of bispidines to form supramolecular polymers both in crystals and in gel-phase. In the second part we will discuss the ways of the possible application of bispidines and their complexes as bioactive compound. The problem of short decay time can be solved by use of new radiopharmaceuticals containing long-lived isotopes, particularly, ⁶⁴Cu. To do this, the elaboration of easily modified ligand systems with high affinity to the metal cation and with wide possibilities of chemical modifications including the conjugation to the biological vectors is proposed.



References

1. Vatsadze S.Z. et al: *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 1992, **41**, 2131-2131; *Dokl. Chem.*, 1994, **341**, 201-205; *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 1995, **44**, 440-442; *Chem. Heterocycl. Comp.*, 1996, 770-774; *Chem. Heterocycl. Comp.*, 1997, 356-366; *Mendeleev Commun.*, 1999, **9**, 103-105; *Rapid Commun. Mass-spectr.*, 2000, **14**, 1949-1953; *Chem. Heterocycl. Comp.*, 2000, 1266-1271; *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 2005, **54**, 1825-1835; *Russ. J. Org. Chem.*, 2006, **42**, 1225-1231; *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 2007, **56**, 1555-1560; *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 2008, **57**, 2207-2209; *Acta Cryst.*, 2012, **E68**, o2373; *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 2014.
2. Vatsadze S.Z. et al: *Tetrahedron*, 2014, **70**, 7854-7864; *Mendeleev Commun.*, 2016, in press.

This work is supported by Russian Science Foundation, grant 16-33-00114.

ARYL SUBSTITUTED DOTA DERIVATIVES AS REAGENTS FOR RADIOMETAL CHELATE CONJUGATION TO TRANSPORT BIOMOLECULES

Zubenko D.,^a Oshchepkov M.,^a Fedorov Yu.,^a Kalmykov S.,^{b,c} Egorova B.,^b **Fedorova O.**^{a,b}

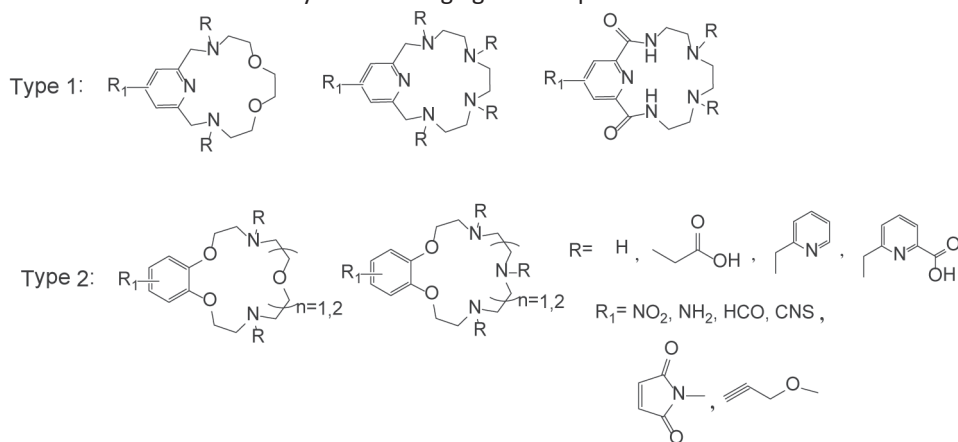
^aA.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, RAS, Vavilova, 28,
Moscow, 119991, Russia, e-mail: fedorova@ineos.ac.ru

^bMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

^cNational Research Centre "Kurchatov Institute", ac. Kurchatova sq., 1,
Moscow, 123182, Russia

Bifunctional chelating agents have been used widely to derivatize tumor-specific monoclonal antibodies with radiometal ions for cancer imaging and therap. Since most radionuclides are metals, the conjugation of antibodies to radiometal complexes represents one of the most versatile strategies for selective delivery of diagnostic or therapeutic radiation to primary tumors or metastatic disease.

In the present report the synthesis and complex formation analysis of the bifunctional derivatives of the azamacrocyclic chelating agents are presented.



Novel generation of produced bifunctional radiometal chelates has improvements with greater thermodynamic, kinetic, and physiological stability, as well as more versatile chemistry for attachment to biomolecules. The developed macrocyclic chelating agents possess relatively rigid, preorganized cavities which enable them to demonstrate the high rate of incorporation of the metal ion into the chelate complex and to bind a wide variety of metal ions with extremely high stability constants.

Acknowledgements. We thank the Russian Foundation for Basic Research 16-33-00617 and RAS program 1.35P for financial support.

LIGHT TRAPPING BY TUNABLE PLASMON COUPLING IN UNTRATHIN FILMS OF ORGANIC CHROMOPHORES

Zvyagina A.I.,^a Ezhov A.A.,^b König B.,^c Gorbunova Y.G.,^a Birin K.P.,^a Tsivadze A.Yu.,^a Arslanov V.V.,^a Kalinina M.A.^a

^aA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: kalinina@phych.e.ac.ru

^bMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

^cInstitut für Organische Chemie Universität Regensburg 31 Universitätsstrasse, Regensburg 93040, Germany

We reports a new flexible and convenient approach to enhance the absorption of visible light in the ultrathin coatings of organic dyes by using tunable plasmonic “spectral lenses” of gold nanoparticles.¹ Because their spectral characteristics are precisely tunable to allow the matching of maximal absorbancies of the organic dyes and localized surface plasmons, these unique 2D colloids are capable of selectively magnifying the absorbance bands in the electronic spectra of the films of structurally and chemically different organic chromophores.

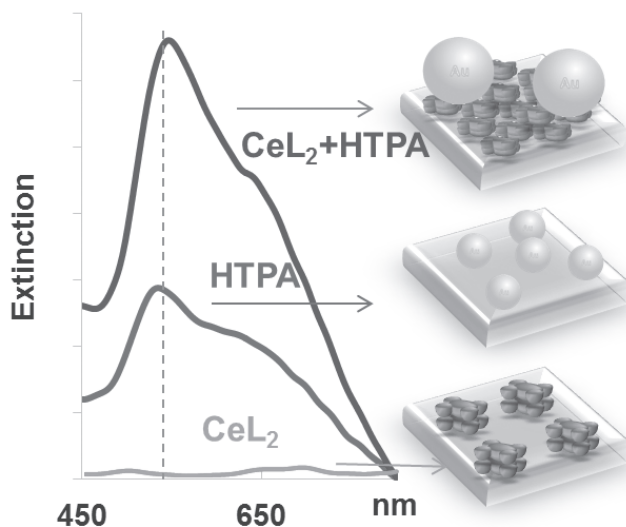


Figure 1. Plasmon resonance enhancement of light absorption at 550 nm in a hybrid planar system fabricated from a monolayer of CeL₂ dye and structurally tailored ensemble of AuNPs.

References

1. Zvyagina A.I., Ezhov A.A., Ivanov V.K., Arslanov V.V., Kalinina M.A. *Journal of Materials Chemistry C* 2015, **3**, 11801

УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

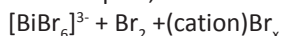
POLYHALIDE COMPLEXES OF Bi(III) – A NEW CLASS OF COORDINATION COMPOUNDS OF BISMUTH

Adonin S.A.,^{a,b} Gorokh I.D.,^b Sokolov M.N.,^{a,b} Fedin V.P.^{a,b}

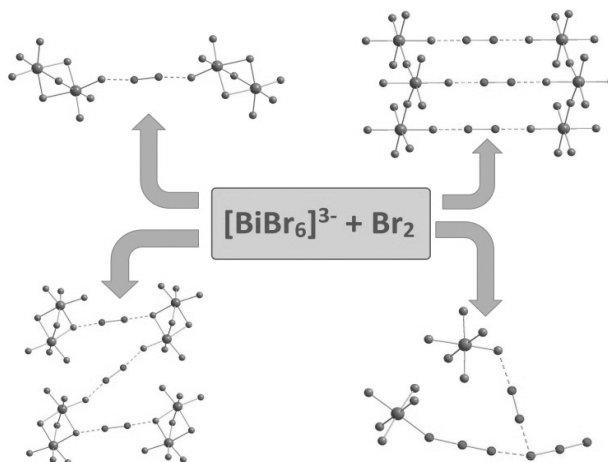
^aA.V. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 3,
Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: adonin@niic.nsc.ru

^bNovosibirsk State University, Pirogova, 2, Novosibirsk, 630090, Russia

In this report, we show that reactions



in HBr solutions may result in anionic polybromide Bi(III) complexes – the compounds where $\{\text{Br}_2\}$ units are connected with bromide ligands of Bi(III) coordination sphere by specific supramolecular contacts, yielding in $\{\text{Br}_x\}^y$ -type polymeric ligands. The structure of anionic part strongly depends on the nature of cation used in reaction. According to the XRD data, 4 structural types of various topology and Br/Bi ratio were found (Fig. 1)^{1,2}



Mixed-halide complexes containing $\{\text{Bi-I-I-Br}\}$ fragments can be obtained using the same synthetic strategy.

References

1. Adonin S.A., Gorokh I.D., Abramov P.A. et al. *Dalton Trans*, 2016, **45**, 3691.
2. Adonin S.A., Gorokh I.D., Samsonenko D.G. et al. *Chem. Commun.* 2016, in press

This work has been supported by RScF, Grant 14-23-00013.

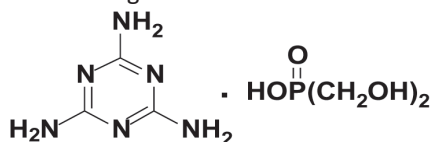
DOZE-DEPENDENT CHANGES OF PHOSPHOLIPID'S BILAYERS UNDER MELAFEN AQUEOUS SOLUTIONS INFLUENCE AT WIDE CONCENTRATIONS RANGE

Alekseeva O.M.,^a Kremmentsova A.V.,^a Shibryaeva L.S.,^a Kim Yu.A.^b

^aEmanuel Institute of Biochemical Physics, RAS, Kosygina, 4, Moscow,
119334, Russia, e-mail: olgavek@yandex.

^bInstitute of Cell Biophysics, RAS, Institutskaya, 3, Pushchino, 142290, Russia

The dose-dependence of aqueous solutions of Melafen (plant growth regulator - melamine salt of bis (oximethyl) phosphinic acid) influence to multilammellar liposomes at wide concentration range was investigated.¹



Phase states of dimyristoilphosphatidylcholine (DMPC) under the DSC multilammellar liposomes melting was tested. Changing of thermodynamic parameters was registered, when the rates of heating were varied.^{1,2}

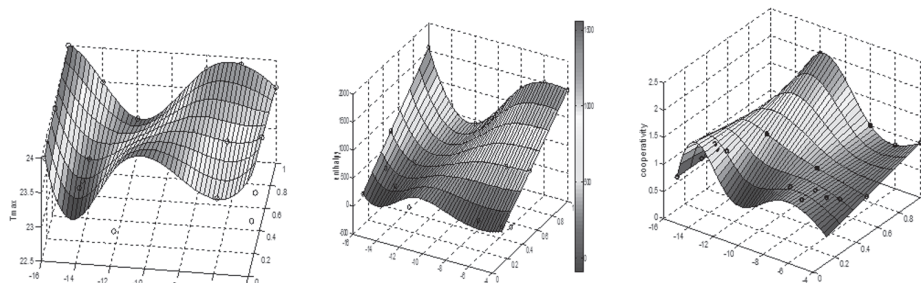


Figure 1 Thermodynamic parameters of DMPC main phase transition: T_{max} , heat capacity, cooperativity

Enthalpy, maximum temperature and cooperatives of thermo induced transition changed considerably under melafen (10^{-17} , 10^{-16} M) and (10^{-6} , 10^{-5} M) Change are smaller under 10^{-13} 10^{-10} M.

References

- 1 Alekseeva O.M., Shibryaeva L.S., Kremmentsova A.V., Yagolnik E.A., Kim Yu. A., Golochapov A.N., Burlakova E.B., Fattacfov C-G.G., Konovalov A.I. Influence of melafen aqua solutions at wide region of concentrations to phospholipid membrane microdomains // *Reports of academy of science*. V. 439, №4, 2011. P. 548-550.
2. Alekseeva O.M., Krivandin A.V., Shatalova O.V., Rikov V.A., Fattacfov C-G.G., Burlakova E.B., Konovalov A.I. Study of Melafen interaction with phospholipid membranes. // *Reports of academy of science*. V. 427, № 6, 2009. P. 837-839.

SELF-ORGANIZATION OF CHARGED METAL COMPLEXES IN SALINE AND SOLUTIONS OF SURFACTANTS, MACROCYCLES AND POLYMERS

**Amirov R.R., Ziyatdinova A.B., Zhuravleva Yu.I., Solodov A.N., Burilova Ye.A.,
Nasyrova Z.A., Atlasova Z.Z.**

*Kazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan,
420111, Russia, e-mail: ramirov@kpfu.ru*

Formation of metal complexes in solutions usually is a stepwise process of solvent molecule's substitution by ligand's molecules or ions, and is characterized by stability constants. Meanwhile, the introduction of specific substances into such solutions can lead to discrimination or stabilization of certain complex forms as a result of significant changes in the concentration range of their formation. In addition, considerable variation of a number of properties (optical, magnetic, etc.) exhibited by these solutions is possible. Thus, the modification of some indicators by certain surfactants is used in analytical chemistry for increasing the sensitivity of the analysis. Formation of complexes, modified by surfactants, macrocycles or polymers is promising in view of developing new materials with improved performance.

The formation highlights for ionic complexes of a series of transition metal ions (Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Mn^{2+} , Fe^{3+}) or rare earth metal ions (Gd^{3+} , Tb^{3+}) with various ligands in aqueous solutions containing oppositely charged particles revealed by the authors during the experimental research are discussed in the report. Among the charged particles are the alkali and alkali-earth metal cations, ionic forms of surfactants and macrocycles, and soluble polymers. The detected stabilization of cobalt(II) thiocyanate anionic complexes by metal or surfactant cations in presence of nonionic micelles is provided by formation of solubilized associates. The self-organization in formation of iron(III) complexes with salicylic acid (and pyrocatechol) derivatives in solutions containing alkali and alkali-earth metal cations as well as cationic surfactants and polyelectrolytes was documented for the first time. Similar phenomenon for Gd(III) lead to solutions of complexes with substantially increased paramagnetism, while for Tb(III) - to a stronger luminescence of its complexes which can be of practical use in medical diagnostics (MRI and optical imaging).

This work was funded by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the project part of the state assignment in the sphere of scientific activities.

COMPLEX FORMATION OF POLYACIDS WITH Fe^{3+} IONS IN AQUEOUS MEDIA.

Gorshkova M.Yu., Volkova I.F., Grigoryan E.S., Voronina Z.D.

*A.V. Topchiev Institute of Petrochemical Synthesis, RAS, Leninskii prospekt, 29,
Moscow, 119991, Russia, e-mail: mgor@ips.ac.ru*

Interaction Fe^{3+} ions with polycarboxylic acids - polyacrylic acid, hydrolyzed copolymers of maleic anhydride and vinyl ethers were studied in aqueous media. The charge density on polyacids chains were differed from one carboxylic group per monomer unit for the polyacrylic acid up to two for copolymers of maleic anhydride with methylvinyl ether (MVEMA) and four for copolymer of divinyl ether and maleic anhydride (DIVEMA). The complex formation in mixtures with components ratio expressed as $[\text{Fe}^{3+}] / [\text{COO}^-]$ varied from 1:10 up to 10:1 was studied; the properties of resulting complexes were determined by DLS, ζ -potential and turbidity measuring methods. It was found that sequential addition of Fe^{3+} to the polyacid solutions in acid media led to formation of mainly insoluble complexes. The amount of Fe^{3+} in precipitate and supernatants were determined by UV and ICP methods after separation of mixtures by centrifugation. The maximum amount of precipitate was formed in mixtures at components ratio $[\text{Fe}^{3+}] / [\text{COO}^-]$ from 1: 5 to 1: 3. The further increasing iron concentration in mixtures caused complexes overcharging and fully dissolution of the precipitate at an equivalent component ratio. Notably the soluble positive charged complexes were formed at this condition that was confirmed by data of ξ -potential measurement method. The regions of existence of positive charged soluble complexes were determined by the turbidimetry data. The dependence of particles size in the components mixtures from condition of its formation were studied by DLS method. It was shown that main parameters determine the sizes particles were the components ratio as well as pH value. Thus unimodal particles with sizes about $100 \div 130$ nm were formed in the mixtures with component ratio from 1:1 to 3:1 in acidic medium. The further increasing Fe^{3+} amount in the mixtures led to multimodal particles formation. These features were valid for all investigated polyacids. The best capability to form soluble complexes was found for polyacrylic acid and DIVEMA, but in the last case copolymer polymerization degree should be at least in two times higher than for polyacrylic acid. The influence of pH value on complex formation was elucidated for DIVEMA Fe^{3+} complexes. It was shown that soluble positively charged complexes formed in acidic medium lost its solubility at neutral pH the most probably due to change of ratio of the charges in the mixtures. According to potentiometric date the ionization degree of DIVEMA increased from $\sim 20\%$ at pH 4, 5 up to 60% at pH 7, 2. In the conclusion the data obtained can be essential for development the macromolecular xelating agent for Fe^{3+} ions that is especially important for treatment of thalassemics.

THE GUEST-HOST COMPLEXES OF NITROXIDE SPIN PROBES WITH CUCURBITURILS

Meshkov B.B.,^a Avakian V.G.,^a Dzikovski B.G.,^{a,b} Alfimov M.V.,^a Livshits V.A.^a

^a*Photochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow,
119421, Russia, e-mail: vlivshi@mail.ru*

^b*Center for Advanced ESR Technology (ACERT), Cornell University, Ithaca, NY 14853, USA*

Studying supramolecular guest-host complexes can provide important insights into the nature of non-covalent interactions. Also, these complexes were suggested as prospective nanodevices for molecular recognition and chemosensing.

In this work we study formation, structure and molecular dynamics of the guest-host complexes of cucurbituril CB7 with spin-labeled analyte analogs using different approaches: linear, non-linear, and multifrequency ESR spectroscopy, as well as DFT calculations. Different nitroxide radicals are used as guests: Tempo (**I**), protonated Tempamine (**II**), derivative of **I** having positive charge on the quaternary N atom (**III**) and the spin labeled indole (**IV**).

The binding constants, the environment polarities of the reporter NO group, and the kinetic accessibilities of NO group for water soluble reagents were determined in aqueous solutions. The rotational diffusion coefficients of the complexes which provide information on the shape and hydrodynamic volume of the complexes were obtained from ESR spectral simulations.

In order to eliminate the overall rotation of complexes and study the guests rotational mobility inside the CB7 cavity, magnetically diluted solutions of complexes in solid CB7 matrix were prepared. The ESR spectra of **I** at the resonance frequencies of 9.15 and 95 GHz are indicative of rapid diffusional rotation around the Y magnetic axis which is oriented approximately parallel to the normal to CB7 portals. For other spin probes the Saturation transfer ESR spectra (in the out-of-phase second harmonics mode) are indicative of the librational motion inside the CB7 cavity. The angular amplitude of these librations increases with temperature.

Along with the experimental studies we calculated the energy of formation and spatial structure of complexes using the DFT method with account for Van der Waals interactions. A satisfactory agreement of the calculated structures with experimental data on the polarity of the local environment and accessibility to water soluble reagents was obtained. We discovered also the variations in spin densities on NO group on probe rotation inside the CB cavity.

This work was supported by the RNF, grant 15-13-00163. ACERT is supported by grant NIH/NIGMS P41GM103521.

PHOSPHORUS(V) PORPHYRINS: SYNTHESIS, PHOTOPHYSICAL PROPERTIES AND FIRST MOLECULAR TURNSTILE

Meshkov I.N.,^{a,b} Gorbunova Yu.G.,^{a,c} Bulach V.,^b Tsivadze A.Yu.,^{a,c} Hosseini M.W.^b

^aA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: vanmeshkov@gmail.com

^bUniversity of Strasbourg, Laboratory of Molecular Tectonics (UMR UDS-CNRS 7140), Strasbourg, France

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

Phosphorus(V) porphyrins are ones of the least investigated type of metallo-porphyrins. The small size of the central atom provides several unusual features in structure and properties of such complexes. The cationic nature of compounds also dramatically changes their solubility as compared to other metalloporphyrins.

Herein we describe the novel synthetic pathway towards P(V) porphyrins using direct interaction of free-base ligand with POBr₃ in dry pyridine. The difference in reactivity depending on *meso*-substituents in porphyrin ring is presented and explained using quantum-chemical calculations. The P(V) porphyrin bearing two axial bromides was found to be highly reactive and could not be isolated. The axial ligands exchange, as well as stability and photochemical properties of the obtained complexes, were also investigated in details. The photosensitizing (PS) efficiency of two series of P(V) derivatives, based on *meso*-5,10,15,20-tetraphenylporphyrin and 5-pyridyl-(10,15,20) triphenylporphyrin, in organic and aqueous media were studied. The measurement of quantum yields of singlet oxygen generation in different solvents reveal their high ability to act as photosensitizers. It was shown that nature of axial ligand is a key factor of PS efficiency.

A new cationic molecular turnstile **1**, based on P(V)porphyrin backbone bearing two pyridyl interaction sites: one at the *meso*-position of the porphyrin and another on the handle connected to the porphyrin through P-O bonds, was designed and synthesized (**Fig. 1**).

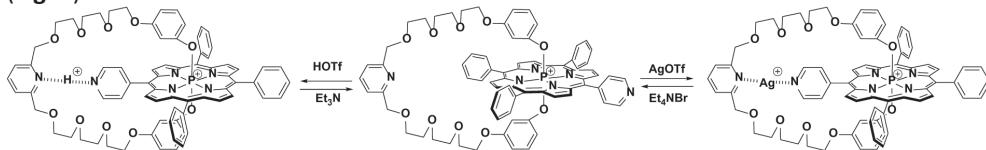


Figure 1. Motion control of the molecular turnstile **1**.

In the presence of an external effector such as Ag⁺ or H⁺, the turnstile is switched to its close states **1**-Ag⁺ and **1**-H⁺ respectively. The locking/unlocking process is reversible and may be achieved by precipitation of AgBr upon addition of Et₄NBr in the case of the silver locked turnstile or by addition of Et₃N in the case of the proton locked turnstile.

Acknowledgement: This work was supported by the Russian Science Foundation (Grant 14-13-01373) and the French Embassy in Russia.

COORDINATION POLYMERS BASED ON THIALCALIX[4]ARENE DERIVATIVES

**Ovsyannikov A.S.,^{a,c} Ferlay S.,^b Kyritsakas N.,^b Hosseini M.W.,^b Solovieva S.E.,^a
Antipin I.S.,^{a,c} Konovalov A.I.^{a,c}**

^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^cA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac.
Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: osaalex2007@rambler.ru

During the last two decades, the synthesis of coordination polymers has been intensively studied [1]. The interest on this class of solid state molecular materials is related to their physical properties they can exhibit, such as catalysis, separation, storage, optic, magnetism, conduction etc.

Thiacalix[4]arene derivatives, adopting a 1,3-alternate conformation and bearing terminal coordination sites, are attractive macrocyclic compounds for molecular networks formation in the crystalline phase.

Here, we report the synthesis of coordination polymers based on interaction between pyridyl and pyrazolyl derivatives of thiacalix[4]arene and tetramercaptothiacalix[4]arene (Fig.1a-b) with soft metal cations [2]. Some factors influencing the dimensionality of the obtained metal-organic structures will be discussed.

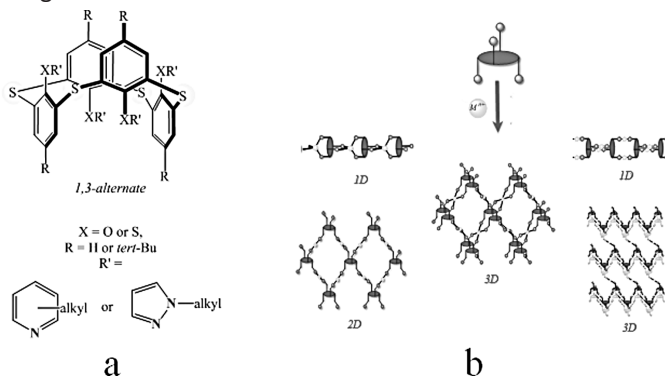


Figure 1.

References

1. (a) Batten S.R., Robson R. *Angew. Chem., Int. Ed.* 1998, 37, 1460; (b) Kitagawa S., Kitaura R., Noro S. I. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2004, 43, 2334; (c) Hosseini M.W. *CrystEngComm* 2004, 6, 318.
2. (a) Ovsyannikov A., Ferlay S., Solovieva S.E., Antipin I.S., Konovalov A.I., Kyritsakas N., Mir Wais Hosseini Dalton., **2013**, 42, 116-126; (b) *Dalton Trans.*, **2013**, 9946-9953; (c) *Inorg. Chem.*, **2013**, 52, 6776-6778; (d) *Dalton Trans.*, **2014**, 158-165; (e) *CrystEngComm*, **2014**, 3765-3772; (f) Ovsyannikov A.S., Noamane M.H., Abidi R., Ferlay S., Solovieva S.E., Antipin I.S., Konovalov A.I., Kyritsakas N., Hosseini M.W. *CrystEngComm* **2016**, 18, 691-703.

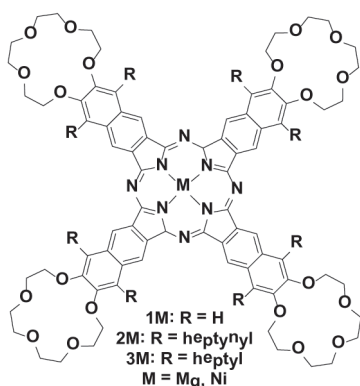
This work was supported by Russian Scientific Foundation 15-13-30006.

NOVEL HIGH SOLUBLE CROWN-SUBSTITUTED NAPHTHALOCYANINES WITH ABSORPTION IN NEAR IR-RANGE

Safonova E.A.,^a Martynov A.G.,^a Gorbunova Yu.G.,^{a,b} Tsivadze A.Yu.^{a,b}

^aA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: safevgal@mail.ru

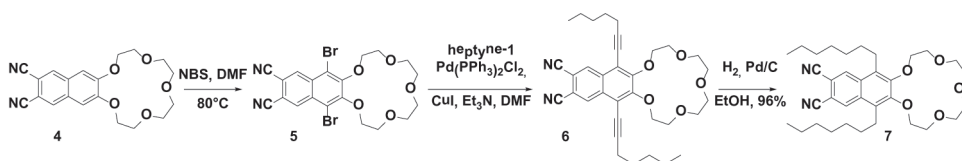
^bN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS,
Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia



Phthalocyanines (Pc) absorbing in near-IR range are used in non-linear optics, photorefractive materials, in medicine for photodynamic diagnosis and therapy and in solar energy. Expansion of aromatic system of Pcs via formation of naphthalocyanines (Nc) results in the bathochromic shift of the absorbance bands to near-IR, however it also results in high tendency of Ncs to aggregation. In the present work we propose to control Ncs aggregation via introduction of crown-substituents.

Tetra-15-crown-5-naphthalocyaninate **1Mg** was synthesized from 15-crown-5-naphthalonitrile **4**. It was almost insoluble in organic solvents, however in the

presence of potassium salts compound formed soluble supramolecular dimers. With the aim to improve solubility of crown-Ncs we designed and synthesized octaheptynyl and octaheptyl crown-Ncs **2** and **3**. Corresponding precursors **6** and **7** were synthesized by bromination, Sonogashira coupling and hydrogenolysis starting from naphthalonitrile **4**.



Indeed, complexes **2Mg** and **3Mg**, were soluble in organic solvents, however, they were photo-unstable and rapidly decomposed in solution because of generation of singlet oxygen. In contrast complexes **2Ni** and **3Ni** were stable both in solution and in solid state. Aggregation of complexes in solution could be also induced by interaction with potassium salts.

It should also be mentioned that presence of triple bonds conjugated to Nc macrocycle almost has no effect on UV-Vis spectra of naphthalocyanine **2Ni** in comparison with hydrogenated complex **3Ni**.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 16-33-01087 mol_a).

FORMATION, MOLECULAR DYNAMICS AND STRUCTURE OF ALKYL SULFATES MICELLES IN THE PRESENCE OF QUATERNARY SALTS OF (DIMETHYLAMINO)ETHYLMETHACRYLATE

**Shulevich Yu.V.,^a Dukhanina E.G.,^a Zakharova Ju.A.,^b Motyakin M.V.,^c
Navrotskii A.V.,^a Novakov I.A.^a**

^a*Volgograd State Technical University, prospekt Lenina, 28, Volgograd, 400005, Russia,
e-mail: shulevich@vstu.ru*

^b*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia*

^c*N.N. Semenov Institute of Chemical Physics RAS, Kosygina, 4, Moscow, 119991, Russia*

Synthesis and properties of surfactants with counter ion capable of polymerization are the subject of scientific research. Systems in which the counter ion contain a double bond is introduced into the structure of surfactant *in situ* by the reaction of ion exchange are of particular interest. The aim of this work is to determine the regularities of interaction between quaternary salt of dimethylaminoethyl methacrylate and micelles of sodium octyl, decyl, and dodecyl sulfate.

It was found that monomers cause a decrease in the critical micelle concentration (CMC) of surfactants and monomer ions form a condensed layer of counter ions around micelles. In the case of strong interaction between components the sorption of monomer molecules on the surface of the micelles is accompanied by an increase in the packing density of the ions in surfactant micelles and causes the growth of the micelles. If the surfactant concentration is enough to form a "wormlike" micelles, then in the ratio of the components close to equimolar, micelles interact with each other like the macromolecular chains and cause a formation of the physical network links. An excess in monomer concentration and, therefore, recharge of micelles lead to a reverse process - the destruction of aggregates. These results are important because of obtaining new data about influence of organic electrolyte on the micelle formation of surfactants, and because of the development new ways of template polymerization ionic monomers in the micellar solutions.

The work was supported by grant RFBR 16-03-00889 and the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (project number 1949 as part of the basic part).

MICELLAR SUPERCLUSTERS BASED ON TRITON NON-IONIC DETERGENTS AND METAL COMPLEXES: FEATURES PREPARATION AND PROPERTIES

Solomonov A.V.,^{a,b} Rumyantsev E.V.^a

^a*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetevskii prospekt, 7, Ivanovo, 153000, Russia, e-mail: Deus-Lex@yandex.ru*

^b*Weizmann Institute of Science, 7600001, Rehovot, 234 Herzl st., Israel*

An approach to study of self-organization and the most important physical and chemical properties of new micellar structures based on non-ionic surfactants based on a group of Tritons (TX100, 114) and hydrophobic chelate compounds embedded to its structure has been developed. The effect of environmental conditions on the regularities of the formation, stability and functional activity of the resulting micellar structures studied in detail. Currently we found three possible schemes of effective micelles conjugation (Fig 1.) with semi-hydrophobic ligands and metal ions / heteroligands and boron dipyrine fluoride complexes.

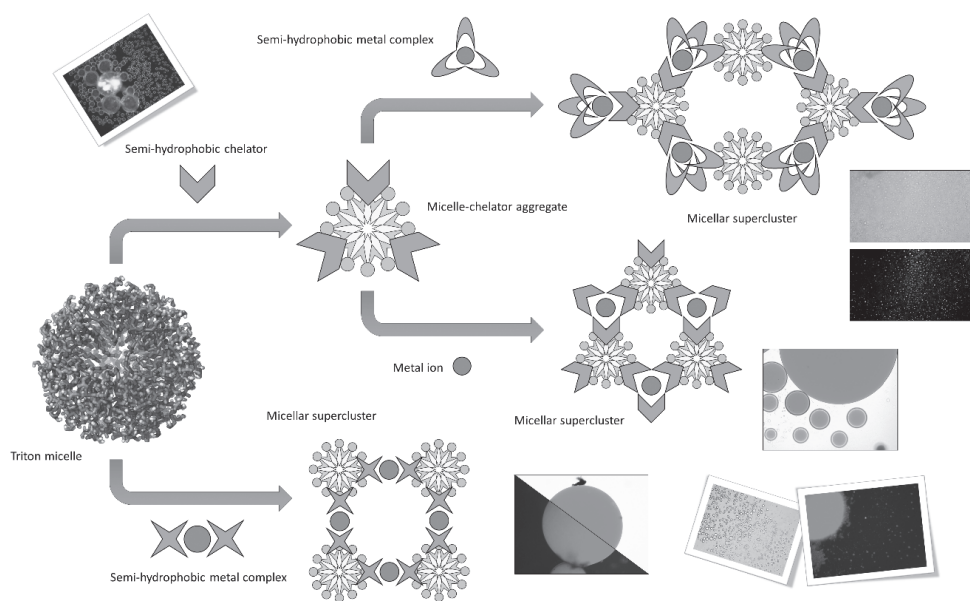


Figure 1. Possible micelles clustering ways by semi-hydrophobic metal complexes.

This work was supported by Russian Foundation of Basic Research grants No. 15-43-03214 r_center_a (2015 – 2016) and 15-33-20002 mol_a_ved (2015 – 2016).

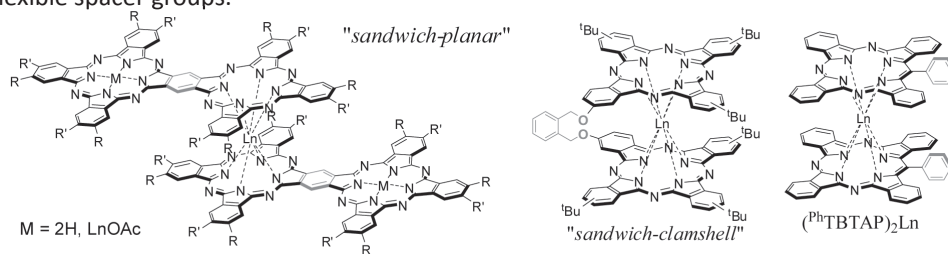
NEW SANDWICH LANTHANIDE PHTHALOCYANINES: SYNTHETIC, PHYSICO-CHEMICAL STUDY AND UTILIZATION

**Tomilova L.G.,^{a,b} Pushkarev V.E.,^a Tolbin A.Yu.,^a Kalashnikov V.V.,^a
Trashin S.A.,^a Zefirov N.S.^{a,b}**

^a*Institute of Physiologically Active Compounds RAS, Severnyi proezd, 1,
Chernogolovka, 142432, Russia, e-mail: pushkarev@ipac.ac.ru*

^b*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: tom@med.chem.msu.ru*

Recent advances in chemistry of new sandwich-type lanthanide complexes with phthalocyanines (Pcs) and their closest analogues are presented. Special attention is given to compounds based on Pc-spacer-Pc ligands, which can be classified according to the nature of the linking unit. Thus, compounds with rigid aromatic spacers¹ were assigned as «*sandwich-planar*», while the term «*sandwich-clamshell*» was chosen to denote complexes with flexible spacer groups.²⁻⁴



Physico-chemical properties of the title compounds are summarized and compared;²⁻⁵ revealed structure–property relationships are presented as well. Moreover, effective utilization of functional and/or spacer groups creates bases for further developments allowing construction of materials at nanoscale level.

References

1. Pushkarev V.E., Nemykin V.N., Tomilova L.G. *Coord. Chem. Rev.* 2016, **319**, 110.
2. Tolbin A., Pushkarev V., Nikitin G., Tomilova L.G. *Tetrahedron Lett.* 2009, **50**, 4848.
3. Pushkarev V.E., Tolbin A.Yu., Zhurkin F.E., Borisova N.E., Trashin S.A., Tomilova L.G., Zefirov N.S. *Chem. Eur. J.* 2012, **18**, 9046.
4. Pushkarev V.E., Tolbin A.Yu., Borisova N.E., Trashin S.A., Tomilova L.G. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2010, **33**, 5254.
5. Pushkarev V.E., Kalashnikov V.V., Tolbin A.Yu., Trashin S.A., Borisova N.E., Simonov S.V., Rybakov V.B., Tomilova L.G. *Dalton Trans.* 2015, **44**, 16553.

The work was supported by Presidium of the RAS, RFBR project Nos. 15-33-21012, 15-03-05890, 16-33-60031 and project MD-3738.2015.3.

CALCULATION OF PHASE DIAGRAMS OF AOT REVERSE MICROEMULSIONS

Tovstun S.A.

*Institute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka,
142432, Russia, e-mail: tovtun@icp.ac.ru*

Recently, we have suggested a model to calculate thermodynamic properties of reverse microemulsions formulated with ionic surfactants¹. The model is based on taking into account the disjoining pressure arising primarily from the overlapping of the electrical double layers at the opposite sides of the water core of microemulsion droplet and on taking into account the dependence of the free energy of the surfactant monolayer on its mean curvature. In this study, the model has been used to calculate W - T -phase diagrams of AOT/water/salt/oil reverse microemulsions, where W is the water-to-surfactant molar ratio, T is the temperature, AOT is sodium bis(2-ethylhexyl)sulfosuccinate, salt is NaCl or Na₂SO₄. The mathematical nature of the calculations was to minimize the free energy as a function of the amounts of the hypothetically possible phases with given restrictions on the total amounts of components of the system. The set of hypothetically possible phases was made up of spherical, cylindrical, and lamellar reverse micelles of various compositions and of brines with various concentrations.

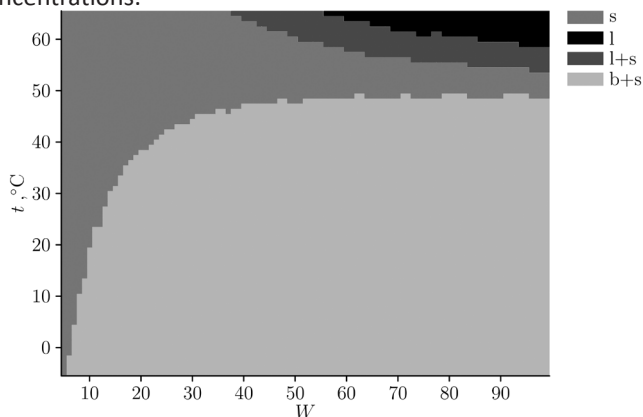


Figure 1. Example of calculated phase diagram of AOT/(water+NaCl) reverse microemulsion for the fixed value $[\text{NaCl}]/[\text{H}_2\text{O}]=0.00154$. Designations: s (spheres), l (lamellas), b (brine). The results of calculations are in good agreement with experiment.

References

1. Tovstun S.A., Razumov V.F. *Colloid and Polymer Science*, **293**, 165.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, Grant No. 14-03-31623.

SELF-ASSEMBLY IN GRAFTED LAYERS OF AMPHIPHILIC MACROMOLECULES

Vasilevskaya V.V.,^a Larin D.E.,^b Lazutin A.A.,^a Govorun E.N.^b

^aA.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, RAS, Vavilova, 28, Moscow, 119991, Russia, e-mail: vvvas@polly.phys.msu.ru

^bMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

Self-assembly of macromolecules consisting of amphiphilic monomer units in a polymer brush attached to a plane surface is studied by mean-field theory and computer simulations. It was found that depending on the solvent quality macromolecules made of amphiphilic monomer units could form spontaneously an ultra-thin layer on the surface which the macromolecules are grafted to or create system of strands with an approximately hexagonal arrangement (see Figure 1).

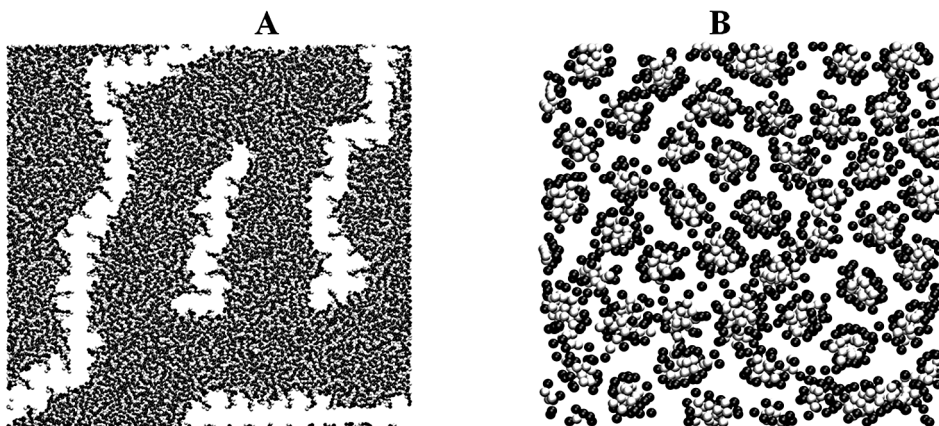


Figure 1. Attractive pendant (A); attractive backbone (B) groups.

The transition between these two regimes could be governed by change of solvent quality and/or temperature.

The study was performed by computer modeling experiments and analytical theory and compared with experiment.

References

1. Lazutin A.A., Govorun E.N., Vasilevskaya V.V., Khokhlov, A.R. *J. Chem. Phys.* 2015, **142**, 184904.
2. Larin D.E., Lazutin A.A., Govorun E.N., Vasilevskaya V.V. *Langmuir* 2016.

This research was supported financially by Russian Science Foundation, Project 14-13-00745.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

DESIGN OF NEW THIACALIX[4]ARENE BASED MOLECULAR TECTONS IN 1,3-ALTERNATE CONFORMATION FOR CREATION OF PHOTO-SWITCHABLE MOLECULAR NETWORKS

Ahmetzyanova Z.V.,^a Ovsyannikov A.S.,^{a,b} Popova E.V.,^b Kataeva O.N.,^{a,b} Solovieva S.E.,^b Antipin I.S.,^{a,b} Konovalov A.I.^{a,b}

^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia, e-mail: AZaliyaValievna703@mail.ru

^bA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia

Nowdays design of supramolecular systems resulted from molecular recognition between different molecular species and leading to creation of new functional materials stills one of the most intensively investigating direction in supramolecular chemistry [1]. Organic compounds containing azo groups presents attractive building blocks (so called *tectons*) for design of photoswitchable molecular networks with controlled physical properties (porosity or luminescence, for example) [2].

Here we report the synthesis of new low rim functionalized thiacalix[4]arene azoderivatives adopted 1,3-*alternate* conformation and containing four carboxyl groups as coordinating sites (fig 1).

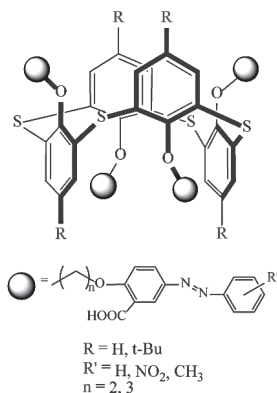


Fig.1

References

1. (a) Batten S.R., Robson R. *Angew. Chem., Int. Ed.*, 1998, **37**, 1460; (b) Kitagawa S., Kitaura R., Noro S.I. *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2004, **43**, 2334; (c) Hosseini, M.W. *CrystEngComm.*, 2004, **6**, 318.
2. (a) Modrow A., Zargarani D., Herges R., Stock N. *DaltonTrans.*, 2011, **40**, 4217; (b) Ko C.-C., Yam V.W.-W. *J.Mater.Chem.*, 2010, **20**, 2063; (c) Qu D.-H., Wang Q.-C., Zhang Q.-W., Ma X., Tian H. *Chem. Rev.*, 2015, **115**, 7543; (d) Heinke L., Cakici M., Dommaschk M., Grosjean S., Herges R., Brase S., Wo C. *ACS Nano.*, 2014, **8**, 1463.

This work was supported by Russian Scientific Foundation 15-13-30006.

INVESTIGATION OF SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY OF YTTRIUM(III) CROWNPHTHALOCYANINATES BY DIFFUSION ORDERED NMR SPECTROSCOPY

Berezhnoy G.S.,^a Kirakosyan G.A.,^{b,c} Martynov A.G.,^b Gorbunova Yu.G.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^{b,c}

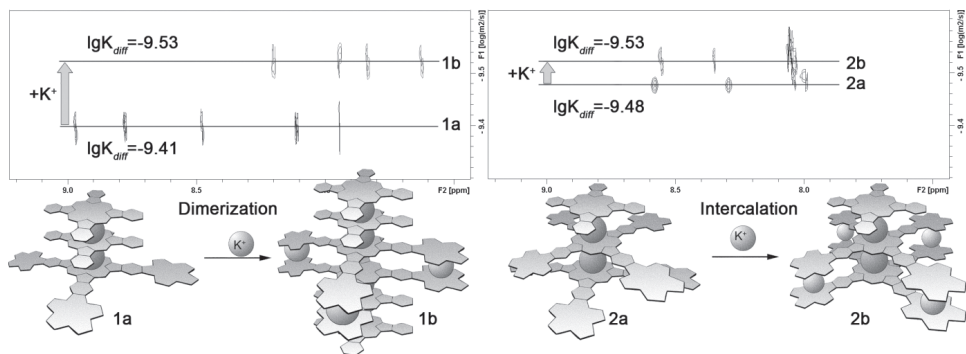
^aDmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, e-mail: georgy.bereg.97@gmail.com

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

Supramolecular assemblies based on sandwich phthalocyaninates are prominent components of functional optical and electronic materials.

Previously^{1,2} we have synthesized heteroleptic yttrium triple-decker crownphthalocyaninates $[(15C5)_4Pc]Y(Pc)Y(Pc)$ – **1a** and $[(15C5)_4Pc]Y[(15C5)_4Pc]Y(Pc)$ – **2a**. In the present work we have studied their supramolecular interaction with KOAc in $CDCl_3/CD_3OD$ mixture by means of NMR-titration and diffusion ordered spectroscopy (DOSY).



For complex **1a** increasing of molecular volume by 2.39 upon interaction with KOAc was observed, suggesting the formation of dimer **1b**. In the case of **2a** the molecular volume is increased only by 1.43. Together with the results of NMR titration it suggests intercalation of K^+ cations between crown-ligands with the formation of the complex **2b**.

References

1. Martynov, A. G. et al. *Inorg. Chim. Acta* 2009, **362**, 11.
2. Martynov, A. G. et al. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2007, 4800.

Acknowledgements. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 14-03-00977).

SELF-ASSEMBLING OF Zn(II) IMIDAZOPORPHYRIN BEARING PYRIDINE UNIT

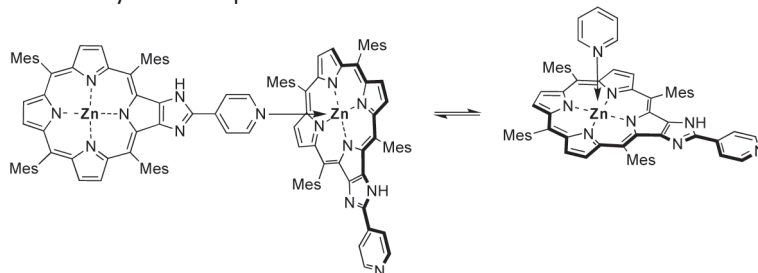
Birin K.P.,^a Sataeva N.E.,^a Abdulaeva I.A.,^a Gorbunova Yu.G.,^{a,b} Tsivadze A.Yu.^{a,b}

^aA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: kirill.birin@gmail.com

^bN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31,
Moscow, 119991, Russia

Molecular tectonics is a modern concept allowing targeted design of molecular coordination polymers, networks or hybrid metal-organic frameworks.¹⁻⁴ It provides simplified and nevertheless powerful approach for development of self-assembled systems with various binding motifs. Among them the pyridine-containing zinc porphyrins were found to be versatile molecular blocks for development of materials for multiple applications.

In present work a new pyridine-containing zinc(II) porphyrin building block was synthesized and its self-association under various conditions was investigated (figure). The concentration and temperature dependence of monomer-associate equilibrium as well as ligand exchange of the molecule worth particular interest in this case. ¹H-NMR and UV-Vis allowed precise analysis of this processes.



It was found that studied molecules in toluene solution (*ca.* 10⁻⁴M) at ambient temperature exist predominantly in the associated state. The complete monomerization in toluene did not occur even at 10⁻⁷M indicating high stability of assemblies. The monomerization can be induced by increase of temperature up to 95°C or by interaction with donor molecules. Indeed, the presence of excess of N- or O-ligand leads to displacement of the axial ligand at metal center and thus decomposes the associate. Structural determination of the associated species in solid state is the task of our ongoing research.

References

1. Marets N., Bulach V., Hosseini M.W. *New J. Chem.*, 2013, **37**, 3549.
2. Sguerra F., Bulach V., Hosseini M.W. *Dalton Trans.*, 2012, **41**, 14683.
3. Kühn E., Bulach V., Hosseini M.W. *Chem. Commun.*, 2008, 5104.
4. Deiters E., Bulach V., Kyrtsakas N., Hosseini M. W. *New J. Chem.*, 2005, **29**, 1508.

This work was supported by the grant of the Council of the Russian President (MK-6536.2016.3).

PHENANTHROLINE-APPENDED PHTHALOCYANINE RECEPTOR: COMPLEX FORMATION WITH Co(II) AND Ni(II) PERCHLORATES

Bunin D.A.,^a Martynov A.G.,^b Gorbunova Yu.G.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^{b,c}

^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia, e-mail: bunin_dm@mail.ru

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

Functionalization of tetrapyrrole macrocycles with peripheral chelating groups is a prominent pathway to elaboration of novel receptors and molecular building blocks which can be used for cation-promoted formation of supramolecular assemblies mimicking biochemical systems.

With this aim we have synthesized novel phthalocyanine **L** conjugated with a phenanthroline unit (Fig. 1) and studied its interaction with Co(II) and Ni(II) perchlorates in CH₃CN media by means of spectrophotometric titration. Stepwise formation of [CoL₂]²⁺ (lgβ=14.3) and [CoL]²⁺ (lgβ=6.6) as well as [NiL₃]²⁺ (lgβ=19.9) and [NiL₂]²⁺ (lgβ=12.7) complexes was concluded on the basis of titration curves analysis with CHEMEQUI¹ software (Fig. 2 on the example of interaction with Co(II) ions).

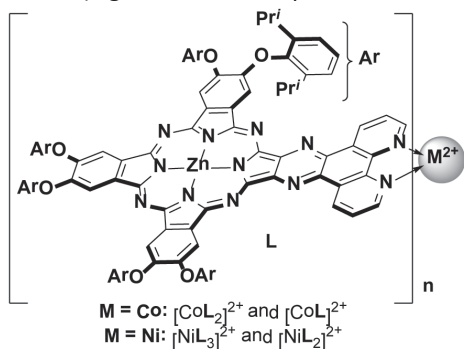


Fig. 1.

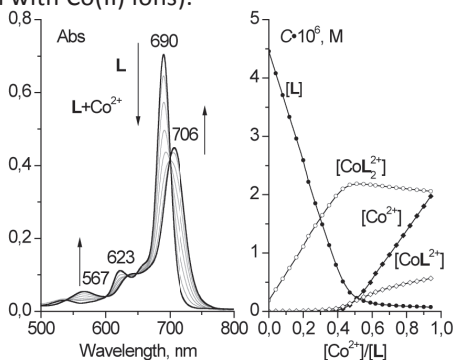


Fig. 2

High stability of these complexes as well as notable optical response towards complex formation suggests that investigated cations can be used for obtaining the supramolecular heteronuclear assemblies based on the ligand **L** and its analogues.

References

1. Solov'ev V.P. et al. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, 1998, 1489-1498.

Acknowledgements. This work was supported by the grant of the Council of the Russian President (MK-3230.2015.3).

DESIGN OF NEW MOLECULAR TECTONS BASED ON CARBOXYL [1111] METACYCLOPHANE DERIVATIVES FOR POROUS MOLECULAR NETWORKS FORMATION

Chernova E.F.,^{a,b} Ferlay S.,^b Ovsyannikov A.S.,^{a,c} Solovieva S.E.,^{a,c} Antipin I.S.,^{a,c} Kyritsakas N.,^b Hosseini M.W.^b

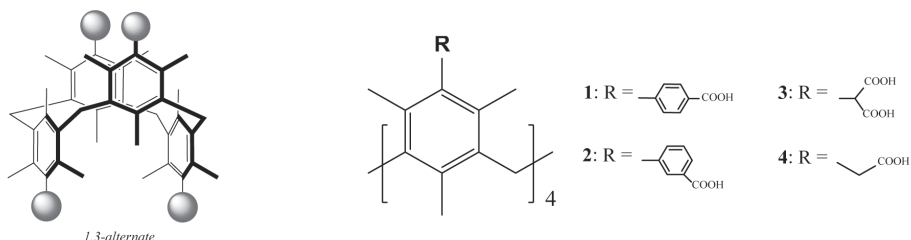
^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France,

e-mail: ekaterine.chernova@etu.unistra.fr

^cA.E. Arbusov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia

In the last decades design of solid state molecular networks formed upon interconnection between molecular tectons - organic molecules and metal centers attracted a growing interest because of the physical properties that they can exhibit (porosity, luminescence etc.) [1]. The [1111]metacyclophane derivatives are of a considerable interest due to its of cyclic platform type with a high rigidity of the skeleton by virtue of the most stable 1,3-*alternate* conformation (fig. 1) [2]. Here we report the synthesis of new molecular tectons based on [1111]-metacyclophane backbone bearing four divergently disposed *carboxyl groups* and different by the nature of spacers (alkyl or phenyl) (fig. 2), together with their propensity to form molecular networks.



References

1. (a) Batten S.R., Robson R. *Angew. Chem., Int. Ed.* 1998, **37**, 1460; (b) Kitagawa S., Kitaura R., Noro S. *Angew. Chem., Int. Ed.* 2004, **43**, 2334; c) Hosseini M.W. *CrystEngComm* 2004, **6**, 318.
2. (a) Ehrhart J., Planeix J-M., Kyritsakas-Gruber N., Hosseini M.W. *Dalton Trans.*, 2009, 2552; (b) Ehrhart J., Planeix J-M., Kyritsakas-Gruber N., Hosseini M.W. *Dalton Trans.*, 2009, 6309; (c) Ehrhart J., Planeix J-M., Kyritsakas-Gruber N., Hosseini M.W. *Dalton Trans.*, 2010, 39, 2137; (d) Deska M., Dondela B., Sliwa W. *Reviews and Accounts*, 2015, 393, (e) Menon S., Sewani M. *Reviews in Analytical Chemistry*, 2006, **25** (1), 49.

This work was supported by Vernadsky PhD fellowship and RFBR 16-03-00920_A.

(2-(METHACRYLOYLOXY)ETHYL)TRIMETHYLAMMONIUM METHYL SULFATE INFLUENCE ON FORMATION AND PROPERTIES OF SODIUM OCTYL- AND DODECYL SULFATE MICELLES

**Dukhanina E.G.,^a Shulevich Yu.V.,^a Zakharova Ju.A.,^b Motyakin M.V.,^c
Navrotskii A.V.,^a Novakov I.A.^a**

^a*Volgograd State Technical University, prospekt Lenina, 28, Volgograd,
400005, Russia, e-mail: dukhanina.ek@yandex.ru*

^b*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia*
^c*N.N. Semenov Institute of Chemical Physics RAS, Kosygina, 4, Moscow, 119991, Russia*

Radical template polymerization is a promising method of polyelectrolyte (PE) producing. It's of particular interest to use surfactant micelles as template, since it allows to obtain PE-surfactant complexes directly in a polymerization. Such complexes have a number of unusual properties and a wide range of applications. At the same time it is important to determine the optimal synthesis conditions to make the polymerization proceeds by mechanism of template polymerization.

The aim of this work is to study the processes of self-organization of sodium octyl (OS) and dodecyl sulfate (SDS) in the presence of trimethyl[methacryloxyethyl]ammonium methyl sulfate by EPR spectroscopy.

Monomer introduction into the aqueous surfactant solutions cause a reduction in CMC of SDS and OS. Increase in monomer concentration in micellar solutions of fixed concentration of SDS results in significant changes in the parameters of used probes due to electrostatic interaction between monomer and surfactant micelles. It was found that monomer is not incorporated into the surfactant micelles, and localized on the surface of the micelles in the layer of counterions. The most promising relations for the realization of template mechanism of polymerization are $0.5 < [M]/[SDS] < 2$. Changes in the parameters of used probes are significantly less pronounced in solutions, containing OS as surfactant. Apparently, instability of OS micelles due to the short alkyl group, makes it impossible to use this surfactant micelles as templates.

The work was supported by grant RFBR 16-03-00889 and the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (project number 1949 as part of the basic part).

Galieva F.B.,^a Muravev A.A.,^b Solovieva S.E.,^b Antipin I.S.,^{a,b} Konovalov A.I.^b

*^bA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac.
Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia*

In work, the synthesis of triazole-terpyridine derivatives of thiacaixarene in *cone* **1** and *1,3-alternate* **2**, **3** configurations under copper-catalyzed azide-alkynyl cycloaddition is given.



The work was supported by RSF grant, project 14-13-01151.

MAGNESIUM OCTA[(4'-BENZO-15-CROWN-5)-OXY] PHTHALOCYANINATE IN LOW MOLECULAR HYDROGELS: SPECTRAL PROPERTIES AND STIMULI RELEASE

Goldshleger N.F.,^a Gak V.Y.,^a Shiryayev A.A.,^b Baulin V.E.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^b

^aInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia, e-mail: nfgold@icp.ac.ru

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

^cInstitute of Physiologically Active Compounds RAS, Severnyi proezd, 1, Chernogolovka, 142432, Russia

Supramolecular gels attract much attention due to possibility of various applications including drug delivery. This study is devoted to low-molecular hydrogels based on biodegradable sodium deoxycholate (SDC) and lysine hydrochloride (lys× HCl) with magnesium octa[(4'-benzo-15-crown-5)-oxy]phthalocyaninate (Mgcr_8Pc) as active component. Their formation, spectral properties of gelled Mgcr_8Pc , and the Pc release have been analyzed. The inclusion of Mgcr_8Pc is realized by both direct mixing of the components and the diffusion of Pc from its aqueous solution into the SDC/lys× HCl/NaCl gel was studied at room and higher temperatures by spectroscopic and small-angle X-ray scattering methods. The release of Pc as monomer occurred after melting the Mgcr_8Pc /SDC/lys× HCl/NaCl hydrogel. Mgcr_8Pc in the monomeric form is responsible for fluorescent activity of the Pc -bearing supramolecular hydrogel.

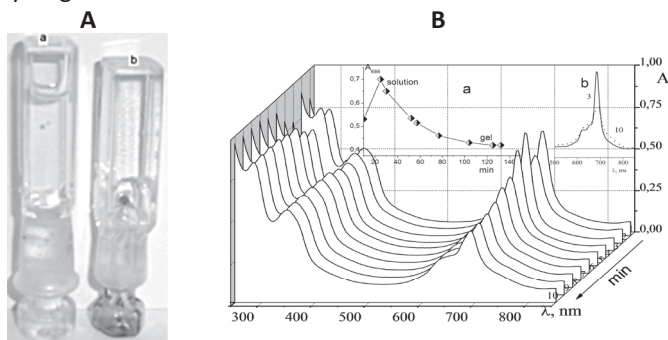


Figure A. Viscous SDC/lys× HCl aqueous solution (a) and the Mgcr_8Pc /SDC/lys× HCl hydrogel (b). **B.** Changes in the absorption spectra of the 'direct' Mgcr_8Pc /SDC/lys× HCl/NaCl hydrogel. (a) Gel formation during slow cooling from 55°C to 18°C. (b) The absorption spectra of the melted and strong hydrogel (spectra 3 and 10, respectively).

This work was supported by the Program of fundamental researches of Presidium of RAS "Physicochemical problems of surface phenomena".

SOLUBILIZATION AND PHOTOCHEMICAL STABILITY OF OCTA[(4'-BENZO-15-CROWN-5)OXY]PHTHALOCYANINES IN AQUEOUS MICELLAR SOLUTIONS

Goldshleger N.F.,^a Gak V.Yu.,^a Shiryayev A.A.,^b Kalashnikova I.P.,^{b,c} Baulin V.E.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^b

^a*Institute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia, e-mail: nfgold@icp.ac.ru*

^b*A.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia*

^c*Institute of Physiologically Active Compounds RAS, Severnyi proezd, 1, Chernogolovka, 142432, Russia*

Solubilization of Mgr8Pc ($M = 2H^+$, Mg^{2+}) in aqueous solutions of polyelectrolytes as well as their mixtures with anionic surfactants such as sodium dodecyl sulfate (SDS) and biocompatible sodium deoxycholate (SDC) has been studied. Results obtained are consistent with the suggestion of the synergistic effect of sodium polystyrene sulfonate (PSS) and SDC. It follows from both the Mgr8Pc monomerization conditions and comparison of fluorescence intensity of the Mgr8Pc/PSS/SDC/NaCl and Mgr8Pc/PSS/NaCl microheterogeneous systems. The values of the gyration radius grow from 1.3 to 1.5 nm in the following sequence: PSS < PSS/NaCl < Mgr8Pc/PSS/NaCl. In the PSS presence, absorption spectroscopy and steady-state fluorescence indicate the appearance of the Mgr8Pc monomeric state and subsequent growth in its concentration with increasing ionic strength and the addition of anionic SDC. Mgr8Pc photobleaching proceeds in micellar solutions of SDS or sodium dodecylbenzensulfonate (SDBS) in which Pc was solubilized as monomer (Fig.). Evaluation of the quantum yield of the Mgr8Pc photodestruction gives the value of the order of 4×10^{-4} . Thus, Mgr₈Pc can be considered as moderately stable phthalocyanine.

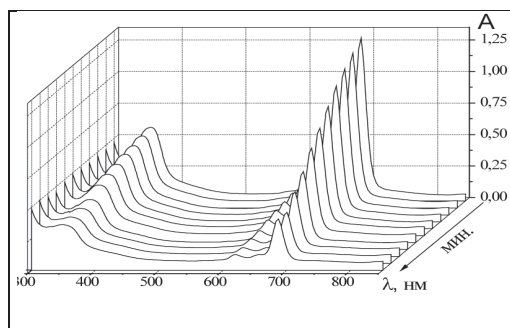


Figure 1. Mgr8Pc photobleaching in the SDBS micellar solution by irradiation in air (mercury lamp, $\lambda = 578$ nm.).

This work was supported by RFBR, project 15-03-03100.

CROWN-SUBSTITUTED μ -CARBIDO-DIRUTHENIUM(IV) BISPHTHALOCYANINATE RECEPTORS: SYNTHESIS AND INTERACTION WITH ALKALI METAL SALTS

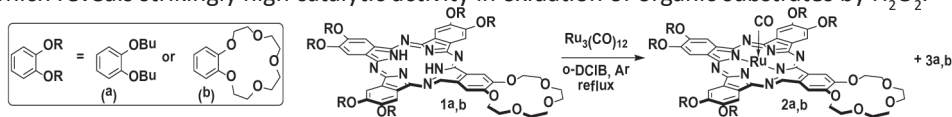
Kroitor A.P.,^a Martynov A.G.,^b Gorbunova Y.G.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^{b,c}

^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow,
119991, Russia, e-mail: last_andrei@bk.ru

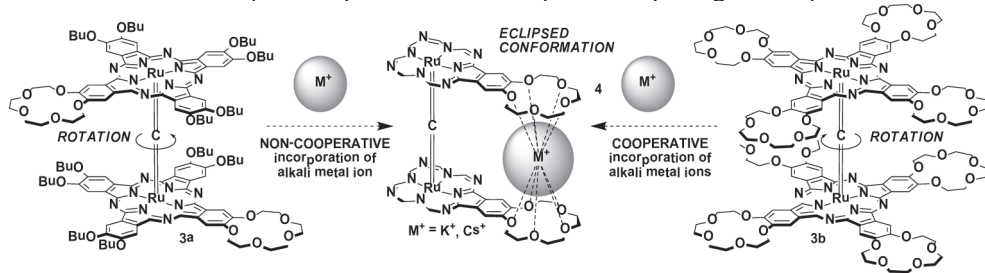
^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS,
Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

In this work we have firstly shown that interaction of mono- and tetra-15-crown-5-phthalocyanines **1a,b** with $\text{Ru}_3(\text{CO})_{12}$ in refluxing *o*-dichlorobenzene (b.p. 180°C) yields the mixture of monomeric Ru(II) complexes **2a,b** together with Ru(IV) μ -carbido-dimers **3a,b**. The later complexes are structural analogues of μ -nitrido-dimeric diiron bisphthalocyaninate, which reveals strikingly high catalytic activity in oxidation of organic substrates by H_2O_2 .¹



The interaction of the synthesized receptors **3a,b** with alkali metal salts KBPh_4 , KOAc , CsBPh_4 and CsOAc was studied by spectrophotometric titration in CHCl_3 and CH_3CN . The influence of the nature of receptors, substrates and media on the efficiency of cation binding was analyzed. The stability constants of the obtained supramolecular complexes and coefficients of cooperativity were estimated quantitatively using Hill's equation.²



The found features can be used to control the catalytic properties of new receptors.

References

1. Afanasiev P., Sorokin A.B. *Acc. Chem. Res.* 2016, **49**, 583.
2. Weiss J.N. *FASEB J.* 1997, **11**, 835.

Acknowledgements. This work was supported by Russian Academy of Sciences.

COMPOUNDS BASED ON $[\text{Re}_4\text{Q}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$ ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) CLUSTER ANIONS AND CATIONIC COMPLEXES OF RARE-EARTH METALS

Litvinova Y.M.,^a Gayfulin Y.M.,^a Mironov Y.V.^{a,b}

^aA.V. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 3, Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: litvjm@gmail.com

^bNovosibirsk State University, Pirogova, 2, Novosibirsk, 630090, Russia

Design of self-assembled coordination polymers from pre-made building blocks is a facile route for rational generation of technological materials. It was shown that rhenium cluster anions $[\text{Re}_4\text{Q}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$ ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$)^{1,2} may be used as a building block due to large number of multidirectional accessible CN-groups. In combination with *d*- or *f*- metal cations, these cluster anions can serve as rigid voluminous fragments for design of cyano-bridged coordination polymers with different architectures. Our work is focused on construction of coordination polymers containing rare-earth cations in the structure. 4f metal ions have large radii, high coordination numbers, and a wide variability of coordination environment. The trivalent lanthanide ions also have useful physical properties as color-pure luminescence and large paramagnetism. Therefore, presence of rare-earth cations in the structure of coordination polymers may cause magnetic and luminescence properties for resulting materials. Structures and physical properties of coordination polymers can also be modified by appropriate organic ligand that can bind metal ions in different mode or block the coordination sites around the cation by using a polydentate chelating mode. We have demonstrated that the presence of organic ligands in the system $\text{Ln}^{3+}/[\text{Re}_4\text{Q}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$ can influence on the structure and dimensionality of the resultant coordination polymer. Reactions between cluster anions $[\text{Re}_4\text{Q}_4(\text{CN})_{12}]^{4-}$ ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}$ or Te) and Ln^{3+} complex cations in an aqueous or aqueous ethanol solutions led to formation of crystalline compounds with ionic, oligomeric, chain-like or layered structures^{3,4}. The majority of obtained polymeric compounds is presented by the chains with linear, spiral, ribbon and ladder-type structures. Investigation of magnetic properties of obtaining polymeric compounds is underway currently.

References

1. Laing M., Kiernan P.M., Griffith W.P. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, 1977, **7**, 221.
2. Mironov Y.V., Virovets A.V., Artemkina S.B., Fedorov V.E. *Journal of Structure Chemistry*, 1999, **40**, 313.
3. Litvinova Y.M., Kuratieva N.V., Gayfulin Y.M., Logvinenko V.A., Andreeva A.Y., Korotaev E. V., Mironov Y.V. *Polyhedron* 2015, **102**, 27.
4. Litvinova Y.M., Gayfulin Y.M., Samsonenko D.G., Piryazev D.A., Mironov Y.V. *Journal of Molecular Structure*, 2016, **1107**, 109.

PHOTODYNAMIC ACTIVITY OF AlCl-, Mg- AND Zn-PHTHALOCYANINE/ SILICA NANOPARTICLES

Lobanov A.V.,^a Udartseva O.O.,^b Andreeva E.R.,^b Buravkova L.B.,^b Melnikov M.Ya.^c

^aN.N. Semenov Institute of Chemical Physics RAS, Kosygina, 4, Moscow, 119991, Russia,
e-mail: avlobanov@mail.ru

^bInstitute of Biomedical Problems RAS, Khoroshevskoe, 76a, Moscow, 123007, Russia

^cMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

Originally developed as a tumor therapy, now photodynamic treatment (PDT) may become a useful tool for treatment of different diseases like cardiovascular or infectious diseases. In present time phthalocyanines (Pc) are proposed to be the most promising dyes (photosensitizers) owing to their strong phototoxicity effect, easy availability, and low cost. The present study compares PDT efficacy using AlCl-, Mg-, Zn-phthalocyanine-loaded nanoparticles on lymphocytes, macrophages, endothelial and stromal cells^{1,2}.

Human macrophages (Mph), human endothelial (HUVEC) and mesenchymal stromal cells (MSC) were obtained and cultured as described elsewhere. Lymphocytes (Lymph) were isolated from whole peripheral blood by Ficoll-Hystopaque gradient centrifugation. Pc-loaded nanoparticles were obtained from metal phthalocyanine complexes using silica particle solution (60 nm) in 70% ethanol. Fabricated nanoparticles were characterized and used in 0.1-3 µg/ml concentrations. To provide PDT Pc-nanoparticles were added to culture medium 24 h before irradiation. Then cells were washed carefully and illuminated with 675 nm light. Dark toxicity and PDT efficacy were evaluated by MTT-test. AlClPc-, MgPc-silica nanoparticles in 0.3-3 µg/ml concentrations didn't affect cell viability while essential dark phototoxicity of ZnPc-silica nanoparticles (in 100 ng/ml concentration and over) were demonstrated for HUVEC and MSC. Cell susceptibility to PDT with different Pc-nanoparticles varied. However, PDT with MgPc-silica was non-effective for all examined cell types while irradiation of AlClPc-loaded cells with 675 nm light significantly decreased cell viability.

Thus MgPc-silica nano-particles may become a useful tool for diagnostics while AlClPc-silica nano-particles may significantly increase PDT efficacy.

References

1. Udartseva O.O., Lobanov A.V., Andreeva E.R., Dmitrieva G.S., Melnikov M.Ya., Buravkova L.B. *Biophysics* 2014, **59**, 856.
2. Udartseva O.O., Lobanov A.V., Andreeva E.R., Buravkova L.B., Melnikov M.Ya. *Russ. Chem. Bull.* 2016, **1**, 277.

This work was supported by RFBR, project 15-03-03591.

Zn(II) DIPHOSPHORYLPORPHYRINATES: SYNTHESIS AND SELF-ASSEMBLY IN SOLUTIONS

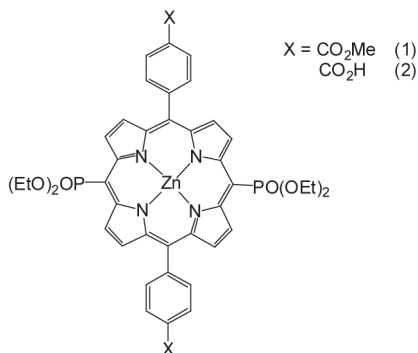
Markov O.N.,^a Enakieva Yu.Yu.,^b Kirakosyan G.A.,^{b,c} Gorbunova Yu.G.,^{b,c} Tsivadze A.Yu.^{b,c}

^aMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: yulia.enakieva@gmail.com

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

Phosphorylated porphyrins are promising models for elaboration of highly ordered supramolecular systems of various architectures. Previously^{1–4} we have developed an efficient pathway towards metal(II) polyphosphorylporphyrinates. The optimal conditions of crystal growth for these compounds were found, and their structures were studied by X-ray diffraction analysis. It was shown that the self-assembly of these complexes has led to the formation of dimers, tetramers, 1D and 2D coordination polymers and so on.



Herein, the synthesis and features of the self-organization of zinc(II) *meso*-di(diethoxyphosphoryl)porphyrinates **1** and **2** in solutions are presented. The application of various 1D and 2D NMR techniques (¹H,¹H-COSY, ¹H,¹H-NOESY, ¹H,¹³C-HSQC, ¹H,¹³C-HMBC) allowed to find the features of self-assembly of compounds **1** and **2** in solutions in dependence with different factors – solvent nature, concentration, temperature and the presence of coordinating molecules.

It was shown that the association of compound **1** in toluene at low temperatures has led to the formation of aggregates similar to supramolecular assemblies identified in the crystalline state.

References

1. Enakieva Y.Y. et al. *Org. Lett.* 2009, **11**, 3842–3845.
2. Sinelshchikova A.A. et al. *Inorg. Chem.* 2013, **52**, 999–1008.
3. Uvarova M.A. et al. *Cryst. Growth Des.* 2014, **14**, 5976–5984.
4. Zubatyuk R.I. et al. *Cryst. Eng. Comm.* 2014, **16**, 10428–10438.

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research and Russian Academy of Sciences.

A STUDY OF DYNAMICAL STRUCTURE OF A NEW TYPE OF CHEMOSENSOR MATRICES ON BASIS OF THE IMMOBILIZED LIPID MEMBRANES

Meshkov B.B., Koshkin A.V., Alfimov M.V., Livshits V.A.

*Photochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow,
119421, Russia, e-mail: vlivshi@mail.ru*

New types of chemosensor structures are proposed based on the lipid bilayers stabilized on the micro/nano silica particles (SLB). A complex of techniques was developed and applied to the preparation, and characterization of SLB bound to the macroporous silica monolithes (MSM): (i) the preparation of the bilayer liposomes (BL) from natural or synthetic phospholipids (PL) (ii) determination of the PL concentration in BL dispersions and in SLB (iii) determination of the BL dimensions (iv) determination of the extent of the BL in liposome preparations (v) preparation of MSM (vi) BL adsorption on MSM resulting in SLB formation (vii) incorporation of spin- and fluorescent indicators into SLB.

The molecular dynamics (MD) in SLB was studied using phospholipid spin labels, n-PC, whose reporter NO groups are attached to the carbon atoms at different positions (n) on the acyl chain, i.e. at different distances from the PL polar group. The MD parameters, namely, the rotational diffusion coefficients around the short molecular axes ($R_{\perp}$) and orientational order values (D_{20}) at the different depth in membrane were determined from ESR spectral simulations. The rotational mobilities for all n-PC in SLB were somewhat slower and D_{20} values were somewhat greater than in BL. The gel-liquid crystal phase transition for the synthetic dimiristoyl phosphocholine, observed in BL, is preserved in SLB although its temperature (T_m) is about 2° higher than in BL. The differences in $R_{\perp}$ and D_{20} between BL and SLB are insignificant at temperatures far from T_m but they increase for T values close to T_m .

The ESR spectra of a lipid spin probe which has a hexadecyl and piperidine-N-oxyl substituents at the positively charged quaternary N atom were also studied in BL and SLB membranes. One expects that when this probe is in the outer lipid monolayer of SLB its reporter NO group is in the outer water volume while in the monolayer proximal to silica substrate the NO group of the probe is proximate to the thin aqueous layer between this monolayer and the substrate. Using selective reduction of the NO group of the probe by sodium ascorbate in the outer monolayer of SLB we showed that the rotational (conformational) mobility of the spin probe in the proximal monolayer is considerably smaller than in the outer monolayer of SLB.

This work was supported by the Russian Science Foundation, grant 15-13-00163.

MOLECULAR TECTONICS: MANGANESE (II) AND ZINC (II) COORDINATION POLYMERS BASED ON TETRAMERCAPTOTHIALIX[4]ARENE WITH APPENDED METHYLENECARBOXYL GROUPS

Ovsyannikov A.S.,^{a,c} Ferlay S.,^b Kyritsakas N.,^b Hosseini M.W.,^b Solovieva S.E.,^a Antipin I.S.,^{a,c} Konovalov A.I.^{a,c}

^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

^bUniversity of Strasbourg, Strasbourg, 67008, France

^cA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: osaalex2007@rambler.ru

Molecular tectonics is an approach in supramolecular chemistry based on the self-assembly of molecular tectons, leading to the formation of molecular networks in the solid state [1]. When the recognition events between interacting tectons occurs under coordination bonding with metals, the formation of different coordination polymers is observed. The interest on this class of solid state molecular materials is related to their physical properties that they may exhibit, such as catalysis, separation, storage, optic, magnetism, conduction etc [2]. In this report we focus on the formation of coordination polymers prepared by combining tetrahedral shaped organic tecton based on tetracarboxyl derivative of tetramercaptothialix[4]arene (fig. 1a) in *1,3-alternate* conformation with manganese (II) and zinc (II) cations. The details of formation of obtained 2D and 3D molecular networks are discussed (fig. 1b).

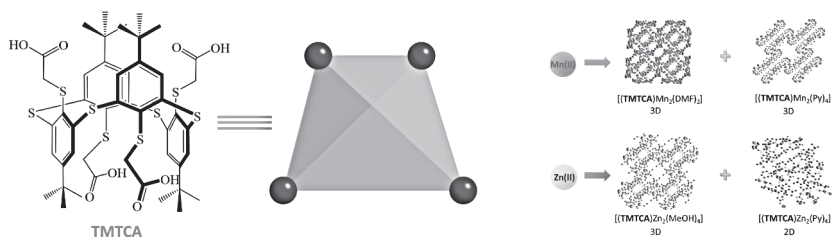


Figure 1.

References

- (a) Mann S. *Nature*, **1993**, 365, 499; (b) Hosseini M.W. *Acc. Chem. Res.*, **2005**, 38, 313
- (a) Kitagawa S., Kitaura R., Noro S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2004**, 43, 2334; (b) Férey G., Mellot-Draznieks C., Serre C., Millange F. *Acc. Chem. Res.*, **2005**, 38, 218; (c) Bradshaw D., Claridge J.B., Cussen E.J., Prior T.J., Rosseinsky M.J. *Acc. Chem. Res.*, **2005**, 38, 273; (d) Janiak C., Vieth J.L. *New J. Chem.*, **2010**, 34, 2366; (e) *Chem. Rev.*, **2012**, 112, Metal-Organic Frameworks special issue.

This work was supported by Russian Scientific Foundation 15-13-30006.

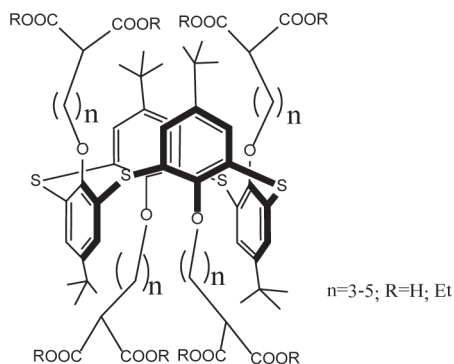
P-*TERT*-BUTYL-THIACALIX[4]ARENE LIGANDS WITH CHELATING GROUPS

Solovieva S.E., Kleshnina S.R., Antipin I.S., Konovalov A.I.

*A.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS,
ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: svsol@iopc.ru*

Thiacalixarenes are well-known class of spatially preorganized macrocycles and have been regarded as the third generation of host molecules in supramolecular chemistry after crown ethers and cyclodextrins. The nice possibility of their upper or lower rims decoration by various donating groups and the presence of hydrophobic cavity as a center of binding, are the factors, which mainly affect on receptor properties of calixarenes. Introducing carbonyl-containing chelating functional groups with ability to bind metal ions strengthen coordination ability of ligands on thiacalix[4]arene platform.

In this contribution the synthesis and structure of new p-*tert*-butyl-thiacalix[4]arene derivatives of malonic acid in 1,3-*alternate* conformations on the basis of thiacalix[4]arene bromides with different length of methylene spacers will be discussed. The structure of obtained macrocyclic compounds were established by 1D and 2D NMR spectroscopy, MALDI-TOF mass-spectrometry. These compounds with chelating groups as substituents are of considerable interest as ligands, tectons for the construction of metal-organic frameworks and precursors for further chemical modifications.



Results of investigation synthesized derivatives in their self-assembling, aggregation and their host-guest complexes with alkali, alkali earth and lanthanide ions by dynamic light scattering, two-phase extraction, UV and fluorescent spectroscopy will be presented.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, grant 14-03-00921.

SUPRAMOLECULAR LIQUID-PHASE SYSTEMS BASED ON COMPLEXES OF WATER-SOLUBLE PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES WITH *d*- AND *f*-METALS

Vashurin A.S., Voronina A.A., Kuzmin I.A., Razumov M.I., Filippova A.A., Znoyko S.A.

*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetevskii prospekt, 7,
Ivanovo, 153000, Russia, e-mail: asvashurin@mail.ru*

Using of self-construction processes in solutions is interesting for creating the liquid-phase systems of tetrapyrrolic macroheterocyclic compounds. The self-association of metal porphyrins and metal phthalocyanines can occur due to π -stacking and non-covalent interactions in the periphery of the macromolecule.

Complexes of *d*- and *f*-metals with water-soluble phthalocyanines of anionic type and porphyrins of cationic type are synthesized in current work. Self-organization processes in water and water-organic mediums are studied.

It was found out that investigated tetrapyrrolic macroheterocycles of anionic type forms H-associates in solutions in case of *d*-metal complexes and the mixture of H- and J-like aggregates in case of *f*-metal ones. In opposite the cationic complexes are monomeric in solutions that offers the prospect of creating a liquid-phase systems with push-pull properties by controlling the self-assembly in solution through specific and anion-cation interaction processes in the periphery of the macromolecules.

Additional stabilization of supramolecular system may be reached by bonding of central metal cation of the macrocycles, which are connected in associates through a spacer bridge.

The investigation of polydentate ligands (pyrazine, DABCO, creatinine) coordination processes showed that the formations of the dimers containing two macromolecules bonded through the bidentate ligand are significantly affected by solvating capacity of the solvent and steric effects of substituents.

There are additional competing processes of coordination in case of macrocycles containing bulky substituents with two and more heteroatoms. It leads to the formation of stable associates of T- and J-types.

The work is financially supported by Russian President's grant for state support of young Russian scientists - Ph.D., project MK-2776.2015.3.

SYNTHESIS AND NONLINEAR OPTICAL BEHAVIOUR OF NANOCONJUGATES OF EUROPIUM(III) BIS- AND TRIS-PHTHALOCYANINES WITH QUANTUM DOTS

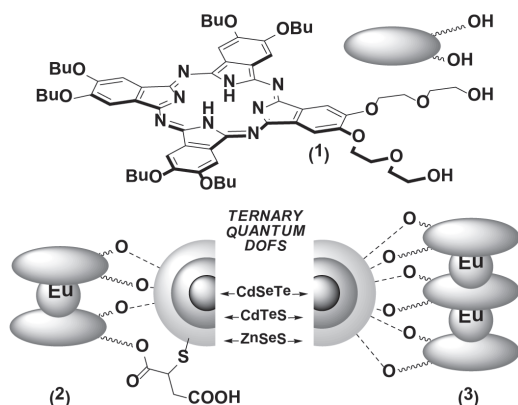
**Yagodin A.V.,^{a,b} Oluwole D.O.,^c Martynov A.G.,^b Gorbunova Y.G.,^{b,d}
Nyokong T.,^c Tsivadze A.Yu.^{b,d}**

^aDmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9,
Moscow, 125047, Russia, e-mail: flender@bk.ru

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

^cDepartment of Chemistry, Rhodes University, Grahamstown 6140, South Africa

^dN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS,
Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia



We have proposed novel approach to fabrication of optical limiting (OL) materials, based on quantum dots covalently linked with sandwich double- and triple-decker phthalocyanines. With this aim, homoleptic sandwich Eu(III) complexes were firstly synthesized starting from phthalocyanine (1), bearing two OH-terminated diethylene-glycol chains, for their grafting onto the surface of ternary quantum dots (QD) capped with mercaptosuccinic acid. Optical limiting properties of the obtained nanoconjugates (2) and (3)

were measured by Z-scan technique (532 nm laser and pulse rate of 10 ns). It revealed excellent OL properties of the conjugate (3) on the basis of triple-decker complex with limiting threshold at $0.5 \text{ J} \cdot \text{cm}^{-2}$, which exceed the known analogues, based of carbon nanomaterials. This high OL performance is associated both with the low-symmetry of chromophore system, extended p-conjugation in sandwich complex, as well as heavy-atom effect caused by the presence of Eu(III) ions and quantum dots.

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant 14-03-00977) and the Council of the Russian President (grant for leading scientific schools NSH-8675.2016.3).

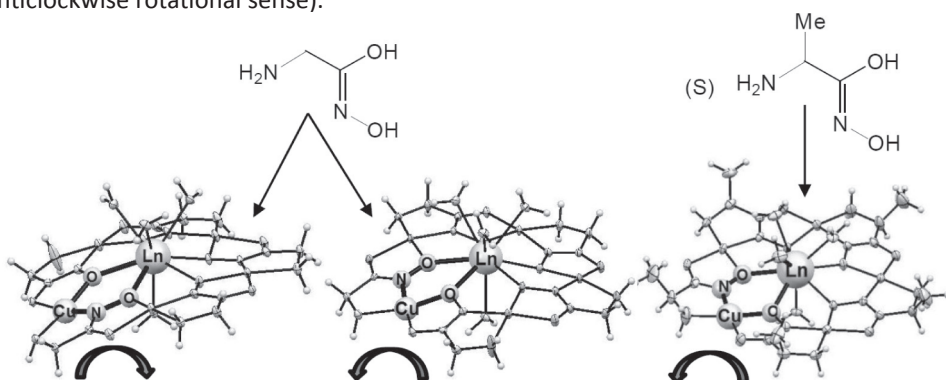
LIGAND-DIRECTED SYNTHESIS OF WATER-SOLUBLE CHIRAL METALLAMACROCYCLIC Ln-Cu COMPLEXES

Zabrodina G.S.,^a Muravyeva M.S.,^b Katkova M.A.,^a Ketkov S.Yu.^a

^aG.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry RAS, Tropinina, 49, Nizhny Novgorod, 603950, Russia, e-mail: kudgs@mail.ru

^bLobachevsky State University of Nizhny Novgorod, Gagarin prospect, 23-5, Nizhny Novgorod, 603950, Russia

With an idea to explore the unique structure of polynuclear metallamacrocyclic 15-MC-5 complexes, the water-soluble tetraaqua Ln(III) - Cu(II) complexes were prepared to provide MRI contrast agents suitable for higher magnetic fields.^{1,2} In addition, the development of chiral compounds specifically designed for high field applications is a difficult task.³ Using the design concept of chirality of 15-MC-5 complexes,⁴ we have prepared and characterized the water-soluble tetraaqua Ln(III) - Cu(II) complexes based on glycinehydroxamic (with clockwise and anticlockwise rotational sense) and S-alaninehydroxamic acid (only anticlockwise rotational sense).



It has been shown that the proton longitudinal relaxivity r_1 of the Gd(III)-Cu(II) complex with alanine hydroximate ligands is 30% higher than that of the Gd(III)-Cu(II) complex with glycine hydroximate ligands at 9.4 T.

References

1. Katkova M.A., Zabrodina G.S., Muravyeva M.S., Shavyrin A.S., Baranov E.V., Khrapichev A.A., Ketkov S.Yu. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2015, **2015**, 5202.
2. Muravyeva M.S., Zabrodina G.S., Samsonov M.A., Kluev E.A., Khrapichev A.A., Katkova M.A., Mukhina I.V. *Polyhedron* 2016, doi: 10.1016/j.poly.2015.11.033
3. Parker D. *Chem. Soc. Rev.* 2004, **33**, 156.
4. Mezei G., Zaleski C.M., Pecoraro V.L. *Chem. Rev.* 2007, **107**, 4933.

This work was partially supported by RFBR, projects 15-43-02285 and 16-03-01109.

SYNTHESIS OF ISONONYLCALIX[8]ARENE FROM COMMERCIALY AVAILABLE ISONONYLPHENOL

Zaripov S.R.,^a Kleshnina S.R.,^b Smirnov I.V.,^{c,d} Stepanova E.S.,^c Tupina M.Yu.,^c
Ivenskaya N.M.,^d Solovieva S.E.,^b Antipin I.S.^{a,b}

^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia

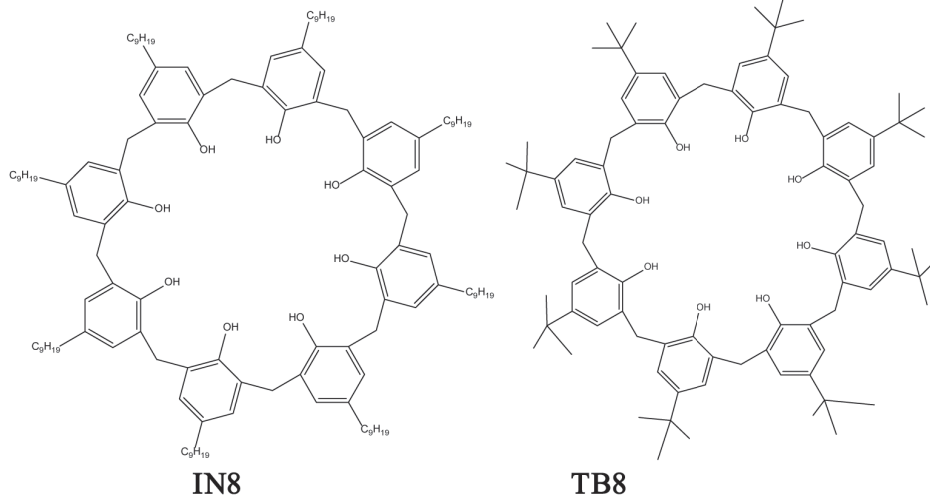
^bA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac.
Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: skleshni@iopc.ru

^cV.G. Khlopin Radium Institute, 2 Murinskiy, 28, Saint Petersburg, 194021, Russia

^dOzersk Technology Institute, Pobedy, 48, Ozersk, 456783, Russia

One of the main problems with using of *tert*-butylcalix[n]arene in the extraction processes is their relatively low solubility in organic solvents used in solvent extraction. In this regard, the urgent task to enhance the solubility of this class of macrocyclic compounds. The most obvious way to achieve this goal is to increase the lipophilicity of the molecule through the introduction of large alkyl substituents in the structure of calixarene.

In the report will be discussed: synthesis of isononylcalix[8]arene (**IN8**) on the basis of commercially available isononylphenol, as well as its properties, such as solubility, extraction and aggregation ability in comparison with the properties of the well-known *tert*-butylcalix[8]arene (**TB8**).



This work was supported by the Russian Science Foundation, project 15-13-20017.

COLLOID-INDUCED SELF-ASSEMBLY OF CROWN-SUBSTITUTED LUTETIUM PHTHALOCYANINATE

Zvyagina A.I.,^a Popov S.V.,^a Ezhov A.A.,^b Gorbunova Yu.G.,^a Tsivadze A.Yu.,^a Arslanov V.V.,^a Kalinina M.A.^a

^a*A.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: pcss_lab@mail.ru*

^b*Moscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia*

We report the new method of self-organization of supramolecular assemblies at the interface between two immiscible phases: a solvent containing double-decker tetra-15-crown-5-substituted lutetium phthalocyanine (LuL_2) and potassium salt and a citrate-stabilized cerium oxide hydrosol (CeO_2NPs). The growth of supramolecular structure is due to the complex formation between crown-ethers of LuL_2 and potassium ions. The interface acts as a labile scaffold for supramolecular synthesis and it determines the spatial geometry of self-assembled structure.

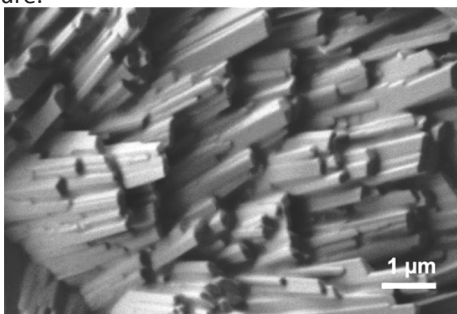


Figure 1. SEM images of self-assembled crystals synthesized at the interface between CeO_2NPs hydrosol and LuL_2 solution.

The SEM investigation of the structure of the as-formed hybrid assemblies revealed the formation of the monocrystals which evolved into more splitting structure during the concentrating of the solution. The X-ray data suggest that crowns of the top deck of LuL_2 are coordinated by the potassium ions to crown groups from bottom decks of four LuL_2 molecules in next layer. The as-formed structures can potentially be used for storage and transport of various gases and liquids.

This work was financially supported by Russian Foundation for Basic Research, Grant 16-03-00499a.

ЗАОЧНЫЕ ДОКЛАДЫ

SYNTHESIS, STRUCTURE, AND PROPERTIES OF STYRYL DYES BASED ON *N*-METHYLBENZOAZACROWN ETHERS

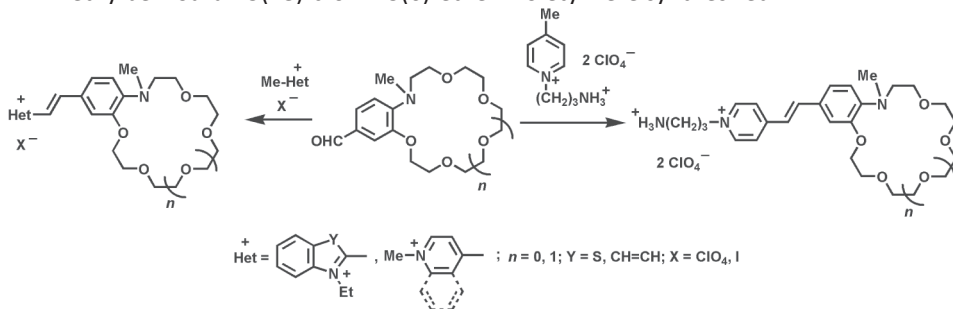
Dmitrieva S.N.,^a Ushakov E.N.,^{a,b} Vedernikov A.I.,^a Kurchavov N.A.,^a Kuz'mina L.G.,^c Alfimov M.V.,^a Gromov S.P.^a

^aPhotochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow, 119421, Russia, e-mail: dmitrieva@photonics.ru

^bInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

New 2-benzothiazole-, 2- and 4-quinoline-, and 4-pyridine-based styryl dyes containing an *N*-methylbenzoaza-15(18)-crown-5(6)-ether moiety were synthesized.^{1,2}



A detailed electronic spectroscopy study revealed high performance of the dyes having an alkyl *N*-substituent in the heterocyclic moiety as optical molecular sensors for alkali and alkaline-earth metal cations.¹ They demonstrate strong cation-induced hypsochromic shifts in the absorption spectra (up to 136 nm) and cation-triggered emission with the enhancement factor reaching 61.

Spontaneous “head-to-tail” dimerization of the dyes having ammoniopropyl *N*-substituent in the heterocyclic moiety via the formation of numerous hydrogen bonds between the terminal NH_3^+ groups and crown-ether fragments was detected in solutions using ^1H NMR and electronic spectroscopy methods.^{2,3}

References

1. Gromov S.P., Dmitrieva S.N., Vedernikov A.I. et al. *J. Org. Chem.*, 2013, **78**, 9834.
2. Gromov S.P., Vedernikov A.I., Lobova N.A. et al. *J. Org. Chem.*, 2014, **79**, 11416.
3. Ushakov E.N., Vedernikov A.I., Lobova N.A. et al. *J. Phys. Chem. A*, 2015, **119**, 13025.

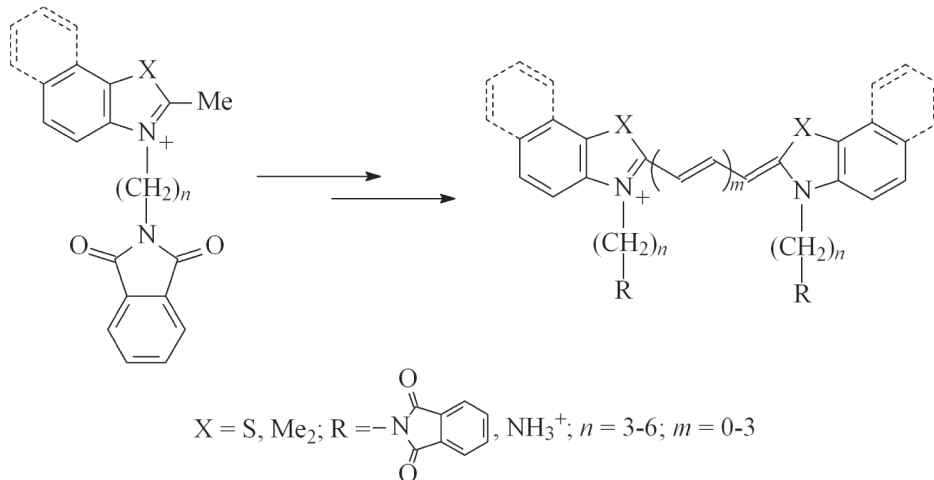
This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research and the Russian Academy of Sciences.

SYNTHESIS OF CYANINE DYES WITH TERMINAL NITROGEN-CONTAINING GROUPS AND THEIR SELF-ASSEMBLED SUPRAMOLECULAR COMPLEXES WITH CAVITANDS

Fomina M.V., Nikiforov A.S., Vedernikov A.I., Gromov S.P.

*Photochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow, 119421, Russia,
e-mail: fomina@photonics.ru*

Cyanine dyes containing terminal ammonium groups in N-substituents cannot be prepared by direct condensation of quaternary heterocyclic salts containing ammonioalkyl groups due to side reactions. The use of phthalimide protection group makes it possible to avoid undesirable processes. Cyanine dyes containing phthalimide groups were obtained by reacting a quaternary salt of a derivatives of a heterocyclic base with an electrophilic agent which is a donor in central fragments of a polymethine chain of high purity with yield up to 93%.



The phthalimide groups were removed by treatment with hydrazine monohydrate or a solution of methylamine in ethanol. Cyanine dyes with ammonioalkyl substituents at the heterocyclic nitrogen atoms were prepared with yield up to 51%. Structure obtained dyes was determined by NMR-, IR-, UV spectroscopy, X-ray diffraction data, and elemental analysis. The synthesized dyes and macroheterocyclic compounds (cavitands) form various inclusion complexes in solutions. Complexation was studied using absorption, luminescence and 1H NMR spectroscopy. The obtained cyanine dyes can be employed as components for the design of photo-sensitive supramolecular systems.

This study was financially supported by the Russian Science Foundation, Project 14-13-00076, RFBR, Project 15-03-01883, and the Russian Academy of Sciences.

ANIONIC SURFACTANT-ASSISTED SELF-ASSEMBLY OF PORPHYRIN-BASED SUPRAMOLECULAR STRUCTURES

Gradova M.A., Lobanov A.V.

*N.N. Semenov Institute of Chemical Physics RAS, Kosygina, 4, Moscow,
119991, Russia, e-mail: m.a.gradova@gmail.com*

The intrinsic tendency of tetrapyrrole compounds to self-assemble into the highly-ordered supramolecular structures with useful photophysical properties provides their application in design and fabrication of smart nanomaterials for nonlinear optics, photonics and molecular sensing. Wherein, either small ions or molecules from the reaction medium readily participate in the ionic self-assembly of the charged chromophores as the linkers, and hence determine the structural and photophysical properties of the resulting supramolecular assemblies.

The mechanism of the surfactant-assisted self-assembly for a number of diprotonated *meso*-aryl-substituted porphyrins into *J*-type ionic associates in acidic premicellar anionic surfactant solutions is briefly reported below.

A strong fluorescence quenching of the porphyrin monomeric species in a narrow concentration range corresponding to the premicellar region observed only for the anionic surfactants clearly indicates the chromophore aggregation. Significant bathochromic shifts of the absorption maxima suggest the *J*-type aggregate formation with the edge-to-edge monomer assembly. The above conclusion is confirmed by the intense resonance light scattering observed in all the absorption bands of the aggregated chromophore species. The *J*-type ionic assemblies can be formed between the neighboring porphyrin monomers linked by either dimers or some kind of small surfactant aggregates known to be abundant only in the narrow premicellar concentration range.

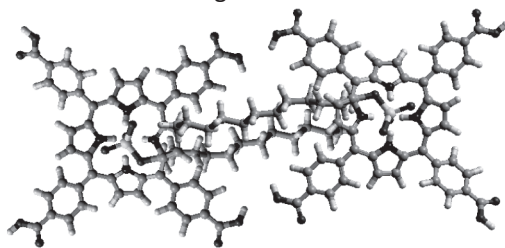


Figure 1. *J*-dimer of tetracarboxyphenylporphyrin linked by a dodecylsulfate-anion dimer.

References

1. Gradova M.A., Lobanov A.V. *Mendeleev Communications* 2015, **25**, 180.
2. Gradova M.A., et al. *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines* 2015, **19**, 845.
3. Gradova M.A., et al. *Russian Chemical Bulletin* 2015, **64**, 806.

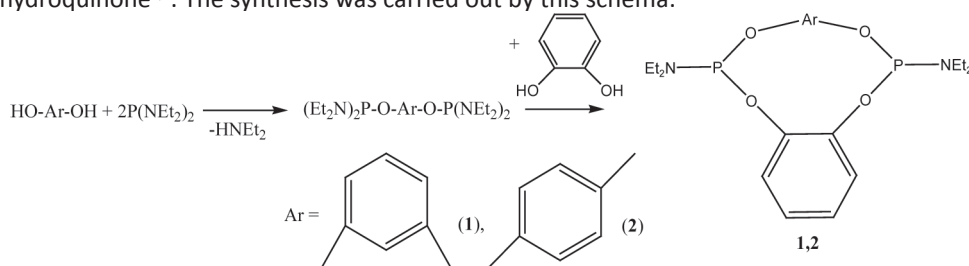
The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research, Project 15-03-03591.

GEOMETRICAL STRUCTURE-BUILDING OF ASSYMETRICAL CYCLIC PHOSPHITES FROM PIROCATEHOL

Kornilov K.N., Blokhin Yu.I., Abramov I.A., Bagautnov A.M., Lubimov I.A.

*K.G. Razumovsky Moscow State University of Technology and Management,
Zemlyanoy val, 73, Moscow, 109004, Russia, e-mail: orgchem@mgutm.ru*

Earlier we firstly have synthesized asymmetrical phosphorus-arene crown ethers - cyclic phosphites, based on catechol and other simple bisphenols - rezortsinol¹ and hydroquinone^{2,3}. The synthesis was carried out by this schema:



Macrocycles **1** and **2** have an internal cavity, and they may be interesting as ligands for the creation of complex supramolecular systems with transition metals⁴. However, these substances under normal conditions are unstable because of the tendency to oxidation in air, and they oily products that can not be purified by distillation, even in deep vacuum⁵. Thus, for macrocycles **1** and **2** there is no opportunity to investigate their structure by X-ray diffraction (XRD). With this regard, the only way to describe their geometric structure is a computer simulation of the structure using program Chem3D Version 12.0.2, which has already demonstrated its suitability in solution of such questions^{6,7}. Through this program, we learned of the intended geometrical structure of studied macrocycles. We have shown that the benzene ring of the macrocycle **1** arranged at an angle to each other, and in the macrocycle **2** - in parallel with it amide substituents in both cases located symmetrically to a median plane of the molecule.

References

1. Kornilov K.N., Blokhin Yu.I. *Izvestiya vyzov. Himiya i him. tehnologiya*, 2008, **51**, 65.
2. Blokhin Yu.I., Kornilov K.N., Volchenkova Yu.V. *Russ. Journ. of gen. chem.*, 2009, **79**, 200.
3. Blokhin Yu.I. *Arene derivatives of phosphoric and phenylphosphonic acids*. Nauchny mir, 2014.
4. Blokhin Yu.I., Kornilov K.N., Osipova Yu.V., Bagautdinov A.M., Tabardak M.V., Lubimov I.A. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, 2013, **188**, 1478.
5. Kornilov K.N., Blokhin Yu.I. *Izvestiya vyzov. Himiya i him. tehnologiya*, 2008, **51**, 3.
6. Blokhin Yu.I., Kornilov K.N., Abramov I.A., Bagautdinov A.M., Lubimov I.A. *Sovremennaya nauka: aktualie problem i puti ih resheniya*, 2014, 24.
7. Blokhin Yu.I., Kornilov K.N., Abramov I.A., Bagautdinov A.M., Lubimov I.A. *Potentsial sovremennoy nauki*, 2015, 48.

CROWN-CONTAINING STYRYL DYES WITH AMMONIOALKYL SUBSTITUENTS: DIMERIZATION AND STEREOSPECIFIC [2+2] PHOTOCYCLOADDITION

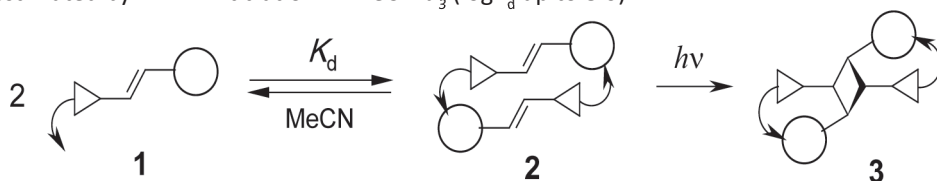
**Lobova N.A.,^a Vedernikov A.I.,^a Ushakov E.N.,^b Kuz'mina L.G.,^c
Alfimov M.V.,^a Gromov S.P.^a**

^aPhotochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow,
119421, Russia, e-mail: lobova_n_a@mail.ru

^bInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1,
Chernogolovka, 142432, Russia

^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31,
Moscow, 119991, Russia

Synthesis of the new styryl dyes **1** containing a crown-ether fragment and a terminal NH_3^+ group in the *N*-substituent of heterocyclic residue was elaborated. It was found that dyes **1** can spontaneously form dimers **2** in both the solid state and in solution (MeCN , CH_2Cl_2) due to the intermolecular binding of NH_3^+ group with crown-ether moiety. The dimers have a head-to-tail pseudocyclic structure. The dimerization equilibrium constants for dyes **1** were estimated by ^1H NMR titration in $\text{MeCN}-d_3$ ($\log K_d$ up to 8.0).



Visible light irradiation of dimers **2** in solution, thin polycrystalline films and monocrystals induced stereospecific [2+2] photocycloaddition reaction generating cyclobutane derivatives **3** as the single *rctt* isomer. The photocycloaddition quantum yield was varied between 0 and 0.38, depending on the nature of heterocyclic residue, the length of ammonioalkyl substituent and the type and size of crown-ether fragment in dyes **1**. The structures of **1-3** were studied by X-ray diffraction and NMR spectroscopy.^{1,2} Dyes **1** can be utilized in systems of optical registration and storage of information.

References

1. Gromov S.P., Vedernikov A.I., Lobova N.A., Kuz'mina L.G., Dmitrieva S.N., Strelenko Yu.A., Howard J. A.K., *J. Org. Chem.*, 2014, **79**, 11416.
2. Ushakov E.N., Vedernikov A.I., Lobova N.A., Dmirtieva S.N., Kuz'mina L.G., Moiseeva A.A., Howard J.A.K., Alfimov M.V., Gromov S.P., *J. Phys. Chem. A*, 2015, **119**, 13025.

This work was financially supported by the Russian Scientific Foundation (since 2014), the Russian Foundation for Basic Research, and the Russian Academy of Sciences.

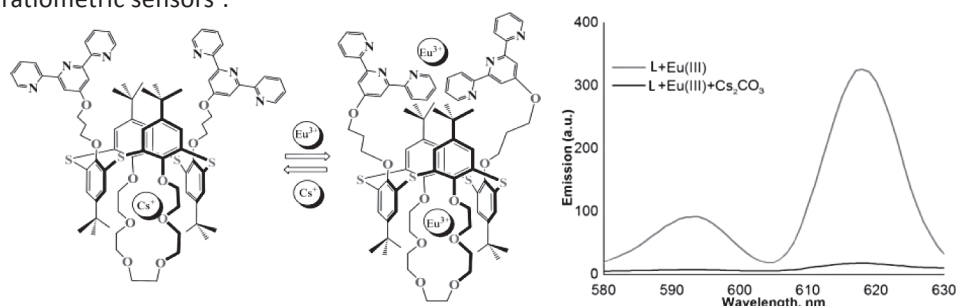
THIACALIX[4]MONOCROWNS MODIFIED WITH TERPYRIDINE GROUPS AS NEW LIGANDS FOR LUMINESCENT POLYNUCLEAR LANTHANIDE COMPLEXES

Muravev A.A.,^a Galieva F.B.,^b Solovieva S.E.,^a Antipin I.S.,^{a,b} Konovalov A.I.^a

^aA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS,
ac. Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: antonm@iopc.ru

^bKazan Federal (Volga Region) University, Butlerov Institute of Organic Chemistry,
Kremlevskaya, 18, Kazan, 420008, Russia

Thiacalix[4]monocrowns in *1,3-alternate* configuration may serve a facile scaffold for the introduction of functional structural units and are known to bind strongly alkali and alkaline-earth metals. The presence of the functional groups in thiacalixcrown, which are able for ionic recognition and give fluorescent response upon binding, leads to the competition of crown ether and functional group binding strength and, under certain circumstances, there appears a possibility for the fluorescence switching to give ratiometric sensors¹.



The synthesis and structure of thiacalix[4]monocrowns in *1,3-alternate* configuration substituted by terpyridyl fragments on the lower rim are discussed in this work and their complexation ability towards lanthanide ions is studied using liquid extraction. The NMR titration data discovered the participation of both crown ether and terpyridyl fragment in the coordination of lanthanide cations. The fluorescent titration of lanthanide complexes showed the nonlinear emission response to the concentration of lanthanide ions, as well as the switching behavior upon the addition of cesium ions.

References

1. Muravev A.A., Galieva F.B., Bazanova O.B., Sharafutdinova D.R., Solovieva S.E., Antipin I.S., Konovalov A.I. *Supramol. Chem.*, 2016, **48**. DOI: 10.1080/10610278.2016.1150593

The work was supported by RFBR grant (project no. 15-53-61021).

DESIGN OF NANOORGANIZED MEDIA VIA LYOTROPIC LIQUID CRYSTAL BASED ON OLIGO(ETHYLENE OXIDE) DERIVATIVES

Selivanova N.M., Galaymetdinov Y.G.

*Kazan National Research Technological University, Karla Marxa, 68, Kazan,
420015, Russia, e-mail: natsel@mail.ru*

Increased interest to lyotropic liquid crystal systems (LLC) is caused by that processes of self-organizing, their underlying formations, are used in nanotechnology and bioengineering. Supramolecular assemblies of metal complexes in anisotropic LLC phases are of great interest and provide new promises in today's materials science.

In this work we present data of structure organization, liquid crystal and optical properties lyotropic lanthanide containing (La^{3+} , Eu^{3+} , Tb^{3+} , Dy^{3+}) systems based on oligo(ethylene oxide) derivatives several types of compounds: nonionic surfactants with various EO chain lengths $\text{C}_{12}\text{EO}_{10}$, C_{12}EO_4 and cholesteryl oligo(ethylene oxide) amphiphile CholEO_{10} , CholEO_{17} . Liquid crystal and thermal properties, structure parameters of lanthanide containing LLC were established by methods of POM, DSC and SAXS. It is shown, that is not dependent on type of Ln ions, systems on the basis of $\text{C}_{12}\text{EO}_{10}$ form hexagonal mesophase, while systems based on C_{12}EO_4 exhibits lamellar molecular order. Phase diagrams for ternary systems $\text{C}_{12}\text{EO}_{10}$ or $\text{C}_{12}\text{EO}_4/\text{Ln(III)}/\text{H}_2\text{O}$ were drawn. The effect of the type of the supramolecular organization on the luminescence efficacy due to the structure of the $\text{C}_{12}\text{EO}_{10}$ and C_{12}EO_4 ligands, forming different types of lyotropic mesophases, hexagonal and lamellar, were studied. To study the effect of the liquid crystal state on the luminescence efficiency, time-resolved spectra were obtained at different temperatures. NMR ^1H with a pulsed magnetic field gradient has been used to characterize molecular motions in the $\text{C}_{12}\text{EO}_4/\text{La}^{3+}/\text{H}_2\text{O}$ systems with different water contents [1].

Lyotropic liquid crystals based on cholesteryl oligo(ethylene oxide) amphiphiles and Ln(III) – La, Dy, Tb, Eu ions were synthesized. For binary systems $\text{CholEO}_{10}/\text{Ln}$, $\text{CholEO}_{17}/\text{Ln}$ the smectic phases were obtained. In ternary systems in the presence of water (5-30% wt) the lyotropic mesomorphism was observed.

References

1. Selivanova N., Konov A., Romanova K., Gubaidullin A., Galaymetdinov Yu. *Soft Matter* 2015, **11**, 7809.

This work was supported by RFBR grant 14-0300109.

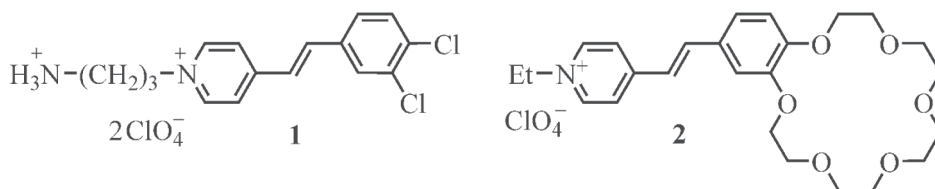
QUANTUM CHEMICAL MODELING OF A PSEUDODIMERIC COMPLEX OF STYRILPYRIDINE DERIVATIVES

Ushakov E.N.,^{a,b} Gromov S.P.^b

^a*Institute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia, e-mail: en-ushakov@mail.ru*

^b*Photochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow, 119421, Russia*

It is known that ammonium derivatives of styrylpyridine, such as **1**, in MeCN form pseudodimeric complexes with the crown-containing derivative **2**, which makes it possible to carry out stereospecific [2+2]-photocycloaddition of **1** to **2**.¹



The quantum chemical modeling of complex **1·2** by density functional theory revealed that the **A**- and **B**-type conformers (Fig. 1), in which the styrylpyridinium cations are arranged one above the other, are most stable in a polar solvent. In the gas phase, the chromophoric moieties of complex **1·2** are remote from each other due to stronger Coulomb repulsion (conformer **C**).

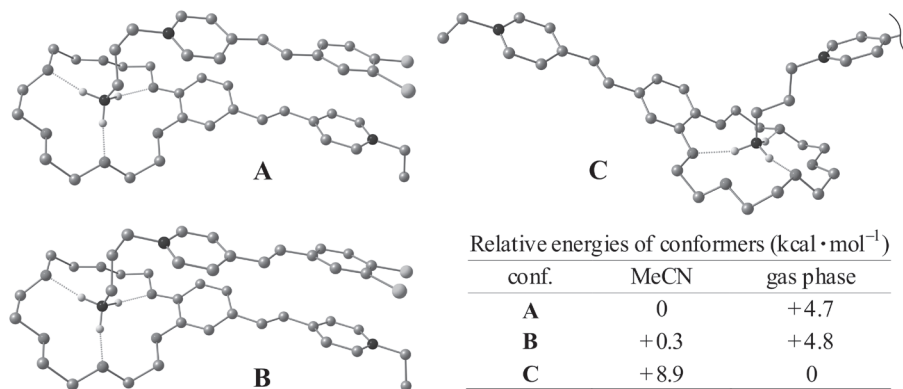


Figure 1. Principal conformations of complex **1·2** in MeCN, as calculated by the M062X/631G(d)/SMD method (the hydrogen atoms, except for those of the ammonium group, are omitted).

References

1. Ushakov E.N., Vedernikov A.I., Sazonov S.K., et al. *Russ. Chem. Bull.* 2015, **64**, 562.

This work was financially supported by the RSF, project 14-13-00076, and the RAS.

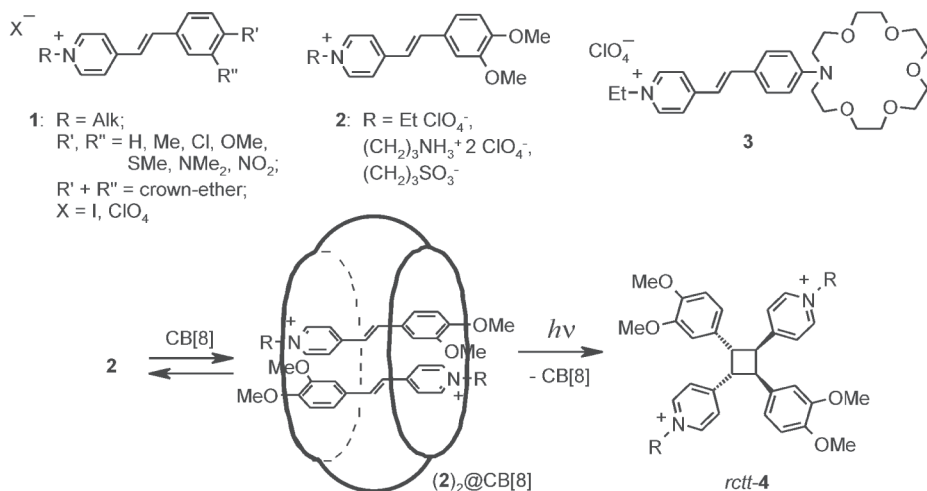
PHOTOCHEMICAL PROPERTIES OF STYRYL DYES WITHIN INCLUSION COMPLEXES WITH CUCURBITURILS

**Vedernikov A.I.,^a Ivanov D.A.,^a Atabekyan L.S.,^a Lobova N.A.,^a Kuz'mina L.G.,^b
Petrov N.Kh.,^a Chibisov A.K.,^a Gromov S.P.^a**

*a*Photochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow,
119421, Russia, e-mail: artem_vedernikov@mail.ru

*b*N.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31,
Moscow, 119991, Russia

Interaction of styryl dyes **1-3** with cucurbit[*n*]urils (CB[*n*], *n* = 7, 8) was studied using electronic and ¹H NMR spectroscopy and X-ray diffraction.¹⁻³ In water solutions, the dyes and CB[7] form stable inclusion complexes of the 1 : 1 composition. Fluorescence enhancement was detected for complexes dye@CB[7].



Dyes **2** and CB[8] form stable complexes of both 1 : 1 and 2 : 1 compositions. In the (2)₂@CB[8] dye dimers, [2+2] photocycloaddition reaction fulfils to give the only *rctt* isomer of cyclobutane derivatives **4**. Thus, CB[8] can serve as a molecular assembler for cyclobutanes.

References

1. Atabekyan L.S., Vedernikov A.I., Avakyan V.G., Lobova N.A., Gromov S.P., Chibisov A.K. *J. Photochem. Photobiol. A*, 2013, **253**, 52.
2. Ivanov D.A., Petrov N.Kh., Ivanov A.A., Alfimov M.V., Vedernikov A.I., Gromov S.P. *Chem. Phys. Lett.*, 2014, **610-611**, 91.
3. Ivanov D.A., Petrov N.Kh., Alfimov M.V., Vedernikov A.I., Gromov S.P. *High Energy Chem.*, 2014, **48**, 253.

This work was supported by the RFBR, project 15-03-001883.

PSEUDODIMERIC COMPLEXES OF AMMONIOALKYL STYRYL DYES AND THEIR CROSS-[2+2]-PHOTOCYCLOADDITION

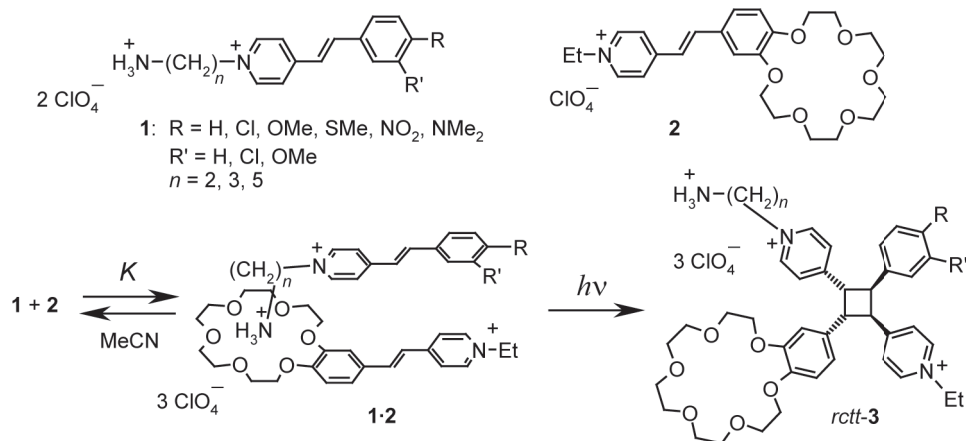
Vedernikov A.I.,^a Sazonov S.K.,^a Kuz'mina L.G.,^b Ushakov E.N.,^{a,c} Lobova N.A.,^a Alfimov M.V.,^a Gromov S.P.^a

^aPhotochemistry Center of the RAS, Novatorov, 7a, Moscow, 119421, Russia, e-mail: artem_vedernikov@mail.ru

^bN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

^cInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia

Styryl dyes **1** containing an *N*-ammonioalkyl substituent were synthesized^{1,2}. In MeCN, dyes **1** and 18-crown-6-containing dye **2** form pseudodimeric complexes **1·2** in which the chromophores are arranged one above another. Constant stabilities of the complexes **1·2** were measured using spectrophotometric and ¹H NMR titrations (log*K* up to 4.1).



Irradiation of solutions of the dyes **1** and **2** mixtures enables cross-[2+2]-cycloaddition to perform with formation of the only *rctt* isomer of cyclobutane derivatives **3**. The photocycloaddition quantum yields reach to 0.016. Structures of dyes **1**, complexes **1·2**, and cyclobutanes *rctt*-**3** were studied by X-ray diffraction.

References

1. Vedernikov A.I., Sazonov S.K., Loginov P.S., Lobova N.A., Alfimov M.V., Gromov S.P. *Mendeleev Commun.*, 2007, **17**, 29.
2. Ushakov E.N., Vedernikov A.I., Sazonov S.K., Kuz'mina L.G., Alfimov M.V., Howard J.A.K., Gromov S.P. *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, 2015, **64**, 562.

This work was supported by the Russian Science Foundation, project 14-13-00076, and the Russian Academy of Sciences.



50

FRANCE - RUSSIE
COOPÉRATION
SCIENTIFIQUE ET TECHNOLOGIQUE

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ
СОТРУДНИЧЕСТВО
РОССИЯ - ФРАНЦИЯ
1966 - 2016

САТЕЛЛИТНЫЙ СИМПОЗИУМ

**ФРАНЦИЯ-РОССИЯ –
50 ЛЕТ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОГО
СОТРУДНИЧЕСТВА
В ОБЛАСТИ ХИМИИ И МАТЕРИАЛОВ**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
В ПЯТИ ТОМАХ**

26–30 сентября
ЕКАТЕРИНБУРГ • 2016

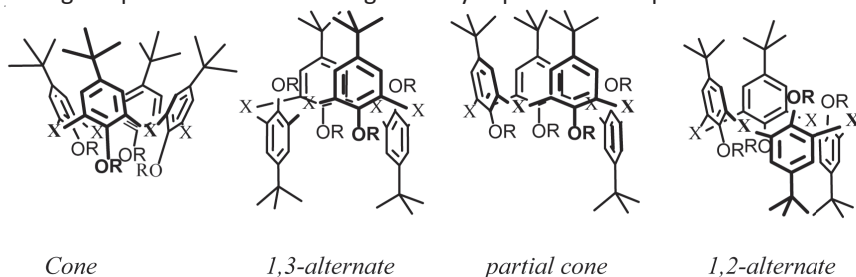


КЛЮЧЕВЫЕ ДОКЛАДЫ

**(THIA)CALIXARENE'S BASED SUPRAMOLECULAR SYSTEMS:
RECOGNITION AND SELF-ASSEMBLY****Antipin I.S.,^{a,b} Solovieva S.E.,^{a,b} Konovalov A.I.^{a,b}**^aKazan (Volga region) Federal University, Kremlyovskaya, 18, Kazan, 420111, Russia^bA.E. Arbuzov Institute of Organic and Physical Chemistry, Kazan Scientific Center, RAS, ac.
Arbuzova, 8, Kazan, 420088, Russia, e-mail: iantipin54@yandex.ru

Now one of the most perspective ways of the materials design is the "bottom-up" technology in which the higher organized systems are spontaneously formed due to supramolecular self-organization and self-assembly from individual atoms and molecules. From this point of view, a key element of supramolecular chemistry is the molecular design and synthesis of preorganized receptor and amphiphilic molecules which are capable on the principles of molecular recognition and multipoint interactions to form host-guest complexes as well as self-organized supramolecular essembles and devices.

Thiacalixarenes derivatives have many advantages in the construction of molecular recognition systems due to the possibility of extensive modifications which allows to create a wide range of precursors for the design of very sophisticated supramolecular structures.



The regularities of aggregation and complexation of calixarenes with substrates of different nature will be discussed in the report. Particular attention will be paid to the application of calixarene derivatives for the construction of various supramolecular and nanosystems, devices and "smart" materials: nanoparticles, metal-coordinated networks, Langmuir-Blodgett nanolayers, molecular magnets etc.

This work was supported by the RFBR, project 16-03-00920.

MACROCYCLIC POLYAMINES AS MULTIFUNCTIONAL CHELATING AGENTS FOR MEDICAL IMAGING

Denat F.

*Institut de Chimie Moléculaire de l'Université de Bourgogne, ICMUB UMR CNRS 6302,
Université de Bourgogne Franche-Comté 9, avenue Alain Savary, 21000 Dijon, France,
e-mail: franck.denat@u-bourgogne.fr*

Cyclic polyamines (tacn, cyclen, cyclam and their derivatives) have attracted increasing attention owing to their versatile coordination properties which allow their use in many fields, especially for medical purposes. Gadolinium chelates based on cyclen (e.g. DOTA like ligands) are widely used for magnetic resonance imaging (MRI), macrocyclic complexes with radioactive metals (^{111}In , ^{68}Ga , ^{64}Cu , ^{90}Y , ^{177}Lu ...) are good candidates for labeling biological vectors for either diagnosis or therapeutic purposes (SPECT or PET imaging, radiotherapy).

There is obviously a strong need for finely tailored ligands with multifunctionality (so-called BFCs or BCAs). Indeed, the multifunctional chelating agent must present optimized coordination properties towards the chosen radiometal to prevent its release in vivo by either transmetallation or transchelation phenomena, but it should also contain a functional group enabling the attachment to a biological vector and eventually another tag or a cytotoxic moiety to move towards bimodal imaging or theranostic.

We have developed straightforward routes for the synthesis of new chelators based on cyclic polyamines scaffolds. The size of the macrocycle, the nature of the coordinating pendant arms, the nature of the linker and of the grafting functional group, may be easily tuned to converge towards the best chelator for a given application. The most recent results will be presented.¹⁻³ Proof of concept of the use of these multifunctional chelating agents for medical imaging will be given.⁴⁻⁵

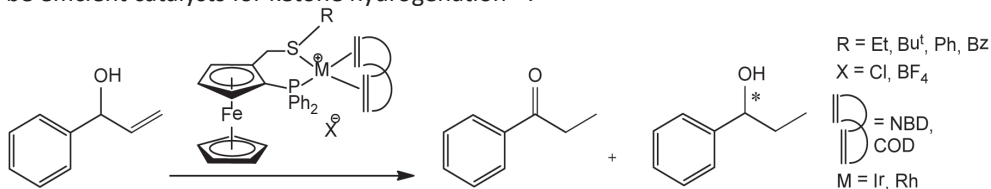
References

1. Désogère P., Rousselin Y., Poty S., Bernhard C., Goze C., Boschetti F., Denat F. *Eur. J. Org. Chem.*, 2014, 7831-7838.
2. Bernhard C., Moreau M., Lhenry D., Goze C., Boschetti F., Rousselin Y., Brunotte F., Denat F. *Chem. Eur. J.* 2012, 18, 7834-7841.
3. Volkova Y.A., Brizet B., Harvey P.D., Averin A.D., Goze C., Denat F. *Eur. J. Org. Chem.*, 2013, 4270-4279.
4. Moreau M., Raguin O., Vrigneaud J.-M., Collin B., Bernhard C., Tizon X., Boschetti F., Duchamp O., Brunotte F., Denat F. *BioconjugateChem.* 2012, 23, 1181.
5. Duhéron V., Moreau M., Collin B., Sali W., Bernhard C., Goze C., Gautier T., Pais de Barros J.-P., Dec kert V., Brunotte F., Lagrost L., Denat F. *ACS Chem. BiolChem.* 2014, 656-662.

ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ

RHODIUM THIOFERROCENYLPHOSPHINES CATALYZED REACTIONS OF
ALLYLIC ALCOHOLS: ISOMERIZATION AND HYDROGENATION**Belkova N.V.,^a Titova E.M.,^{a,b} Manoury E.,^b Poli R.,^b Shubina E.S.^a**^aA.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, RAS,
Vavilova, 28, Moscow, 119991, Russia^bLaboratoire de Chimie de Coordination CNRS; 205, route de Narbonne, Toulouse, F-31077,
France, e-mail: nataliabelk@ineos.ac.ru

Rhodium complexes with diene ligands are known as efficient catalysts for the isomerisation of allylic alcohols. We have synthesized new diene rhodium complexes with thioferrocenylphosphine ligand¹ and studied their activity in allylic isomerisation of 1-phenyl-2-propene-1-ol as a model substrate (Scheme 1).² The catalytic activity of the rhodium complexes was compared with the activity of their iridium analogues, which were previously found to be efficient catalysts for ketone hydrogenation^{3,4}.

**Scheme 1**

This reaction occurs via isomerization to the ketone, as the latter could be detected as an intermediate when varying the reaction conditions. Regardless of the catalyst amount, the solvent and the addition of base, the presence of a hydrogen source (H₂ or ⁱPrOH) is necessary to observe catalytic activities.² Under these conditions, the isomerization reaction was generally followed by partial hydrogenation yielding mixtures of ketone and alcohol in various ratios.

References

1. Kozinets E.M., Koniev O., Filippov O.A., Daran J.-C., Poli R., Shubina E.S., Belkova N.V., Manoury E. *Dalton Trans.*, **2012**, *41*, 11849.
2. Titova E.M., Rahaman S.M.W., Shubina E.S., Poli R., Belkova N.V., Manoury E. *J. Mol. Cat. A*, **2016** accepted.
3. Le Roux E., Malacea R., Manoury E., Poli R., Gonsalvi L., Peruzzini M. *Adv. Synth. Catal.*, **2007**, *349*, 309.
4. Kozinets E.M., Silantyev G.A., Belkova N.V., Shubina E.S., Poli R., Manoury E. *Rus. Chem. Bull*, **2013**, *62*, 751.

This work was supported by CNRS and RFBR through the GDRI "Homogeneous Catalysis for Sustainable Development". EMT thanks the Embassy of France in Moscow for a Ph.D. grant.

POROUS ORGANIC-INORGANIC MATERIALS BASED ON *N*-LIGANDS FOR SELECTIVE GAS ADSORPTION AND CATALYSIS

Brandès S.,^a Feuchter H.,^a Lemeune A.,^a Guillard R.,^a Mitrofanov A.,^b Beletskaya I.^b

^aICMUB, UMR CNRS 6302, 9 avenue Alain Savary, 21078 Dijon Cedex, France, sbrandes@u-bourgogne.fr

^bLomonosov Moscow State University, Department of Chemistry, 1-3, Leninskie Gory, Moscow, 119991, Russia

With the growing concern relating to greenhouse gas emissions and sustainable development, studies of porous organic-inorganic materials as potential candidates for carbon dioxide capture and green catalysis has been growing exponentially. In this report, different ways to prepare functional porous hybrids based on *N*-ligands will be discussed.

Metal-Organic Frameworks (MOFs)¹ play a pivotal role for the separation of gas mixtures because the efficiency of these highly porous materials can be superior to inorganic materials such as zeolites.² Our contribution in this field is relating to the elaboration of a new family of CO₂ adsorbents prepared from flexible 1,4,7-triazacyclononane (TACN) functionalized by carboxybenzyl functions and zinc(II) and cobalt(II) salts (Figure 1).³ These MOFs present a large surface area (up to 1100 m²g⁻¹), a high water stability and selective sorption of CO₂.

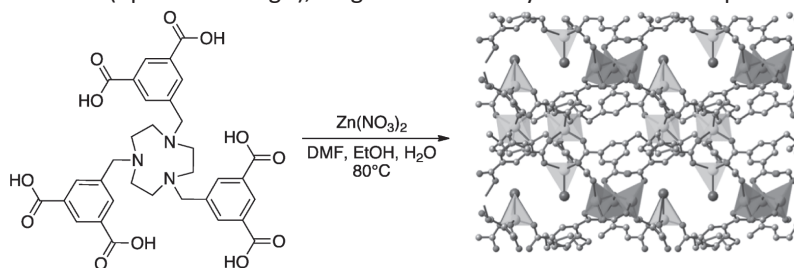


Figure 1. Synthesis of zinc(II) MOF based on an hexacarboxylate TACN linker

To prepare efficient green catalysts, two different approaches for the incorporation of phenanthroline ligands into porous materials were explored. Firstly, Zr-MOFs with 1,10-phenanthroline-3,8-dicarboxylate linker were successfully prepared. Next, a mesoporous catalyst was prepared by grafting of 1,10-phenanthroline-3-phosphonate onto mesoporous titanium oxide ($S_{\text{BET}} = 650 \text{ m}^2/\text{g}$). Both approaches gave recyclable catalysts for addition and substitution reactions, the latter one being particularly attractive for low-cost industrial production.

References

1. Zhao D., Timmons D.J., Yuan D., Zhou H.-C. *Acc. Chem. Res.* **2011**, *44*, 123.
2. a) Sumida K., Rogow D.L., Mason J.A., McDonald T.M., Bloch E.D., Herm Z.R., Bae T.-H., Long J.R. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 724; b) Li J.-R., Sculley J., Zhou H.-C. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 869.
3. Ortiz G., Brandès S., Rousselin Y., Guillard R. *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 6689.

FUNCTIONAL NANOSTRUCTURAL MATERIALS FOR ELECTROCHEMICAL APPLICATIONS IN ENERGY AND ENVIRONMENT THROUGH THE FRENCH-RUSSIAN ASSOCIATED LABORATORY: ION EXCHANGE MEMBRANES AND ASSOCIATED PROCESSES**Cretin M.,^a Nikonenko V.V.,^b Yaroslavtsev A.B.^c**^aEuropean Membrane Institute, University of Montpellier, cc47 Place Eugène Bataillon
34095 Montpellier cedex 5 France e-mail: marc.cretin@umontpellier.fr^bKuban State University, Stavropolskaya, 149, Krasnodar, 350040, Russia^cN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS,
Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

Nowadays, one of the most exciting challenges, in France, Russia and all over the world, is to manage in a balanced way human activities and resources protection in terms of quantity and quality. Then in the field of energy production and water treatment and remediation, electrochemistry is an interesting tool to produce electricity in a safe and clean way and to treat water without adding chemicals.

For those purposes, historically the French-Russian Associated Laboratory (LIA – MEIPA) developed ion-exchange membranes with tailored structure on the nano- and micrometer scale, electrodialysis (ED) for applications in water desalination and extraction of high value natural substances. Actually the field of expertise of the consortium is enlarged to water remediation through Electrochemical Advanced Oxidation Processes (EAOP) and to energy production from Proton Exchange Membrane Fuel Cells (PEMFC) and to hydrogen production from Proton Exchange Membrane Electrolyser Cells (PEMEC).

We will present a review of the expertise of the LIA in the field of energy and water focusing on (i) ion exchange membranes (preparation and *in situ* and *operando* characterization)¹⁻³, (ii) PEMEC for low cost hydrogen production from alcohol⁴, (iii) electrode materials for electrocatalysis in PEMFC and hence (iv) electrode materials for hydroxyl radicals in EAOP for water remediation⁵.

References

1. Nikonenko V.V., Yaroslavtsev A.B. and Pourcelly G. (2012): Ion transfer in and through charged membranes. Structure, properties, theory. In: Ionic Interactions in Natural and Synthetic Macromolecules, Eds. Ciferri, A and Perico, A. (Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, Inc.), 267-336.
2. Kniaginicheva E., Pismenskaya N., Melnikov S., Belashova E., Sístat P., Cretin M., Nikonenko V., *Journal of Membrane Science*, 2015, **496**, 78-83.
3. Deabate S., Gebel G., Huguet P., Morin A., Pourcelly G., *Energy & Envir. Sci.*, 2012, **5**, 8824.
4. Lamy C., Guenot B., Cretin M., Pourcelly G., *Electrochimica Acta*, 2015, **177**, 352.
5. Le T-X-H, Bechelany M., Lacour S., Oturan N., Oturan M. A., Cretin M., *Carbon* 2015, **94**, 1003.

SURVEY IN PORPHYRIN CHEMISTRY IN THE FRAMEWORK OF CNRS - RAS JOINT LABORATORY "LAMREM"

Gorbunova Yu.G.,^{a,b} Lemeune A.,^c Guillard R.,^c Tsivadze A.Yu.^{a,b}

^aA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS, Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia, e-mail: yulia@igic.ras.ru

^bN.S. Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Leninskiy prospekt, 31, Moscow, 119991, Russia

^cICMUB, UMR CNRS 6302, 9 avenue Alain Savary, 21000 Dijon Cedex, France, e-mail: Alla.Lemeune@u-bourgogne.fr

The report will be devoted to collaboration of Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry of Russian Academy of Sciences and Burgundy University in the framework of International Associated Laboratory -Laboratory of Macrocycles systems and RElated Materials. The areas of investigations include the synthesis of functionalized N-ligands, the studies of their coordination and physical-chemical properties and the preparation of advanced materials based on these ligands.

The main attention in the report will be paid for developing of supramolecular architectures and hybrid materials based on new porphyrin derivatives. Functional properties of porphyrins are widely exploited in natural and artificial systems. The molecular structure of free base porphyrins and their complexes can be precisely adapted to the target function and the operating environment by varying the substituents on the macrocycle and the metal centres. The generation of porphyrin-based supramolecular architectures is also strongly depended on both substituents and metal center nature.^{1,2} The synthetic approaches towards porphyrins bearing a C-P bond at the periphery of the macrocycle as well as imidazoporphyrins will be discussed. The examples of supramolecular assembly with different topology and related materials will be presented.

References

1. Beletskaya I.P., Tyurin V.S., Tsivadze A.Y., Guillard R., Stern C. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 1659.
2. Bessmertnykh-Lemeune A.G., Guillard R., Stern C., Enakieva Yu.Yu., Gorbunova Yu.G., Tsivadze A.Yu., Nefedov S.E. Biomimetic Studies of Porphyrin Self-Assembled Systems. In "Supramolecular Systems: Chemistry, Types and Applications" Ed. *Nova Science Publishers*, **2016**.

Acknowledgements: This work was performed in the framework of French-Russian Associated Laboratory "LAMREM", supported by the CNRS, Russian Academy of Sciences and Russian Foundation for Basic Research.

COMPARISON OF POLYMER FILMS BASED ON Mg(II) PORPHINE
AND ON Mg(II) 5,15-DI(PARAMETHOXYPHENYL)PORPHINEKonev D.V.,^{a,b} Istakova O.I.,^{a,b} Lizgina K.V.,^c Vorotyntsev M.A.^{a,b,c,d}^aDmitry Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Miusskaya sq., 9, Moscow, 125047, Russia, e-mail: mivo2010@yandex.com^bInstitute of Problems of Chemical Physics RAS, prospekt Semenova, 1, Chernogolovka, 142432, Russia^cMoscow State Lomonosov University, Leninskie Gory, 1-3, Moscow, 119991, Russia^dICMUB, UMR 6302 CNRS-Université de Bourgogne, Dijon, France

Several years ago we have succeeded in synthesizing the very first conjugated polymer composed only of magnesium(II) porphine (**MgP**) building blocks (Fig. 1a) [1]. This material as a film of the electrode surface demonstrates a pronounced electroactivity, with varying of optical, electrochemical, conductive and other properties as a function of the electrode potential.

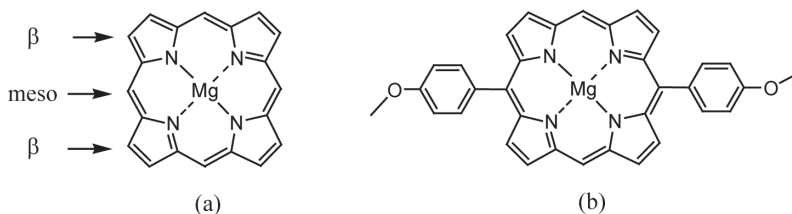


Figure 1. Molecular structures: a – Mg porphine, b – 5,15-di(paramethoxyphenyl) Mg porphine.

One should keep in mind that monomeric MgP has 4 equivalent *meso*-positions (Fig. 1a) so that its electropolymerization does not lead definitely to a *linear-chain* structure (zigzag elements or even branched structures are possible). To make the molecular structure of the polymer strictly linear we synthesized a similar monomer (5,15-di(paramethoxyphenyl) magnesium porphine) with 5 and 15 *meso*-positions blocked by inert substituents (Fig. 1b).

Its electropolymerization [2] resulted in a new polymer. Cyclic voltammetry, in situ conductometry, UV and IR spectroscopies, SEM and AFM microscopies have been used to compare these two Mg porphine-based polymers.

References

1. Vorotyntsev M.A., Konev D.V., Devillers C.H., Bezverkhy I., Heintz O. *Electrochim. Acta Magnesium(II) Polyporphine: The First Electron-Conducting Polymer with Directly Linked Unsubstituted Porphyrin Units Obtained by Electrooxidation at a Very Low Potential* 55 (2010) 6703-6714
2. Konev D.V., Devillers C.H., Lizgina K.V., Baulin V.E., Vorotyntsev M.A. *Electropolymerization of non-substituted Mg(II) porphine: Effects of proton acceptor addition* J. Electroanal. Chem. 737 (2015) 235-242.

Financial support of the Russian Science Foundation, grant 14-13-01244, is acknowledged.

POLYAMINO-9,10-ANTHRAQUINONES FOR SENSING TOXIC METAL IONS IN AQUEOUS MEDIA

Lemeune A.,^a Meyer M.,^a Ermakova E.,^b Arslanov V.,^b Tsivadze A.,^b Averin A.,^b Beletskaya I.^b

^aICMUB, UMR CNRS 6302, 9 avenue Alain Savary,
21000 Dijon Cedex, France, e-mail: Alla.Lemeune@u-bourgogne.fr

^bA.N. Frumkin Institute of Physical Chemistry and Electrochemistry, RAS,
Leninsky prospekt, 31, Moscow, 119071, Russia

Intensive research activities are currently devoted to the development of sensors for toxic metal ions owing to the essential impact of these species on the environment and human health. Molecular chemosensors undergoing reversible color changes are particularly attractive, because they may be used for low-cost express analyses.

Herein, a versatile synthetic approach to chromogenic hydrophilic polyamine receptors is reported (Figure). A valuable and unique feature of Pd-catalyzed amination reaction resides in the relative easiness to modify the structure of receptors adjusting the structural parameters of chemosensors and target analytes. Moreover, the fine-tuning of properties of the signalling group including its hydrophilic-lipophilic balance is also simple to achieve. Different types of sensors from highly sensitive one to practical household devices for the quantification of toxic Cu^{2+} , Pb^{2+} and Hg^{2+} ions were elaborated according to this approach starting from 9,10-anthraquinones.

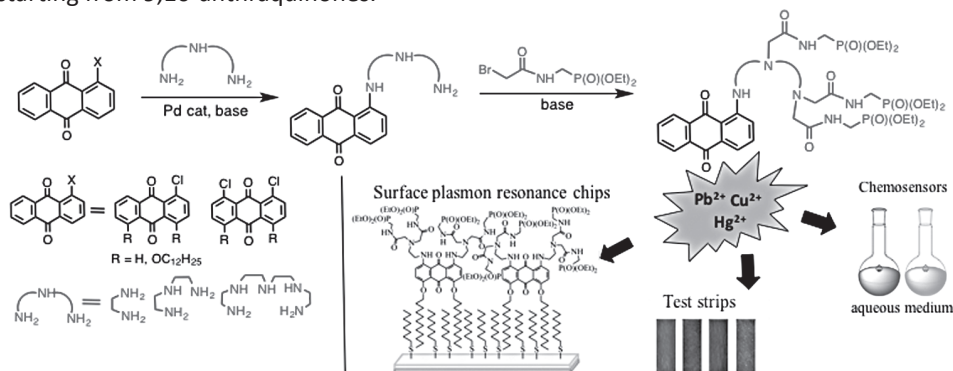


Figure 1. Synthesis and sensing properties polyaminoanthraquinones.

References

1. Ranyuk E., MorkosDouaihy C., Bessmertnykh A., Denat F., Averin A., Beletskaya I.P., Guillard R. *Org. Lett.* 2009, **11**, 987.
2. Ermakova E., Michalak J., Meyer M., Arslanov V., Tsivadze A., Guillard R., Bessmertnykh-Lemeune A. *Org. Lett.* 2013, **15**, 662.
3. Ermakova E., Raitman O., Shokurov A., Kalinina M., Selector S., Arslanov V., Tsivadze A., Meyer M., Bessmertnykh-Lemeune A., Guillard R. *Analyst* 2016, **141**, 1912.

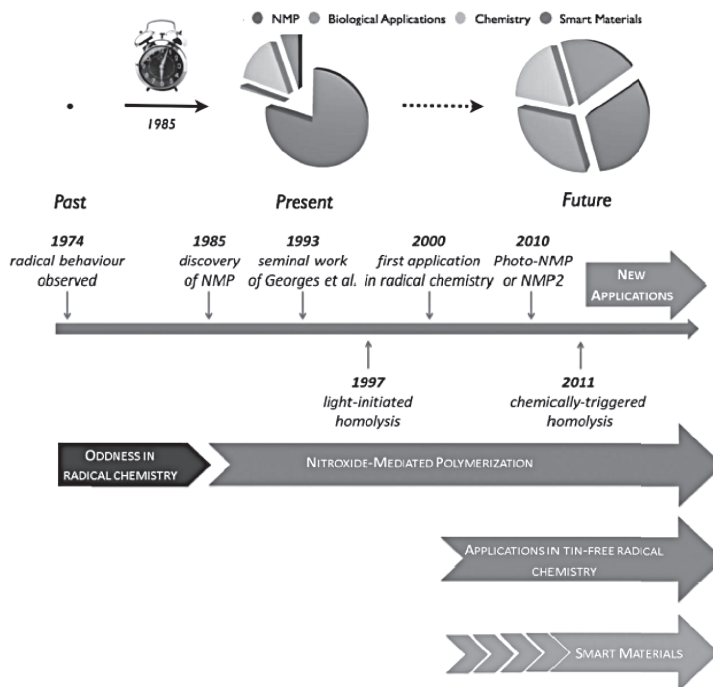
LAST PROGRESS IN ACTIVATION OF HOMOLYSIS IN ALKOXYAMINES: APPLICATION IN MATERIALS SCIENCES AND BIOLOGY

Marque S.^{a,b}

^aAix-Marseille Université, CNRS-UMR 7273, ICR, France, e-mail: sylvain.marque@univ-amu.fr

^bN.N. Vorozhtsov Institute of Organic Chemistry, SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 9,
Novosibirsk, 630090, Russia

The homolysis of the C—ON bond in alkoxyamines R1R2NOR3 was first reported in 1974, and the first application in 1986 for their use as initiators/controllers in radical polymerization, so-called Nitroxide Mediated Polymerization (NMP). This chemistry experienced a tremendous development in all of its aspects related to NMP.



Since a few years, applications in Material Sciences and in Biology emerged. This talk is focused on the new modes of activation of the C—ON homolysis and how it can be applied in Material Sciences and Biology.

References

1. Audran G., Brémond P., Marque S.R.A. *Chem. Commun.* **2014**, 50, 59, 7921-7928

Grants: Russian Science Fondation 15-13-20020.

CHELATION OF TOXIC METALS: FROM FUNDAMENTAL ADVANCES IN MACROCYCLIC CHEMISTRY TO EXTRACTING MATERIALS

Meyer M.

*Institut de Chimie Moléculaire de l'Université de Bourgogne (ICMUB), UMR 6302, CNRS,
Université de Bourgogne – Franche-Comté, 9 avenue A. Savary, 21078 Dijon Cedex, France,
e-mail: michel.meyer@u-bourgogne.fr*

Exposure to lead-contaminated tap water is a persistent issue in many western countries. In the context of the 98/83/EU directive, we got involved in the design of a cartridge-based purification system that could be mounted directly on a kitchen faucet. Solid-phase extraction by covalent attachment of a lead-selective sequestering agent to the surface of silica gel was thought as an efficient method to reduce the lead level below the new parametric value, as shown by pipe-loop tests.¹ High binding affinity, selectivity, and fast uptake kinetics are of crucial importance. This fine-tuning was most conveniently achieved by taking advantage of the outstanding coordination properties displayed by *N*-functionalized tetraazamacrocycles bearing amidic side chains.²⁻³ Their structural, thermodynamic, and kinetic characterization will be discussed as well as solid/liquid extraction data.

The outstanding recognition properties of some mesoporous hybrid materials were further exploited for the selective and sensitive detection of lead(II) in water by electrochemical methods.⁴

This project found also interesting outreaches in the field of chemosensors⁵⁻⁶ within the frame of the French-Russian Arcus Program and, more recently, of the joint binational LIA laboratory "LAMREM" supported by the CNRS and the Russian Academy of Sciences, which are acknowledged for their financial support.

References

1. Meyer M., Bucaille A., Cuenot F., Denat F., Boschetti F., Guillard R. *French patent FR 2928144*, 2011; *US patent 8975395*, 2015.
2. Cuenot F., Meyer M., Espinosa E., Guillard R. *Inorg. Chem.* 2005, **44**, 7895-7910.
3. Cuenot F., Meyer M., Espinosa E., Bucaille A., Burgat R., Guillard R., Marichal-Westrich C. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2008, 267-283.
4. Goubert-Renaudin S., Moreau M., Despas C., Meyer M., Denat F., Lebeau B., Walcarius, A. *Electroanalysis* 2009, **21**, 1731-1742.
5. Ranyuk E., Uglov A., Meyer M., Bessmertnykh-Lemeune A., Denat F., Averin A., Beletskaya I., Guillard R. *Dalton Trans.* 2011, **40**, 10491-10502.
6. Ranyuk E., Ermakova E.V., Bovigny L., Meyer M., Bessmertnykh-Lemeune A., Guillard R., Rousselin Y., Tsivadze A.Y., Arslanov V.V. *New J. Chem.* 2014, **38**, 317-329.

**POLYNIOBATES: NEW INORGANIC LIGANDS AND BUILDING BLOCKS
FOR NANO-SIZED COMPLEXES****Sokolov M.N., Abramov P.A.**

*A.V. Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, prospekt ac. Lavrentieva, 3,
Novosibirsk, 630090, Russia, e-mail: caesar@niic.nsc.ru
Novosibirsk State University, Pirogova, 2, Novosibirsk, 630090, Russia*

In this contribution we focus on the recent advances in the field of polyniobates, concentrating on various aspects of reactivity of Lindqvist-based hexaniobate $[\text{Nb}_6\text{O}_{19}]^{8-}$ anions. These anions can act as tridentate robust ligands towards various inorganic and organometallic cationic species (coordination to Pt, Rh, Ir will be discussed) which are active catalysts in electrochemical oxidation of water and methanol. The scope of this chemistry can be expanded by substitution of one of the terminal $\{\text{Nb}=\text{O}\}^{3+}$ groups in $[\text{Nb}_6\text{O}_{19}]^{8-}$ by another fragment with similar coordination preferences, such as $\{\text{Te}-\text{OH}\}^{5+}$. Even though $[\text{Nb}_6\text{O}_{19}]^{8-}$ are robust under ordinary conditions, there hydrothermal reactions in the presence of another building blocks (VO_4^{3-} , CO_3^{2-} , SiO_4^{4-}) produces a rich chemistry which involves high-nuclearity polyniobates of nanoscopic size, such as $[\text{Si}_4\text{Nb}_{16}\text{O}_{56}]^{16-}$, $[\text{VNb}_{14}\text{O}_{42}(\text{CO}_3)_2]^{13-}$, $[\text{V}_4\text{Nb}_{24}\text{O}_{76}]^{12-}$. Supramolecular aggregation of $[\text{Nb}_6\text{O}_{19}]^{8-}$ templated by metal cations gives giant aggregates such as $[\text{Nb}_{96}\text{O}_{276}(\text{H}_2\text{O})_{12}]^{70-}$ (by K^+) or a series of mixed-valent Cu(II)-Cu(III)-polyniobates. The last part of the presentation will deal with the use of specific tools to unravel the integrity and reaction dynamics in the solutions of polyniobates. We used a combination of new and established analytical tools for study of the solution behavior of individual reaction products and reaction mixtures, a task challenging when handling systems where few alternative analytical methods are readily available. The ^1H , ^{13}C and DOSY NMR techniques combined with ESI-MS and capillary electrophoresis are adequate tools for characterization of complex chemistry in polyniobate solutions.

References

1. Abramov P.A., Sokolov M.N., Vivent C. *Inorganics* 2015, 3, 160.
2. Abramov P.A., Vicent C., Kompankov N.B., Gushchin A.L., Sokolov M.N. *Eur. J. Inorg. Chem.* 2016, 154.
3. Abramov P.A., Vicent C., Kompankov N.B., Gushchin A.L., Sokolov M.N. *Chem. Commun.* 2015, 51, 421.

The work was supported by Russian Science Foundation, grant No. 14-13-00645.

ORGANOLANTHANIDES FOR ENANTIOSELECTIVE OLEFIN HYDROAMINATION

Trifonov A.A.

*G.A. Razuvaev Institute of Organometallic Chemistry RAS, Tropinina, 49,
Nizhny Novgorod, 603950, Russia, e-mail: trif@iomc.ras.ru*

Asymmetric intramolecular hydroamination reaction is an atom-economic and ecologic way to prepare chiral nitrogen-containing heterocyclic compounds. The synthesis of chiral alkyl- and amido rare-earth complexes supported by chiral binaphthylamido ligands will be reported. A new family of structurally defined heterobimetallic rare earth lithium ate complexes based on N-substituted binaphthylamido ligands was discovered that promoted the hydroamination/cyclization of aminoolefins with up to 87% ee. Neutral and ate rare earth alkyl complexes proved to be very efficient catalysts for enantioselective intramolecular hydroamination of aminopentenes or aminohexene at room temperature with enantiomeric excesses up to 83%. These compounds were evaluated as catalysts to promote the enantioselective hydroamination of amino-1,3-dienes. Chiral alkyl ate-complexes are shown to be efficient catalysts for the enantioselective intramolecular hydroamination of primary amines tethered to sterically demanding alkenes at high reaction temperatures. Fine tuning of their chiral environment allowed to reach enantioselectivities of up to 77% ee for the cyclisation of aminoalkenes bearing 1,2-di-substituted carbon-carbon double bond. Under harsher reaction conditions, these chiral complexes also demonstrate the ability to promote the hydroamination/cyclisation of amine-tethered tri-substituted alkenes in enantioselectivities of up to 55% ee, as the first report of the formation of enantioenriched quaternary centres by an hydroamination reaction.

**SUPRACHEM AND ARCUS PROJECTS – IMPORTANT STEPS IN FRENCH-
RUSSIAN COLLABORATION IN SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY****Varnek A.***Faculté de Chimie, Université de Strasbourg, 1, rue B. Pascal,
Strasbourg 67000 France, varnek@unistra.fr*

This presentation concerns *Suprachem* (Supramolecular Systems in Chemistry and Biology) - a joint project of CNRS and Russian Academy of Sciences in the period 2005-2012. It involved eight French research teams from Strasbourg, Paris, Bordeaux and Dijon and ten Russian teams from Moscow, Kazan, St. Peterbourg and Novosibirsk. On 2009, seven Ukrainian teams and one German team have joined the project. This collaboration has been supported by the ARCUS project funded by the government of the Alsace Region in France and the French Ministry of Foreign Affairs (2006-2010), by numerous PhD fellowships from the French Embassy in Russia as well as by the grants from the Russian Foundation of Basic Research. Considerable achievements have been attained during 8 years of functioning. Thus, 9 international symposia and 4 summer schools have been organized, 10 PhD theses with double supervision have been defended, 35 Russian scientists had an opportunity to stay 1-3 months in French laboratories. This collaboration resulted in more than 50 articles published in high level international journals. It is worth to note that the links established between some Suprachem members helped them to launch several new projects including three joint laboratories (LIA) and one PICS project.

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

INTERTECH CORPORATION: НОВЫЕ РАЗРАБОТКИ И ВОЗМОЖНОСТИ ПРИБОРОВ ДЛЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Ахметов М.Ф., Кимстач Т.Б.

Московское представительство ИНТЕРТЕК Трейдинг Корпорейшн, 119333, Москва, Ленинский проспект 55/1, стр. 2, e-mail: mfa@intertech-corp.ru

INTERTECH Corporation – американская компания, специализирующаяся на поставках научного и аналитического оборудования, оборудования для мониторинга загрязнения воздуха и управления технологическими процессами, комплексном оснащении и строительстве лабораторий «под ключ».

Основной объем поставляемого оборудования производится компаниями, входящими в состав лидера мирового приборостроения – компании Thermo Scientific, входящей в состав корпорации Thermo Fisher Scientific. Кроме того, INTERTECH Corporation эксклюзивно представляет на территории СНГ оборудование компаний:

TA Instruments - оборудование для термоанализа, реометры

Asylum Research Inc - атомно-силовые микроскопы;

KLA-Tencor Inc. - оптические и стилусные профилометры

Anasys Instruments – ИК-АСМ-микроскопы и нанотермоанализ

UNISEARCH Associates Inc - оборудование для измерения газов в технологических потоках и окружающем воздухе

Аналитическое, лабораторное, вспомогательное, технологическое оборудование, мебель, расходные материалы и все необходимое для реализации комплексного проекта производится ведущими мировыми компаниями, эксклюзивно представленными в СНГ нашей компанией.

На протяжении 25 лет наше оборудование успешно эксплуатируется на десятках предприятий в металлургии, химии, экологии, атомной промышленности, медицине, фармацевтике, криминалистике, геологии, научно-исследовательских центрах и др. За этот период времени поставлено и обслуживается более 1800 единиц крупного оборудования.

Штаб-квартира INTERTECH Corporation расположена в городе Аткинсон, штат Нью-Гемпшир, США. Компания INTERTECH Corporation имеет сеть представительств в России (Москва, Екатеринбург, Новосибирск, Красноярск, Хабаровск), а также представительства в Украине, Белоруссии и Казахстане (Алматы, Астана).

Оборудование и системы, поставляемые INTERTECH Corporation, сертифицированы Федеральным агентством по техническому регулированию и метрологии России.

СТО ЛЕТ ИНДУСТРИИ ДРАГМЕТАЛЛОВ

Боровков Д.А., Богданов В.И., Гроховский С.В.

АО «Екатеринбургский завод по обработке цветных металлов»

Сам факт рождения аффинажного завода в Екатеринбурге в 1916 г, поставивший точку на вывозе уральской сырой платины за границу, является основной отправной точкой развития драгметалльной промышленности в России.

Под руководством Н.Н.Барабошкина - крупного учёного и организатора - была создана технология получения всех металлов платиновой группы.

Прибытие на Урал завода «Платина-Прибор» в 1941 г, перевода аффинажа в Красноярск, перепрофилирование завода на металлообрабатывающее предприятие и, особенно, выполнение первых «спецаказов» в сороковые годы - исторически важные события, востребованные временем и развитием техники, давшие мощный толчок дальнейшему развитию.

Завод уже в промышленном масштабе осваивает выпуск проволоки, каталитических сеток, контактов, лабораторной посуды и другой продукции.

Способ плавки в индукционном токе, внедрённый в 1947 году, - это качественно новый и крупный шаг в повышении уровня технического развития завода, который в сравнении с плавкой в кислородно-водородном пламени в печи из известняка сделал плавку и больше и качественнее.

Закупаются ткацкие станки, 2-х клетевой прокатный стан, первый штамповочный автомат и волочильные машины фирмы «Кратос».

В 50-60-е годы дальнейший рост завода: запускается новое оборудование, внедряется спектральный анализ, что позволило резко сократить время на аттестацию готовой продукции, наращивается производство контактов.

Непрерывно ведутся научно-исследовательские работы. Всё возрастающие потребности промышленности - это разработка новых материалов, сплавов, исследование их свойств, совершенствование техпроцессов и оборудования, повышение квалификации сотрудников.

Завод становится базовой организацией по стандартизации благородных металлов, сплавов и изделий из них.

С освоением трубопруткового гидравлического пресса горячего прессования усилием 630 т получена возможность производства цельнотянутых бесшовных труб различного диаметра. Прокатный стан рулонного проката позволил выпускать ленту из серебра и серебряно-палладиевого сплава, гидростат высокого давления - тигли для плавки платиновых металлов высокого качества.

Широкое развитие получило направление производства тонкодисперсных порошков МПГ для электронной промышленности и каталитической химии. Разработана уникальная технология аффинажа шлиховой платины с пирометаллургической обработкой в голове процесса. Внедрены процессы получения изделий методом гальванопластики, а также рафинирования вторичных металлов и сплавов в расплавах солей, что значительно улучшило качество готовой продукции.

Внедрение электронно-лучевого переплава улучшило эксплуатационные свойства получаемых изделий, в частности иридиевых тиглей, и позволило производить проволоку тонких диаметров из иридия.

Была разработана технология производства дисперсно-упрочнённых материалов, применение которых при изготовлении СП устройств значительно увеличило их ресурс работы.

Внедрены технологии изготовления биметаллических материалов методом взрыва, термоэлектродной проволоки волокнистой структуры. Большое развитие получили научно-исследовательские работы по контактным и резистивным материалам повышенной износостойкости, применяемым в приборостроении.

На заводе разворачивается производство ювелирных изделий и камнеобрабатывающее производство.

Завод становится многопрофильным предприятием от переработки сырья до выпуска наукоемкой продукции, востребованной во всех отраслях народного хозяйства. Инженеры, специалисты завода участвуют в конференциях и совещаниях, на базе завода проводятся научно-технические конференции, в том числе и Черняевские, издаются сборники трудов.

За этот период развития завода инженерами и специалистами по заводским проблемам защищено 19 кандидатских диссертаций, получено более 100 авторских свидетельств на изобретения.

К началу XXI века заводу катастрофически не хватает жизненного пространства и он находит новую площадку - Уральский завод химреактивов в г. Верхняя Пышма, в одном из корпусов которого разворачивается аффинажное производство, а затем в 2008 году переезжает и весь завод.

Сегодня завод обустроился на новом месте, восстановил все основные технологические схемы производства изделий технического назначения, проводит техническое перевооружение, начинает возрождать лучшие традиции славного предприятия - лидера платиновой промышленности.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, ИОНОПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ТРОЙНЫХ МОЛИБДАТОВ И ВОЛЬФРАМАТОВ СЕРЕБРА-, ДВУХ- И ТРЕХВАЛЕНТНЫХ МЕТАЛЛОВ

Котова И.Ю.^{а,б} **Солодовников С.Ф.**^{в,г} **Солодовникова З.А.**^в
Хайкина Е.Г.^{а,б}

^аБайкальский институт природопользования СО РАН, 670047, Улан-Удэ, ул.
Сахьяновой, 6, e-mail: ikotova@binm.bsnet.ru

^бБурятский государственный университет, 670000, Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а

^вИнститут неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН,
630090, Новосибирск, просп. Акад. Лаврентьева, 3

^гНовосибирский национальный исследовательский государственный университет,
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Твердофазными реакциями синтезированы две большие группы фаз с каркасными структурами: триклинные тройные молибдаты $\text{AgA}_3\text{R}(\text{MoO}_4)_5$ (пр. гр. $\text{P } \bar{1}$, $Z = 2$) типа $\text{NaMg}_3\text{In}(\text{MoO}_4)_5$ и фазы переменного состава $\text{Ag}_{1-x}\text{A}_{1-x}\text{R}_{1+x}(\text{EO}_4)_3$ ($\text{E} = \text{Mo}, \text{W}$) типа NASICON (пр. гр. $R\bar{3}c$, $Z = 6$)². Раствор-расплавной кристаллизацией получены кристаллы представителей каждой группы фаз и определены их структуры (рисунок), кристаллографические, термические и электрофизические свойства. Установлено, что соединения обладают высокой ионной проводимостью ($10^{-2} - 10^{-3} \text{ См} \cdot \text{см}^{-1}$).

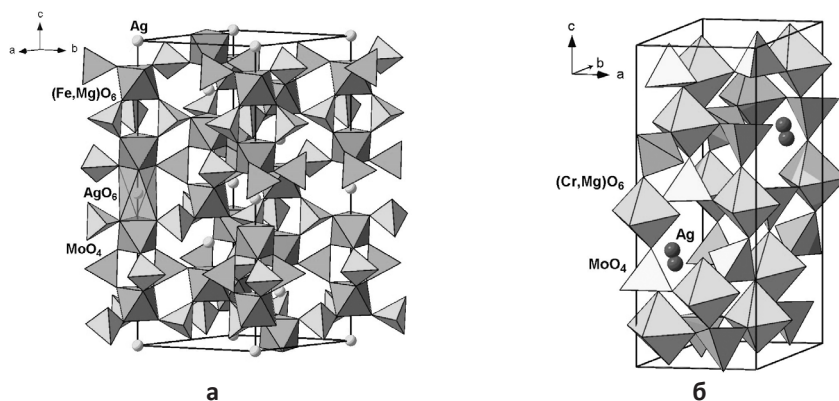


Рисунок 1. Общий вид структур: а) $\text{AgMg}_3\text{Cr}(\text{MoO}_4)_5$ (тип $\text{NaMg}_3\text{In}(\text{MoO}_4)_5$);
б) $\text{Ag}_{0.73}(\text{Mg}_{0.73}\text{Fe}_{1.27})(\text{MoO}_4)_3$ (тип NASICON).

Литература

1. Клевцова Р.Ф., Васильев А.Д. и др. Журн. структ. химии, 1993, **34**, № 5, 147.
2. Лазорак Б.И., Ефремов В.А. Журн. неорган. химии, 1987, **32**, № 3, 652.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 13-03-0102, 16-03-00510 и 14-03-00298.

РОЛЬ ХИМИИ В СОВРЕМЕННОЙ НАУКЕ. ПОЧЕМУ И КАК КОМПАНИЯ ELSEVIER ПОДДЕРЖИВАЕТ НАУЧНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИИ.

Худошин А.Г.

*Elsevier B.V., Radarweg 29, 1043 NX Amsterdam, The Netherlands,
e-mail : a.khudoshin@elsevier.com*

Ученые химики традиционно проявляют высокую публикационную активность, публикации в области химии составляют практически одну треть научных печатных работ за последние 5 лет.

На мировой карте российская наука не является исключением. По данным Scopus каждая 4 научная работа в РФ относится к химическим наукам (химия, химическая инженерия, науки о материалах). Химические науки играют особую роль для реализации шагов стратегии импортозамещения и при разработке инновационных и генерических препаратов, а значит для реализации программа Фарма-2020.

Для поддержания научно-образовательного процесса в области химии и популяризации химии компания Elsevier регулярно проводит научные конкурсы с ценными призами.

Однако повседневная работа химиков включает в себя ряд проблем, которые требуют затрат времени и снижают производительность труда. Поддержка ученых химиков в области преодоления этих проблем усиливает научно-исследовательские программы и улучшает качество подготовки молодых специалистов, что позволяет повысить репутацию и потенциальные доходы учебно-научных организаций. В течение многих лет, Reaxys катализировал научные исследования, инновации и образование. Разработанный для мгновенного ответа на химические вопросы, Reaxys быстро и легко предоставляет наиболее актуальную информацию по химии, релевантную для целого ряда дисциплин. Продолжая придавать особое значение этой задаче, новый Reaxys приводит контент и функциональные возможности в соответствие с наиболее важными аспектами поиска химической информации: оптимизирован поиск литературы, значительно увеличен объем извлекаемых данных из документов, расширен охват патентов, и теперь интеграции результатов поиска в Reaxys в повседневную работу решается, как по одному щелчку мыши.

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- A**
- Abdulaeva I.A. 192
- Abdullina D.R. 158
- Abramov I.A. 215
- Abramov P.A. 238
- Adonin S.A. 176
- Afonina V.A. 132
- Ahmetzyanova Z.V. 190
- Alekseeva O.M. 177
- Alfimov M.V. 180, 203, 212, 216, 221
- Amirov R.R. 178
- Andreeva E.R. 201
- Andreeva I.P. 111
- Antipin I. 118, 144, 145
- Antipin I.S. 133, 134, 139, 143, 171, 182, 190, 194, 196, 204, 205, 209, 217, 226
- Antipin R.L. 106, 111
- Arslanov V. 235
- Arslanov V.V. 174, 210
- Asfina D.R. 158
- Atabekyan L.S. 220
- Atlasova Z.Z. 178
- Avakian V.G. 180
- Averin A. 235
- B**
- Baev D.S. 107
- Bagautnov A.M. 215
- Bakhteev S.A. 152
- Bartashevich E.V. 108, 151
- Baskin I.I. 109, 133, 159
- Bassani D.M. 164
- Baulin V.E. 197, 198
- Bechmann M. 166
- Belaidi S. 147
- Beletskaya I. 231, 235
- Belkova N.V. 230
- Beloglazkina E.K. 106
- Berezhnoy G.S. 191
- Beshnova D. 106
- Beshnova D.A. 111
- Bezhtentsev V.M. 102
- Birin K.P. 174, 192
- Blokhin Yu.I. 215
- Bodrov A.V. 134
- Brandès S. 231
- Bulach V. 165, 181
- Bunin D.A. 193
- Buravkova L.B. 201
- Burilova Ye.A. 178
- Burilov V.A. 171
- C**
- Chandrasekhar D.B. 11
- Chang-Hsu Y. 11
- Chernova E.F. 194
- Chernozatonskii L.A. 110
- Chibisov A.K. 220
- Cooks R.G. 8
- Cretin M. 232
- D**
- Daoud I. 147
- Delouis G. 140
- Demin V.A. 110
- Denat F. 227
- Dmitriev A.A. 113
- Dmitrieva S.N. 212
- Dmitriev A.V. 102
- Druzhilovsky D.S. 102
- Dukhanina E.G. 184, 195
- Dzikovski B.G. 180
- E**
- Egorova B. 173
- Egorov A.M. 111
- Egorov A.M. 106
- Elipilli S. 9
- Enakieva Yu.Yu. 202
- Ermakova E. 235
- Ezhov A.A. 174, 210
- F**
- Fedin V.P. 168, 176
- Fedorova O. 173
- Fedorov Yu. 173
- Ferlay S. 182, 194, 204
- Feuchter H. 231
- Filimonov D.A. 102
- Filippova A.A. 206
- Fomina M.V. 213
- Frolova T.S. 107
- G**
- Gak V.Y. 197
- Gak V.Yu. 198
- Galaymetdinov Y.G. 218
- Galieva F.B. 196, 217
- Ganesh K.N. 9
- Gayfulin Y.M. 200
- Gerchikov A.I. 158
- Gerchikov A.Ja. 157
- Gimadieva A.R. 160
- Gimadiev T.R. 133, 134
- Glagolev M.K. 127
- Glaser R. 166
- Glavatskikh M.V. 135, 136
- Goldshleger N.F. 197, 198
- Golosnaya M.N. 112
- Gorbunova Y.G. 174, 199, 207
- Gorbunova Yu.G. 181, 183, 191, 192, 193, 202, 210, 233
- Gordeeva V.D. 137
- Gorokh I.D. 176
- Gorshkova M.Yu. 179
- Govorun E.N. 188
- Gradova M.A. 214
- Grigolava M. 123
- Grigorenko V.G. 106, 111
- Grigoreva E.A. 108
- Grigoryan E.S. 179
- Gritsan N.P. 113
- Gromov S.P. 212, 213, 216, 219, 220, 221
- Grudinin S. 138
- Guilard R. 231, 233
- H**
- Harris J. 170
- Horvath D. 132, 135, 136, 149
- Hosseini M.W. 10, 165, 181, 182, 194, 204
- Hwu J.R. 11
- I**
- Ibragimova R.R. 171

Istakova O.I.	234	Latypov E.I.	143
Ivanov D.A.	220	Lavrov M.I.	122
Ivanov S.M.	102	Lazutin A.A.	127, 188
Ivenskaya N.M.	209	Lemeune A.	231, 233, 235
J		Lin A.I.	118, 144, 145, 148
Jhensa A.V.	154	Lindhorst T.K.	12
K		Litvinova Y.M.	200
Kadkin O.N.	139	Livshits V.A.	180, 203
Kadukova M.N.	138	Lizgina K.V.	234
Kalashnikova I.P.	198	Lizhi Gai	170
Kalashnikov V.V.	186	Lobanov A.V.	201, 214
Kalinina M.A.	174, 210	Lobova N.A.	216, 220, 221
Kallio J.	111	Lubimov I.A.	215
Kalmykov S.	173	Lushchekina S.V.	117
Karlov D.S.	122	M	
Kataeva O.N.	190	Mack J.	170
Katkova E.V.	114	Madzhidov T.I.	118, 133, 134, 135, 136, 139, 144, 145, 146, 148, 149
Katkova M.A.	208	Majouga A.G.	106, 111
Ketkov S.Yu.	208	Majumdar P.	170
Khafizov N.R.	139	Manoury E.	230
Khalilova A.R.	152	Maohu Shi	170
Khayrullina V.R.	157, 158, 160	Marcou G.	135, 136, 140, 149
Kim Yu.A.	177	Marets N.	165
Kirakosyan G.A.	191, 202	Markov O.N.	202
Kleshnina S.R.	209	Marque S.	236
Kleshnina S.R.	205	Martynov A.G.	183, 191, 193, 199, 207
Klimchuk O.	118, 140, 143, 144, 145	Masson P.	117
Kobychev V.B.	129, 130	Melkemi N.	147
Kochetkov A.N.	128	Melnikov M.Ya.	201
Koltsova E.M.	154	Meshkov B.B.	180, 203
Konchenko S.N.	113	Meshkov I.N.	181
Kondakova O.A.	114	Meyer M.	235, 237
Konev D.V.	234	Mikhailov S.A.	151
König B.	167, 174	Miller J.S.	13
Konovalov A.I.	182, 190, 196, 204, 205, 226	Mironova D.A.	171
Konovalov A.I.	217	Mironova E.A.	154
Konova V.I.	102	Mironov Y.V.	200
Kornilov K.N.	215	Mitrichev I.I.	154
Koshkin A.V.	203	Mitrofanov A.	231
Krementsova A.V.	177	Mokshyna E.G.	119
Kroitor A.P.	199	Moskvin D.O.	156
Kulinsky M.A.	141	Motyakin M.V.	184, 195
Kulkarni P.	9	Mouats A.	115
Kurchavov N.A.	212	Mueller N.	166
Kurmanova A.F.	155	Muravev A.A.	196
Kutov D.C.	114	Muravev A.A.	217
Kutzhanova K.Z.	155	Muravyeva M.S.	208
Kuz'menko N.E.	112	Mustafin A.G.	160
Kuz'mina L.G.	212, 216, 220, 221	N	
Kuzmin I.A.	206	Nasjirova R.F.	160
Kuz'min V.E.	141	Nasyrova Z.A.	178
Kuz'min V.E.	115, 119, 142	Navrotskii A.V.	184, 195
Kuznetsova V.A.	128	Nedostup V.I.	119
Kvashnin A.G.	110	Neklyudov S.A.	143
Kvashnin D.G.	110	Nemukhin A.V.	117, 120, 121
Kyritsakas N.	182, 194, 204	Nikiforov A.S.	213
L		Nikitina N.A.	112
Lagunin A.A.	102	Nikonenko V.V.	232
Lamzin V.	106	Nougmanov R.I.	133, 134
Lamzin V.S.	111	Novakov I.A.	184, 195
Lankin A.V.	116	Nozaki K.	14
Larin D.E.	188	Nugmanov R.I.	118, 144, 145, 146, 149
Larionova E.Yu.	129, 130	Nyokong T.	207

О	
Oganov A.R.	103
Ognichenko L.N.	142
Oluwole D.O.	207
Orel V.B.	130
Oshchepkov M.	173
Osolodkin D.I.	137
Ovsyannikov A.S.	182, 190, 194, 204
P	
Palyulin V.A.	122
Petrov N.Kh.	220
Pichugina D.A.	112
Pirtskhalava M.	123
Pogodin P.V.	102
Poli R.	230
Polischuk P.G.	141
Polishchuk P.G.	119
Popova E.V.	190
Popov S.V.	210
Poroikov V.V.	102
Pushkarev V.E.	186
Pustolaikina I.A.	155
R	
Radchenko E.V.	122
Razumov M.I.	206
Rubtsova M.Yu.	111
Rudik A.V.	102
Rumyantsev E.V.	185
S	
Safonova E.A.	183
Salah T.	147
Sataeva N.E.	192
Sazonov S.K.	221
Selivanova N.M.	218
Shechtman D.	15
Shen, Zhen.	170
Shibryaeva L.S.	177
Shih Y.-C.	11
Shiryaev A.A.	197, 198
Shubina E.S.	230
Shulevich Yu.V.	184, 195
Sidorov P.O.	148
Skitnevskaya A.D.	130
Smirnov I.V.	209
Sokolov M.N.	176, 238
Solodov A.N.	178
Solomonov A.V.	185
Solov'ev V.P.	109, 135, 136
Solovieva S.E.	171, 182, 190, 194, 196, 204, 205, 226
Solovieva S.E.	209, 217
Sorokin P.B.	110
Sotsky V.V.	156
Spasov A.A.	128
Stepanova E.S.	209
Sulimov A.V.	114
Sulimov V.B.	114
Swain S.P.	11
T	
Tarasova O.A.	102
Tebello Nyokong.	16, 170
Tetko I.V.	124
Timukhin E.V.	142
Titova E.M.	230
Tolbin A.Yu.	186
Tolstikova T.G.	107
Tomilova L.G.	186
Tovstun S.A.	187
Trashin S.A.	186
Trifonov A.A.	239
Trofimov B.A.	129, 130
Tropsha A.	17, 125
Tsay S.-C.	11
Tsirelson V.G.	108
Tsivadze A.	235
Tsivadze A.Yu.	174, 181, 183, 191, 192, 193, 197, 198, 199, 202, 207, 210, 233
Tupina M.Yu.	209
U	
Udartseva O.O.	201
Ushakov E.N.	212, 216, 219, 221
Uzol'tseva N.V.	156
V	
Varfolomeev S.D.	117
Varlamov O.P.	149
Varnek A.	109, 118, 126, 132, 140, 143, 144, 145, 146, 148, 149, 240
Varnek A.A.	133, 134, 135, 136
Vashurin A.S.	206
Vasilevskaya V.V.	127, 188
Vasiliev M.N.	157
Vasilyev M.N.	158
Vassiliev P.M.	128
Vatsadze S.Z.	172
Vedernikov A.I.	212, 213, 216, 220, 221
Vishnepolsky B.	123
Vitkovskaya N.M.	129, 130
Volkova I.F.	179
Vorfolomeeva V.V.	128
Voronina A.A.	206
Voronina Z.D.	179
Vorotyntsev M.A.	234
Voznyuk S.S.	155
Vulpe E.	165
W	
Worsfold P.J.	18
Y	
Yagodin A.V.	207
Yanalieva L.R.	128
Yaroslavtsev A.B.	232
Yuryeva E.I.	150
Yushina I.D.	108, 151
Yusupov R.A.	152
Z	
Zabrodina G.S.	208
Zakharova Ju.A.	184, 195
Zaripov S.R.	209
Zarudiy F.S.	157, 160
Zarudy F.S.	158
Zefirov N.S.	122, 186
Zhen Shen.	170
Zhokhova N.I.	159
Zhou Qi-F.	19
Zhuravleva Yu.I.	178

Zibarev A.V.	113		
Zigangirov A.S.	160	З	
Zinchenko V.F.	142	Зайцев С.Ю.	62
Ziyatdinova A.B.	178	Захарова С.В.	86
Znoyko S.A.	206	Зачернюк Б.А.	86
Zubenko D.	173	Зубарев М.П.	63
Zvyagina A.I.	174, 210		
Zyk N.V.	106	И	
А		Иванцова М.Н.	69
Абишева М.М.	45	Имангалиева Б.С.	82
Аксенова И.В.	36	Исаев Д.С.	91
Аксютин О.Е.	20	Искакова М.М.	41
Алдошин С.М.	21	К	
Александров А.А.	48	Каблов Е.Н.	25
Алфимов М.В.	22	Карпов В.В.	72
Андреев О.В.	58	Карташева М.Н.	55
Аристов И.В.	48	Карцова Л.А.	42
Астафуров В.И.	37	Кимстач Т.Б.	242
Ахметов М.Ф.	242	Клюшников А.М.	43
Б		Койфман О.И.	44
Багрова Н.В.	39	Кокибасова Г.Т.	45
Балакирев Н.А.	62	Коковкин В.В.	46
Баскакова С.А.	72	Колпакова Е.В.	84
Баторова Г.Н.	89	Коренев С.В.	46
Батуева И.С.	89	Корнилов К.Н.	88
Безматерных М.А.	69	Котова И.Ю.	245
Белецкая И.П.	23	Крылова Е.В.	83
Биманова А.И.	82	Куваева А.О.	87
Блохин Ю.И.	78	Кузнецова Л.М.	49
Богатиков Б.Ф.	75	Кузнецов В.В.	83
Богатова Т.В.	38	Курамшин А.И.	84
Богданов В.И.	243	Курнева М.В.	73
Боголицын К.Г.	32	Л	
Бондарев Ю.М.	88	Лисицына А.А.	62
Боровков Д.А.	243	Лисун Н.М.	85
В		Лунин В.В.	47
Васильева П.Д.	39	М	
Васипов В.В.	79	Максимов В.И.	62
Ведерникова Т.Г.	80	Маликова И.В.	36
Галайда А.П.	72	Малыгин А.А.	64
Горбунова Л.Г.	40	Маренный А.М.	37
Гринева О.В.	59	Матвеева Э.Ф.	65
Дедюхин А.С.	72	Мендалиева М.Р.	65
Демидова Н.В.	36	Миняйлов В.В.	47
Деркач С.Р.	60	Мирошников А.И.	27
Дмитриев С.Н.	24	Михайлов О.В.	48
Г		Монина Л.Н.	58
Гроховский С.В.	243	Москва В.В.	49
Е		Москвин С.А.	50
Евсюков А.И.	79	Мочалова Н.К.	63
Егорова О.А.	67, 81	Мясоедова Т.Г.	66
Егоров В.А.	73	Н	
Елохов А.М.	63	Невская Е.Ю.	67
Еремеев Н.Л.	62	Неделькин В.И.	86
Ефимова Е.В.	61	Никитина Т.С.	86
Ж		Николаев А.И.	60
Жаналиева Р.Н.	93	Николайчук П.А.	87
Жилин Д.М.	33	О	
Жуманова У.Т.	92	Оганесян Ю.Ц.	24
		Ординарцева А.В.	72

П		Студеникина Л.Ю.	85
Павлов А.Н.	88	Т	
Павлова Э.Т.	89	Талипов Р.Ф.	41
Пазюк Е.А.	47	Тарасова Н.П.	34
Петрова Л.А.	60	Токмянина С.В.	43
Пикулина Н.Ю.	65	Томина Е.В.	74
Плотникова А.В.	84	Торсыкбаева Б.Б.	92, 93
Подберезская Н.В.	51	Тюменова С.И.	55
Пономарев В.И.	68	Ф	
Р		Фролова Л.А.	62
Разумов В.Ф.	22	Х	
Рогалева Е.В.	55	Хайкина Е.Г.	243
С		Хайруллина Г.А.	84
Салахутдинов Р.Р.	41	Худошин А.Г.	246
Самойлов А.М.	38	Ц	
Самсонова О.Е.	36	Царькова М.С.	62
Селезнева И.С.	69	Ч	
Семакина Н.В.	52	Чарушин В.Н.	28
Семенова И.В.	90	Чернова Н.С.	86
Серикова К.К.	45	Чупанова Л.В.	61
Сироткин О.С.	70	Чупахин О.Н.	28
Сироткин Р.О.	70	Ш	
Скорик Н.А.	71	Шабунина О.В.	69, 72
Скосырева Н.С.	72	Шалимова Е.Г.	83
Сладкопевцев Б.В.	74	Шпилёва Е.В.	94
Смарыгин С.Н.	53	Шумилин А.С.	56, 95
Соболев А.Е.	91	Я	
Соколова М.Д.	73	Явойская О.В.	68
Соколова О.А.	78	Яковлева Г.Н.	75
Соловьева Е.Н.	86	Якунина И.Е.	56, 95
Солодовникова З.А.	243	Яркова Т.А.	78
Солодовников С.Ф.	243		
Сорокина Е.А.	67		
Соснов Е.А.	64		
Спиридонов А.М.	73		
Стихова А.М.	54		

ПАРТНЁРЫ И СПОНСОРЫ



**ИСКУССТВО
НАУКА И СПОРТ**

БЛАГОТВОРИТЕЛЬНЫЙ ФОНД «ИСКУССТВО, НАУКА И СПОРТ»

Благотворительный фонд «Искусство, наука и спорт» основан российским предпринимателем и меценатом Алишером Усмановым с целью оказания помощи в организации общественно значимых мероприятий в области искусства, культуры и спорта, а также реализации научно-образовательных и социальных проектов на территории Российской Федерации.

Благотворительная деятельность Фонда «Искусство, наука и спорт» направлена на поддержку проектов в следующих сферах:

Культура и искусство

Сохранение и приумножение культурного наследия России — одна из приоритетных задач Фонда. «Искусство, наука и спорт» осуществляет всестороннюю поддержку деятелей культуры и иницируемых ими мероприятий в области архитектуры, живописи, музыки, литературы и других видов искусства. Многие из проектов, реализованных при содействии Фонда «Искусство, наука и спорт» и личном участии Алишера Усманова, стали знаковыми событиями в культурной жизни страны.

Наука и образование

«Искусство, наука и спорт» поддерживает проекты по обмену опытом и мнениями между специалистами различных отраслей науки — форумы, конференции, фестивали и другие современные площадки для профессиональных дискуссий. Помощь также оказывается образовательным учреждениям всех уровней, включая высшие учебные заведения.

Спорт

Стремясь сделать вклад в развитие и популяризацию спорта в России, Фонд поддерживает спортивные клубы и федерации, содействует в организации и проведении профессиональных и любительских соревнований, поощряет молодых спортсменов, принимает участие в программах, направленных на пропаганду здорового образа жизни и физической культуры.

Социальная сфера

Благотворительный фонд «Искусство, наука и спорт» организует и поддерживает мероприятия по развитию инфраструктуры объектов здравоохранения и социального обслуживания. Под патронажем Фонда находится ряд детских домов, школ-интернатов и других учреждений для детей-сирот и детей, оставшихся без попечения родителей. Серьезное внимание уделяется учреждениям, воспитывающим тяжелобольных детей и детей с ограниченными возможностями.



УРАЛЬСКАЯ ГОРНО-МЕТАЛЛУРГИЧЕСКАЯ КОМПАНИЯ

Козицын
Андрей Анатольевич
Генеральный директор



УРАЛЬСКАЯ ГОРНО-МЕТАЛЛУРГИЧЕСКАЯ КОМПАНИЯ - один из ведущих вертикально-интегрированных холдингов страны. Создана в 1999 году. На сегодня объединяет более 40 предприятий различных отраслей промышленности в 15 регионах России и за рубежом. Совокупный оборот всех предприятий УГМК превышает 500 млрд. рублей. Ежегодная инвестиционная программа составляет от 30 до 60 млрд. рублей. Количество занятых - более 80 тыс. человек.

Ключевые активы сосредоточены в цветной металлургии. УГМК – крупнейший производитель катодной меди в России (свыше 380 тыс. тонн в год). УГМК - это компания полного цикла: от добычи сырья до производства готовой продукции. Собственная сырьевая база – 25 млн. тонн руды ежегодно, большая часть катодов перерабатывается в катанку, медный прокат и далее по технологической цепочке в кабельно-проводниковые изделия, автомобильные радиаторы. Помимо меди, УГМК занимает лидирующие позиции на отечественном рынке цинка, свинца, драгметаллов, расширяет производство редких и рассеянных элементов. Ориентирована преимущественно на развитие внутреннего рынка, на который приходится более половины выручки группы УГМК.

В состав диверсифицированного бизнеса холдинговой структуры входят также активы в угледобыче (вторая по размерам в России угольная компания «Кузбассразрезуголь» с объёмом добычи угля до 45 млн. тонн в год), девелоперские проекты (самый северный небоскреб мира – башня «Исеть» в Екатеринбурге) и авиастроение. Выпускаемая на чешском заводе УГМК Aircraft Industries модель самолета L-410 востребована на мировых рынках.



Компания располагает собственным проектным институтом «Уралмеханобр», корпоративным Техническим университетом и современным научно-исследовательским центром.

www.ugmk.com

**СОСПП**Свердловский областной
Союз промышленников
и предпринимателей

СВЕРДЛОВСКИЙ ОБЛАСТНОЙ СОЮЗ ПРОМЫШЛЕННИКОВ И ПРЕДПРИНИМАТЕЛЕЙ



Пумпянский
Дмитрий Александрович,
Президент СОСПП

Свердловский областной Союз промышленников и предпринимателей (СОСПП) - крупнейшее и наиболее влиятельное бизнес-объединение Свердловской области, в состав которого входит большинство крупных и средних предприятий, работающих на территории Свердловской области, 15 отраслевых союзов. Совокупный объем производства на предприятиях, входящих в Союз, - около 70 процентов от общепромышленного производства региона. СОСПП представляет весь спектр уральской экономики, но его основу составляют гиганты отечественной черной и цветной металлургии, химической промышленности, машиностроения, оборонно-промышленного комплекса. Для оперативного решения вопросов в Свердловской области действуют 6 территориальных объединений и 38 филиалов СОСПП. В состав Президиума и Совета Союза входят наиболее авторитетные предприниматели региона. Являясь представителем Российского союза промышленников и предпринимателей в регионе, Союз имеет возможность оказывать влияние на федеральную повестку взаимоотношений власти и бизнеса.

Отстаивание консолидированной позиции предпринимательского сообщества, выстраивание конструктивных взаимоотношений с органами власти – одна из главных задач деятельности СОСПП.

Союз предлагает и лоббирует совершенствование действующих и запуск новых инструментов поддержки бизнеса, наполнение их финансовыми ресурсами. Так, в регионе были разработаны программы «Развитие промышленности и науки на территории Свердловской области до 2020 года» и «Повышение инвестиционной привлекательности Свердловской области до 2020 года».



Образование как получение знаний, компетенций и навыков, востребованных на рынке труда, - общая цель и системы образования, и профессионального сообщества, и власти. При активном участии СОСПП разработана Комплексная государственная программа «Уральская инженерная школа», получившая поддержку Президента России. Союз активно поддерживает проведение чемпионата рабочих профессий по мировому стандарту WorldSkills.

СОСПП – инициатор и ответственный исполнитель по пилотному проекту развития системы профессиональных квалификаций в Свердловской области.

Ежегодно, начиная с 2011 года, Свердловский областной Союз промышленников и предпринимателей проводит благотворительную акцию «Екатерининская ассамблея». Средства, полученные в ходе мероприятия, перечисляются благополучателю на реализацию проекта, отбор которого ежегодно проводит экспертная группа и члены Президиума Совета СОСПП.

Телефон: +7 (343) 371-29-25, 371-28-85

Факс: +7 (343) 371-05-62

E-mail: sospp@sospp.ru

www.sospp.ru



САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО был основан в начале 1899 г. Возникнув на гребне хозяйственных и культурных успехов России на рубеже XIX-XX вв., он сам становится вскоре одним из факторов дальнейшего успешного развития страны. Полвека спустя институт получит оценку не только как знаменитое высшее учебное заведение, но и как „крупное достижение русской культуры" начала XX в.

Сегодня Политехнический университет стремится с максимальной ответственностью реализовывать государственную политику в сфере высшего образования. Одно из направлений этой политики – создание новой экономики: экономики знаний, лидерства и инноваций. И ключевым звеном здесь становятся высококвалифицированные инженерные кадры, владеющие передовыми мировыми технологиями, способные решать новые комплексные задачи промышленности и готовые вывести российскую экономику на новый уровень развития.

Технологические потребности инновационной экономики знаний требуют инженерно-технических кадров нового поколения, которые владеют широким спектром ключевых компетенций. Понимая это, Политехнический университет ставит перед собой задачу подготовки специалистов с системным и глобальным мышлением; обладающих как специализированными, так и меж-, мульти-, транснациональными знаниями, умениями и навыками; готовых к постоянному обучению и самосовершенствованию.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого – крупнейший технический вуз страны с исторически сложившимися сильнейшими научными школами, имеющий неоспоримые результаты и достижения в научной, образовательной и инновационной деятельности. Основываясь на ключевых мировых тенденциях развития сферы исследований, разработок, технологий и образования, СПбПУ к 2020 году стремится войти в сотню лучших университетов, встав в один ряд с лидерами на мировой образовательной арене. Именно эту задачу ставит масштабная государственная Программа «5-100-2020».

Стратегической целью СПбПУ является модернизация и развитие вуза как глобально конкурентоспособного научно-образовательного центра, интегрирующего мультидисциплинарные научные исследования и технологии мирового уровня и входящего в число ведущих мировых университетов.

Политехнический университет видит свою миссию как в обеспечении собственной конкурентоспособности на внутреннем и внешнем рынках образовательных услуг, так и в том, чтобы стать надежным партнером государства в наращивании экономической мощи и международного влияния России: обеспечить опережающую подготовку кадров нового поколения и технологическую модернизацию системообразующих отраслей промышленности на основе применения мультидисциплинарных знаний и передовых надотраслевых технологий.

Распоряжением Правительства Российской Федерации от 20 мая 2010 года № 812-р в отношении СПбПУ установлена категория «Национальный исследовательский университет», что явилось признанием его роли и возможностей как в области подготовки кадров, так и в области научных исследований и разработок.



КОМПАНИЯ НИКА-ПЕТРОТЭК в настоящее время активно развивается на рынке услуг по интенсификации нефтедобычи, имея в своем составе промышленные площадки по производству современных керамических расклинвателей (пропантов) и химреагентов, а также развитую научно-техническую базу.

Производство химических реагентов.

Технопарк «Камбарка», Удмуртская Республика

На базе технопарка «Камбарка», расположенного в Удмуртской Республике, налажено производство химических реагентов для интенсификации нефтедобычи, нефтепромысла, бурения и транспортировки нефтепродуктов. При производстве химических реагентов компания Ника-Петротэк проводит как внутренний контроль качества на всех этапах производства, так и независимую оценку для получения отраслевых сертификатов и разрешений.

Производство пропанта.

Площадка Семилукского огнеупорного завода, Воронежская область

Сегодня компания Ника-Петротэк владеет производственными мощностями Семилукского огнеупорного завода, на которых осуществляется выпуск пропанта, как основного элемента процесса гидроразрыва пласта. Крепкие традиции огнеупорного производства, а также сотрудничество с Российской Академией Наук, помноженные на модернизированное оборудование обеспечивают необходимую технологическую базу для производства пропанта – современного керамического расклинвателя. Высокотехнологичное оборудование позволяет выпускать широкую линейку пропантов для любых геологических условий интенсификации нефтедобычи, включая месторождения России, Ближнего Востока, Латинской Америки и стран Африки.

Научно-техническое подразделение. Екатеринбург

Для осуществления комплексного сервиса компания Ника-Петротэк имеет в своем составе научно-техническое подразделение, которое занимается сбором и анализом эксплуатационных характеристик фонда скважин для формирования уникального подхода к их работам. Наши специалисты способны разработать и реализовать технологический процесс интенсификации под геологические условия любой сложности. Наша команда регулярно участвует в отраслевых конференциях, включая ведущее международное сообщество инженеров-нефтяников SPE. Мы создали и запатентовали разработки химических систем и методики тестирования, включая оценку качества пропантов. Кроме того, в нашем распоряжении имеется обширная патентная база по всем группам продуктов. Научно-исследовательская деятельность Ника-Петротэк ведется совместно со специалистами Российской Академии Наук, при активном их участии.

620075, Екатеринбург, ул. Толмачева, д. 22 оф.5
тел. +7 (343) 287 49 40; +7 920 222 22 04
nikapetrotech.com

SIBUR

СИБУР является крупнейшей в России интегрированной газоперерабатывающей и нефтехимической компанией. Мы строим сильный, конкурентоспособный на мировом рынке и устойчивый бизнес с уникальными преимуществами и возможностями для обеспечения прибыльного роста.

Группа владеет и управляет самой широкой в России комплексной инфраструктурой по переработке и транспортировке ПНГ и ШФЛУ, расположенной преимущественно в Западной Сибири – крупнейшем российском нефтегазодобывающем регионе. Эта инфраструктура включает в себя восемь из девяти действующих газоперерабатывающих заводов в Западной Сибири, пять компрессорных станций и три газодифракционирующие установки.

В нефтехимическом сегменте СИБУР принадлежит три установки пиролиза, одна установка дегадирования пропана, два завода по производству базовых полимеров, выпускающих полиэтилен и полипропилен, три завода по производству синтетических каучуков, выпускающих базовые и специальные каучуки и термоэластопласты, и 13 предприятий, производящих широкий ассортимент полуфабрикатов, пластиков и продуктов органического синтеза, в том числе полиэтилентерефталат, гликоли, спирты, БОПП-пленки, вспенивающийся полистирол и акрилаты.

СИБУР выпускает продукты на 26 производственных площадках, клиентский портфель Компании включал более 1 400 крупных потребителей в топливно-энергетическом комплексе, автомобилестроении, строительстве, потребительском секторе, химической и других отраслях примерно в 75 странах мира, общая численность сотрудников Группы превышает 27 тыс. человек.

www.sibur.ru



Alfa Aesar®

ALFA AESAR – ведущий поставщик продуктов тонкого органического синтеза для научных исследований. Компания Alfa Aesar – ныне – часть компании Thermo Fisher Scientific – является ведущим производителем и поставщиком химических веществ, металлов и продуктов биохимии, предназначенных для исследований и научных разработок.

Мы предлагаем более 46 000 товаров на складе, в размерах от граммовых количеств каталожных продуктов до сотен килограмм и тоновых количеств. Поскольку мы также имеем возможности наработки более специализированных соединений, вам не потребуется искать дополнительного поставщика пакета требуемых химических соединений, металлов и материалов для научных исследований.

Наша линейка продуктов включает в себя: неорганику, органику, металлоорганические соединения, чистые металлы и элементы, драгоценные соединения металлов и катализаторы, биохимические продукты, топливные элементы, наноматериалы, редкоземельные металлы и соединения, аналитические продукты, некоторое лабораторное оборудование

Наш ассортимент включает в себя более 5000 биохимических продуктов. Это обеспечивает полный выбор для всех ваших потребностей в области исследований.

Наш постоянно растущий ассортимент продукции предназначен для биотехнологических исследований, включающих в себя области геномики, протеомики, иммунологии, клеточной и молекулярной биологии и исследований сосудистой системы.

Alfa Aesar – надежная компания, ориентированная на клиентов. Качество продукции имеет первостепенное значение, но имеющийся опыт в наработке продуктов – это еще не все. Такие факторы, как наличие продукта, упаковки и скорости доставки столь же важны для удовлетворения ваших потребностей. Зачастую это превосходит ваши ожидания. Осуществляемый нами контроль качества гарантирует высокий уровень сервиса и постоянное стремление к усовершенствованию. Мы предоставляем клиентам непревзойденный уровень сервиса, доставляя за один день продукты из каталога, имеющиеся в наличии на складе, а также благодаря дружелюбному и квалифицированному персоналу.

www.reakor.ru



*Милёхин Юрий Михайлович,
генеральный директор, доктор технических наук,
профессор, член-корреспондент РАН, академик
РАРАН, лауреат Государственных премий СССР и РФ,
лауреат премии Правительства РФ*



ФГУП «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЦЕНТР ДВОЙНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ «СОЮЗ» - головное предприятие оборонно-промышленного комплекса страны, специализирующееся на разработке и производстве твердых ракетных топлив, твердотопливных зарядов, корпусов ракетных двигателей из полимерных композиционных материалов, энергетических установок на их основе для ракетных комплексов различного назначения, космических систем, установок на новых физических принципах, а также создании высокоэффективных технологий двойного назначения.

Предприятие основано в октябре 1947 года на базе опытно-исследовательского завода 512, производившего в годы Великой Отечественной войны пороховые заряды для легендарных «Катюш».

ФГУП «ФЦДТ «Союз» создано и внедрено более 90 номенклатур высокоэффективных твердых ракетных топлив, более 1400 прогрессивных технологических процессов, высокопроизводительных аппаратов, оборудования и автоматизированных систем управления для заводов отрасли. На основе разработанных ФГУП ФЦДТ «Союз» технологических процессов и оборудования построено большинство заводов страны по производству твердых ракетных топлив.

ФГУП «ФЦДТ «Союз» разработано и сдано в эксплуатацию свыше 500 номенклатур твердотопливных зарядов ракетных и артиллерийских систем мирового уровня для вооружения всех родов войск и видов Вооруженных Сил.

Продукция предприятия поставляется на российский и мировой рынки.

За достигнутые высокие результаты более 200 сотрудников предприятия удостоены высших премий страны – Ленинской, Государственной, премий Правительства; свыше 1000 сотрудников награждены орденами и медалями. Работниками предприятия получено более 1000 дипломов и медалей отечественных и международных выставок.

**140090, г. Дзержинский Московской области, ул. Академика Жукова, д. 42
+7 (495) 551-72-97, www.fcdt.ru**



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ (ОИЯИ) – международная межправительственная организация, всемирно известный научный центр, являющийся собой уникальный пример успешной интеграции фундаментальных теоретических и экспериментальных исследований с разработкой и применением новейших технологий и университетским образованием. Рейтинг ОИЯИ в мировом научном сообществе очень высок. Членами ОИЯИ сегодня являются 18 государств. На правительственном уровне заключены Соглашения о сотрудничестве Института с шестью странами.

Основные направления теоретических и экспериментальных исследований в ОИЯИ: физика элементарных частиц, ядерная физика и физика конденсированных сред. В составе ОИЯИ семь лабораторий, каждая из которых по масштабам исследований сопоставима с большим академическим институтом. Штат ОИЯИ насчитывает около 4500 человек, из них более 1200 – научные сотрудники, в том числе действительные члены и члены-корреспонденты национальных академий наук, более 260 докторов и 570 кандидатов наук, около 2000 – инженерно-технический персонал.

На долю ОИЯИ приходится более 40 открытий в области ядерной физики. В свете последних достижений Института особого упоминания заслуживает программа исследований сверхтяжелых элементов. Признанием выдающегося вклада, ученых Института в современную физику и химию стало решение Международного союза чистой и прикладной химии о присвоении 105-му элементу Периодической системы элементов Д.И. Менделеева названия дубний и 114-му элементу названия флеровий, в честь Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ и ее основателя академика Г.Н. Флерова. За последние 16 лет учеными Дубны впервые в мире были синтезированы сверхтяжелые элементы с порядковыми номерами 114, 115, 116, 117 и 118. Эти важные открытия увенчали многолетние усилия ученых разных стран по поиску «острова стабильности» сверхтяжелых ядер.

**141980, Московская обл., г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6
+7 (49621) 6-50-59, www.jinr.ru**

INTERTECH Corporation

- инновационное оборудование
- своевременная поставка
- сервисная и методическая поддержка
- обучение пользователей
- демонстрационная лаборатория
- горячая линия 8 800 2004225

Thermo
SCIENTIFIC

**Московское представительство
«ИНТЕРТЕК ТРЕЙДИНГ КОРПОРЕЙШН»**
Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский пр-т., д. 55/1, стр. 2

Тел.: +7 (495) 232-42-25

info@intertech-corp.ru

INTERTECH Corporation более 25 лет поставляет аналитическое оборудование для научных и производственных лабораторий, обеспечивает своевременную поставку, запуск, обучение и поддержку пользователей оборудования.

Поставляемое оборудование производится лидирующими на аналитическом рынке компаниями Thermo Fisher Scientific, TA Instruments и включает новейшие приборы для молекулярного анализа: ИК-Фурье и КР спектрометры и микроскопы, компактные ЯМР спектрометры, УФ-Вид и нано УФ-Вид спектрофотометры; приборы для термического анализа и реологии, дилатометры; приборы для элементного анализа: атомно-абсорбционные спектрометры, ИСП-АЭС и ИСП-МС; приборы для исследования наноструктур: РФЭС, АСМ, профилометры.

*Современное аналитическое оборудование для
исследовательских лабораторий и промышленных
предприятий от ведущих производителей*

www.intertech-corp.ru


SPECTRO TECHNICAL SERVICES более 25 лет специализируется на поставке и техническом обслуживании оборудования для контроля качества продукции и технологий. **Мы предлагаем оборудование для исследования элементного состава материалов от ведущих мировых производителей:**

- SPECTRO Analytical Instruments GmbH, Германия (спектральный анализ

элементного состава материалов – искровые, ИСП, РФА; стационарные, мобильные спектрометры)

- ELTRA GmbH, Германия (анализаторы газообразующих примесей в твердых и жидких материалах)
- SPECTRUMA Analytic GmbH, Германия (спектральный анализ элементного состава покрытий и поверхностей – спектрометры тлеющего разряда)

Также мы предлагаем оборудование для решения следующих задач:

- Определения параметров рабочих масел и жидкостей (SPECTRO Scientific, США)
- Бесконтактного измерения температуры и экологического мониторинга (LAND, Англия)
- Анализа частиц материалов по размерам и форме (SYMPATEC, Германия)
- Автоматизации производственного процесса и подготовки проб перед анализом (FLSmidth, Herzog)
- Лабораторных и промышленных задач, решаемых с помощью печей, термообработки материалов (LINN High Therm, IPSEN).

Наши сервисные центры в Екатеринбурге и Москве имеют все возможности для своевременного комплексного технического обслуживания оборудования, поставляемого на территорию России и в страны СНГ и методической поддержки пользователей. Мы регулярно проводим учебные курсы (на основании лицензии на проведение образовательной деятельности), направленные на повышение квалификации и подготовку кадров заводских лабораторий и производства.

SPECTRO Technical Services - спектр лучших решений для лабораторий и производства - от мобильных до полностью автоматизированных систем!

620062 Екатеринбург, ул. Гагарина, д.14, оф. 616
+7 (343) 365-59-48, 376-25-08
+7 (343) 365-59-48 (факс)
ural@spectro-ts.com



КОМПАНИЯ «НЕОЛАБ» работает на отечественном рынке аналитического и лабораторного оборудования с 1962 г. В нашей производственной программе продукция ведущих мировых производителей: газовые хроматографы, масс-спектральные анализаторы SIFT, спектрометры, CHNS/O-элементные анализаторы, анализаторы азота по методу Дюма, анализаторы Общего Углерода в воде, поляриметры, рефрактометры, плотномеры, оборудование для контроля качества воды, пищевых продуктов и напитков, почвы, кормов, растительного сырья и др., полная гамма приборов для контроля качества нефтепродуктов, исследования зерна и пластовых флюидов, общелабораторное оборудование и лабораторная мебель.

Мы обеспечиваем установку и ввод поставляемого оборудования в эксплуатацию, обучение персонала, гарантийное и послегарантийное обслуживание, методическую поддержку.

119034, Москва,
Еропкинский переулок, д. 16
тел. (495) 648-60-80
факс (495) 646-61-81
www.neolabllc.ru



РЕАТОРГ – быстрорастущая, клиентоориентированная компания, имеющая обширный опыт и компетенции в проектировании химических и фармацевтических предприятий, их оснащении оборудованием европейских и азиатских производителей, сырьем, предлагающая Заказчикам комплексные решения с учетом всех предъявляемых требований и бюджетных ограничений, гарантируя при этом качество и надежность. Постоянная работа компании по расширению ассортимента оборудования, расходных материалов, аксессуаров и сырья призвана защитить инвестиции заказчиков и обеспечить максимальную экономическую эффективность.

Сотрудники компании «РЕАТОРГ» - это высококвалифицированные специалисты, имеющие соответствующее образование и многолетний опыт работы на действующих химических производствах. В 2015 году компания «РЕАТОРГ» получила сертификат соответствия ИСО 9001:2011 (ISO 9001:2008) и Свидетельство СРО.

Москва, Гамсоновский переулок, д.2
+7 (495) 966 3140, 8 (800) 775 3211
www.reatorg.ru

АКЦИОНЕРНОЕ ОБЩЕСТВО «ЕКАТЕРИНБУРГСКИЙ ЗАВОД ПО ОБРАБОТКЕ ЦВЕТНЫХ МЕТАЛЛОВ», входящее в Группу компаний «Ренова», оказывает полный комплекс работ по аффинажу, переработке и изготовлению промышленных изделий из золота, серебра и металлов платиновой группы.

АО «ЕЗ ОЦМ» является старейшим предприятием российской отрасли драгоценных металлов, заложившим основы отечественного аффинажного производства. Екатеринбургский аффинажный завод (исторически первое название предприятия) был запущен в эксплуатацию еще 23 октября 1916 года и первым в России начал изготавливать технические изделия из драгоценных металлов. Эта же дата является датой начала

Среди постоянных партнеров АО «ЕЗ ОЦМ» – 1200 крупных предприятий России и Зарубежья. Номенклатура продукции насчитывает более 300 000 видов изделий из драгоценных металлов и сплавов производственного назначения. Предприятие активно предлагает своим клиентам на российском и зарубежных рынках новые изделия, основанные на современных научно-технических разработках, и удовлетворяющие их постоянно растущим потребностям в качественной продукции.

Гарантия качества нашей продукции это:

- Сертификат TÜV CERT Rheinland соответствия системы менеджмента качества международному стандарту ISO 9001:2008.

- Статус "Good Delivery" ("Надежная поставка") выпускаемых слитков золота и серебра, подтверждается Лондонской ассоциацией участников рынка драгоценных металлов (LBMA) с 1999 года.

- Сертификаты Good Delivery Лондонского рынка платины и палладия (LPPM), подтверждается с 1999 года

Основная продукция:

- Банковские и мерные слитки из золота, серебра и металлов платиновой группы

- Аноды из благородных металлов

- Порошки и химические соединения платиновых металлов

- Сетки катализаторные

- Мишени серебряные

- Тигли промышленные

- Посуда лабораторная из благородных металлов

- Аппараты стеклоплавильные и фильерные питатели

- Мишени из драгоценных металлов

- Прокат

- Проволока, в т.ч. термоэлектродная проволока

- Припои

- Стоматологические изделия



Акционерное общество

Екатеринбургский завод
по обработке цветных металлов

624097, Свердловская обл.,

г. В-Пышма, пр. Успенский, 131

Телефон: (343) 311-46-00, www.ezocm.ru



ООО "ФИЗЛАБПРИБОР" предлагает импортное оборудование и материалы для лабораторий и центров контроля качества, реагенты для анализа и сырье для синтеза субстанций. Мы представляем в России компании YMC, VICI (Valco Instruments), Bio-Lab, TCI, Tosoh, Zellwerk, Reaction Engineering, Peak Biotech.

Наша Компания, ФИЗЛАБПРИБОР, работает с 2006 года на российском рынке, головной офис располагается в Москве.

Наши возможности:

- Техническая поддержка и послепродажный сервис поставленного оборудования проводится с помощью собственной сервисной службы.
- Кроме обычной доставки, осуществляется срочная доставка из Европы – товар доставляется до склада заказчика в течение 1 - 2 недель.
- Для грузов, где требуются специальные условия транспортировки, мы делаем доставку в условиях «холодовой цепи», на условиях от «двери до двери», с предоставлением распечатки температурной кривой.

Помимо поставок оборудования, сырья и расходных материалов, мы также предлагаем:

- консультации и помощь в разработке методов,
- подбор оборудования для экспресс-контроля сырья.
- проведение обучающих семинаров по поставляемой продукции.
- обучение специалистов от наших покупателей на производствах наших партнеров.

www.fizlabpribor.ru



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Уральский государственный медицинский университет**» Министерства здравоохранения Российской Федерации

Ректор - Сергей Михайлович Кутепов, доктор медицинских наук, профессор, Заслуженный врач России.

От медицинского факультета к медицинскому университету. Свердловский государственный медицинский институт основан Постановлением СНК РСФСР от 10 июля 1930 г. На сегодняшний день Уральский государственный медицинский университет (УГМУ) 85 лет успешно работает как мощный и влиятельный в регионе образовательный, научный и методический центр. УГМУ по праву считается ведущим высшим учебным заведением медицинского профиля, занимающим почетное место в десятке лучших медицинских вузов страны, по рейтингу Эксперт РА (2016) входит в Топ-100 лучших университетов России. Кадровый потенциал практического здравоохранения Екатеринбурга, Свердловской области практически полностью сформирован выпускниками УГМУ, весомый вклад внесен в подготовку врачебных кадров для Уральского региона в целом.

Образование через всю жизнь. В настоящее время в УГМУ реализуются образовательные программы специалитета по направлениям - Лечебное дело, Педиатрия, Стоматология, Медико-профилактическое дело, Фармация, Клиническая психология; бакалавриата - Социальная работа, Сестринское дело; магистратуры - Общественное здравоохранение. Сформировалась преемственность образовательных программ подготовки кадров высшей квалификации по специальностям интернатуры (31 специальность), ординатуры (61 специальность), аспирантуры (42 специальности). По 30 специальностям осуществляется профессиональная переподготовка и усовершенствование врачей. В университете ежегодно учатся более 4,5 тысяч студентов, на факультете повышения квалификации - более 5 тысяч врачей.

Ученые УГМУ – здравоохранению Урала. Оглядываясь назад и сберегая традиции, вуз устремлен в будущее, ориентируется на лучшие мировые практики, внедряя инновационные технологии обучения, совершенствуя научный поиск, что позволяет уверенно достигать высокой цели: *«Во благо здоровья уральцев – изучать, исцелять, воспитывать!»*.

г. Екатеринбург, ул. Репина, д.3, (343) 214-86-71, www.usma.ru



ВОЛГОГРАДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ (ВолгГТУ) – ведущий вуз Поволжья, крупный научный центр Юга России, входящий в число лидеров технических вузов страны.

В структуре университета – восемь факультетов очного обучения, три – очно-заочного и заочного обучения, факультет подготовки иностранных специалистов и факультеты довузовской подготовки и послевузовского образования. В состав ВолгГТУ также входят три филиала: Волжский политехнический институт (ВПИ), Камышинский технологический институт (КТИ) и Волжский научно-технический комплекс (ВНТК), наукоемкая продукция которого востребована предприятиями оборонной, атомной, авиационной, металлургической, химической и других отраслей промышленности, отдельные виды которой поставляются за рубеж.



Сегодня Волгоградский государственный технический университет отмечает свое 85-летие и продолжает решать свою главную задачу – подготовку высококвалифицированных инженерных кадров для машиностроения, химической и нефтехимической промышленности, металлообработки, автомобильного хозяйства, оборонной промышленности и других ведущих отраслей экономики страны, внося весомый вклад в дело укрепления ее могущества.

400005, Волгоград, пр. им. Ленина, 28
Тел.: (8442) 23-00-76
www.vstu.ru

**УРАЛМЕХАНОБР**

«УРАЛМЕХАНОБР» – это комплексный научно-исследовательский и проектный институт в области горного дела, обогащения, металлургии, химии и стандартизации, основанный в 1929 г. С 2000 г. ОАО «Уралмеханобр» является частью структуры Уральской горно-металлургической компании ООО «УГМК-Холдинг». Мы объединяем опыт проектирования всех предприятий холдинга.

В сферу деятельности ОАО «Уралмеханобр» входят следующие направления:

- Разработка технологий в области обогащения, горного дела и металлургии;
- Комплексное проектирование строительства и реконструкции обогатительных, горных, металлургических и химических предприятий;
- Выполнение научно-исследовательских работ прикладного характера;
- Аналитический контроль и изучение вещественного состава минерального сырья.
- Комплексные инженеринговые услуги на всех стадиях инвестиционного проекта;
- Адаптация технической документации под требования законодательств РФ, Казахстана, Узбекистана и др. стран-членов СНГ для реализации инвестпроектов на территории данных государств.

Нашими заказчиками являются ведущие системообразующие компании России и зарубежья. ОАО «Уралмеханобр» выполняет работы по проектированию и ведет научно-исследовательскую деятельность для металлургических, горных и обогатительных предприятий 23 субъектов РФ, а также компаний Китая, стран СНГ, Ирана, Австралии, Африки и т.д.

ОАО «Уралмеханобр» в своей деятельности сочетает славные традиции советской инженерной школы и прогрессивные мировые тенденции в области горнодобывающей и химико-металлургической промышленности, что гарантирует качество выполнения поставленных перед нами задач для достижения Ваших целей.

620144, Екатеринбург, ул. Хохрякова, 87
+7 (343) 344-27-42, www.umbrr.ru

**Уральский Банк**
реконструкции и развития

УРАЛЬСКИЙ БАНК РЕКОНСТРУКЦИИ И РАЗВИТИЯ (УБРиР) – один из крупнейших универсальных банков страны, основан в 1990 г. Лидер банковской отрасли Свердловской области, занимает 1 место по активам и средствам частных клиентов среди банков Урала и Западной Сибири и 55 место – в рейтинге надежности банков журнала Forbes. Входит в ТОП-10 среди крупнейших российских банков по приросту вкладов с начала 2015 года.

Сеть банка насчитывает около 1500 точек обслуживания клиентов – собственных отделений, банкоматов и терминалов.

УБРиР имеет аккредитацию государственного Агентства по страхованию вкладов (АСВ) на выплаты вкладчикам банков, в отношении которых произошел страховой случай. В октябре 2015 года банк выбран АСВ в качестве инвестора для финансового оздоровления ВУЗ-банка, в ноябре 2015 года УБРиР приобрел 99,99% акций ВУЗ-банка.

Банк включен в составленный ЦБ РФ список российских банков, где негосударственные пенсионные фонды по закону могут размещать пенсионные накопления, а также в список 52 российских банков, в которых по закону могут обслуживаться счета жилищно-коммунальных хозяйств.

УБРиР – социально-ответственный банк, входит в ТОП-15 российских банков по расходам на благотворительность, он занимает 12 место по соотношению благотворительных затрат и прибыли (исследование журнала «Банковское обозрение» по итогам 2014 года). В 2008 году УБРиР при участии корпоративных клиентов начал реализацию благотворительного проекта «Дети верят в чудо», помогая детям с ограниченными возможностями. С каждого комиссионного сбора за отправленное платежное поручение банк перечисляет на реализацию благотворительной программы 1 рубль. В 2014 году УБРиР также запустил проекты по социальной адаптации ребят в детских домах в разных городах России – «Попугай» (психологические занятия по развитию уверенности в себе) и «Кто я, или Проверено на себе» (обучающая программа, направленная на получение знаний о профессиях). Сегодня УБРиР поддерживает 42 детских учреждения в 27 городах России.

www.ubrr.ru

ДИАМ

современная лаборатория

КОМПАНИЯ ДИАМ с 1988 года поставляет оборудование, расходные материалы и реактивы российских и зарубежных производителей для нужд химических, биологических, медицинских, пищевых лабораторий, фармацевтических и биотехнологических предприятий.

Ассортимент продукции Диаэм - самый широкий на российском рынке – более ста тысяч наименований:

- **Общелабораторное оборудование:** центрифуги, морозильники, холодильники, термостаты, гомогенизаторы, мешалки, весы, дозаторы, вытяжные, ламинарные шкафы, микроскопы, системы очистки воды, насосы и пр.
- **Аналитическое оборудование:** спектрофотометры, анализаторы влажности, рефрактометры, плотнометры, автоматические титраторы, хроматографы, кондуктометры, pH-метры и пр.
- **Биотехнологическое оборудование:** биореакторы, шейкеры-инкубаторы, термостаты и пр.
- **Оборудование для работы с ДНК, РНК:** ДНК-амплификторы, секвенаторы, электрофорез, электропораторы, генные пушки, станции дозирования и выделения ДНК и пр.
- **Клеточная инженерия:** микроманипуляторы, микродиссекторы, микроинъекторы и пр.
- **Оборудование для ИФА:** анализаторы, промыватели, шейкеры для планшет
- **Криозамораживание:** криозамораживатели программируемые, криохранилища, сосуды Дьюара и пр.
- **Органический синтез:** роторные испарители, реакторы химические и пр.
- **Испытательное оборудование:** печи, климатические, испытательные камеры и пр.
- **Пластик:** пробирки, контейнеры, пипетки, планшеты, чашки Петри, наконечники для пипеток, штативы, пластик для ИФА, ПЦР и пр.
- **Стекло:** пробирки, колбы, пипетки и пр.
- **Принадлежности:** для микроскопии, микробиологии, инструменты из нерж. стали, промывалки, штативы, термосумки и пр.
- **Реактивы:** красители, индикаторы, стандарт-титры, среды, соли, ферменты и пр.

www.dia-m.ru

Reaxys®

REAXYS – кратчайший путь от постановки вопроса в области химии до получения ответа.

Reaxys является уникальным информационным онлайн-ресурсом, помогающим исследователям, преподавателям, студентам и специалистам в области информации находить и использовать информацию о химии и ее применении в других науках. База данных Reaxys содержит данные о структуре химических соединений, их свойствах и реакциях, а также включает информацию о методах проведения эксперимента и охватывает широкий спектр литературы в области химии.

Reaxys входит в портфолио издательства Elsevier – ведущего мирового поставщика научных, технических и медицинских информационных продуктов и услуг. Компания сотрудничает с глобальным научным сообществом, публикует более 2500 журналов и более 30000 книжных наименований. Онлайн-решения Elsevier также включают ScienceDirect, Scopus, SciVal, Reaxys Medicinal Chemistry, Mendeley, PharmaPendium, Embase, Knovel, которые позволяют повысить продуктивность деятельности специалистов в сфере науки, образования и различных отраслях промышленности.

www.elsevierscience.ru



ФГБУН ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИХТТ Уро РАН) - один из ведущих научных центров фундаментальных и прикладных исследований в области физикохимии твердого тела и материаловедения. Институт (первоначально - Химический институт АН СССР) был организован в г. Свердловске (Екатеринбурге) в 1932 г. Институт внёс большой вклад в развитие Уральского региона исследованиями по комплексному использованию первичных и генераторных смол, углей и нефти, разработке методов извлечения редких металлов, соз-

данию физико-химических основ металлургических процессов. В 50-х годах на его базе были созданы Институт металлургии и Институт электрохимии УФАИ СССР. В 1991 г. в связи с изменением научных направлений и выделением в самостоятельное подразделение лабораторий органического профиля, Институт был реорганизован в Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской Академии Наук.

Основное направление научных исследований ИХТТ Уро РАН - направленный синтез твердофазных соединений и сплавов в различных структурных состояниях, исследование их физико-химических свойств с целью разработки перспективных материалов, совершенствования и создания новых технологий, в том числе по переработке отходов промышленных производств и охране окружающей среды. При Институте работает Специализированный учёный совет по защита докторских и кандидатских диссертаций по неорганической и физической химии. Институт принимает активное участие в выполнении проектов и программ национальных и международных научных фондов, таких, как Российский научный фонд, Российский фонд фундаментальных исследований, Международный научный фонд (INTAS) и др. Специалисты Института постоянно участвуют в международных конференциях и симпозиумах. Институт установил долговременные контакты с научными центрами и учёными США, Франции, Германии, Швеции, Испании, Польши, Чехии для выполнения совместных проектов. Наиболее значимые результаты фундаментальных и прикладных исследований получены в следующих областях: физикохимия оксидных соединений, в том числе, высокотемпературных сверхпроводников; тугоплавкие износостойкие соединения и материалы на их основе; легкоплавкие быстротвердеющие и энергоёмкие сплавы; комплексная переработка техногенного и минерального сырья с получением на его основе новых материалов; квантовая химия и спектроскопия твердого тела.

www.ihim.uran.ru



ЛАБЦЕНТР

ЗАО "ЛАБЦЕНТР" – российская компания, осуществляет свою деятельность с 2004 года. Специализируется на комплексном оснащении лабораторий широким спектром оборудования - от общелaborаторного, стандартного назначения до подбора высокоточных аналитических приборов экспертного характера под проект заказчика.

Приоритетные направления:

- Аналитические приборы (элементный анализ, хроматография, хромато-масс-спектрометрия, спектрометрия УФ-Видимого диапазона, ИК-Фурье, Raman и КР спектрометрия);
- Микроволновые системы синтеза и проборазложения Milestone;
- Рентгеновские спектрометры и дифрактометры Rigaku;
- Электронные сканирующие и просвечивающие микроскопы;
- Оборудование Metrohm для ионного анализа (титраторы, ионные хроматографы, вольтамперметры);
- Биотехнологическое оборудование;
- Оборудование и приборы для проведения физико-механических испытаний;
- Оборудование для материаловедения: оптическая микроскопия и пробоподготовка;
- Лабораторная мебель, общелaborаторное оборудование;

Компания напрямую сотрудничает только с ведущими мировыми производителями лабораторного оборудования, занимающими лидирующее положение в своих сегментах рынка: Rigaku, Agilent Technologies, Tescan, Milestone, Hitachi, Merck Millipore, Metrohm и др.

620144, Екатеринбург, ул. Куйбышева, 55 оф. 501, Телефон: +7 (343) 359-29-70, www.labcenter.ru



ПАО «ОТИСИФАРМ» – компания, образовавшаяся в результате выделения брендируемого безрецептурного бизнеса из крупнейшей российской фармацевтической компании ПАО «Фармстандарт».

Под управлением ПАО «Отисифарм» находится портфель самых популярных безрецептурных препаратов отечественного производства, таких как Арбидол®, Афобазол®, Амиксин®, Пенталгин®, Флюкостат®, Компливит® и др.

ПАО «Отисифарм» занимается продвижением и продажей безрецептурных лекарственных препаратов и биологически-активных добавок. Основное внимание компания уделяет совершенствованию качества препаратов и стратегическому развитию своих брендов.

На текущий момент продуктовый портфель компании Отисифарм состоит из 67 препаратов, которые представлены в наиболее значимых терапевтических категориях коммерческого сегмента фармацевтического рынка России.

Производство продукции компании осуществляется на промышленных площадках по производству лекарственных средств ПАО «Фармстандарт», где внедрена, функционирует и постоянно совершенствуется система управления качеством: ПАО «Фармстандарт-Лексредства», ПАО «Фармстандарт-Томскхимфарм», ПАО «Фармстандарт-УфаВИТА» и ЗАО «ЛЕККО».

На всех предприятиях ПАО «Фармстандарт», где производятся лекарственные средства компании ПАО «Отисифарм» внедрена, функционирует и постоянно совершенствуется система управления качеством. Действующая система управления качеством разработана и внедрена строго в соответствии с требованиями Директивы 2003/94/ЕС, национальных стандартов РФ ГОСТ Р 52249-2009 (GMP) «Правила производства и контроля качества лекарственных средств» и ГОСТ Р ИСО 9001-2008 (ISO 9001:2008) «Системы менеджмента качества»

www.otcpharm.ru

NETZSCH

Если Вам необходим термический анализ, адиабатическая реакционная калориметрия или определение теплофизических свойств – обращайтесь в NETZSCH. Более 50 лет опыта в прикладных исследованиях, современная линейка приборов и широкий спектр предлагаемых услуг гарантируют, что наши технические решения не только смогут соответствовать всем Вашим потребностям, но и превзойдут Ваши ожидания.

Отделение Analyzing & Testing группы компаний NETZSCH разрабатывает и производит высокоточные современные приборы для термического анализа и измерения теплофизических характеристик, а также предлагает проведение квалифицированных измерений в наших лабораториях. Наши приборы широко используются как в производстве, так и для проведения научных исследований. Основными областями применения являются: наноматериалы, керамические, полимерные, композиционные, фармацевтические материалы, а также металлы, огнеупоры различные виды топлива.

Лидерство в области инновационных технологий и бескомпромиссные стандарты качества делают нас одной из ведущих мировых компаний в сфере термического анализа. Последовательно соединяя новые уникальные разработки, тесно сотрудничая с пользователями и учитывая их потребности, мы разрабатываем новые приборы.

Фирма NETZSCH - это высший уровень технической компетенции. Первоклассное программное обеспечение, высоко ценится экспертами, особенно в области расчетов (таких как расчет кинетики реакции и многокомпонентный анализ), подтверждает высокую степень технической грамотности и гарантирует превосходство наших продуктов и услуг.

117198, г. Москва, Ленинский пр., д. 113/1, оф. 413Д

Тел.: +7 (499) 272-0532; Моб.: (985) 760-35-57

www.netzsch-thermal-analysis.com/ru/home/



НЕКОММЕРЧЕСКОЕ ПАРТНЕРСТВО «УРАЛЬСКИЙ БИОМЕДИЦИНСКИЙ КЛАСТЕР» - объединение предприятий, научно-исследовательских организаций и компаний в области здравоохранения. Партнерство было создано в 2010 году, объединив более 30 участников.

Сферы деятельности:

1. Производство фармацевтической продукции, медицинской техники, изделий медицинского назначения, дезинфицирующих средств и упаковки для фармацевтики.
2. Научно-исследовательская деятельность (разработка оригинальных молекул для лекарств, масштабирование технологий получения препаратов, разработка биотехнологических и химических субстанций).
3. Менеджмент проектов в медицине и фармацевтики.
4. Дистрибуция лекарств. Сервисное обслуживание медицинской техники.
5. Подготовка квалифицированных кадров для здравоохранения и фармацевтической промышленности.

Стратегическая цель Партнерства - улучшение качества жизни российских пациентов.

www.urbiomed.ru



ЗАВОД МЕДСИНТЕЗ

ЗАВОД МЕДСИНТЕЗ - единый комплекс по производству субстанций, жидких и твердых лекарственных форм препаратов, соответствующих российским и европейским требованиям GMP. Завод работает в соответствии с Системой менеджмента качества по версии MC ISO 9001:2000.

Завод Медсинтез производит инфузионные растворы, готовые лекарственные формы генно-инженерного инсулина человека «Росинсулин»®, противовирусный препарат «Триазавирин»® (препарат на основе оригинальной молекулы, разработанной российскими учеными).

В рамках соглашения о стратегическом партнерстве с международным химико-фармацевтическим концерном Bayer на площадке завода Медсинтез производится антибиотик «Авелокс».

Завод Медсинтез реализует полный цикл производства генно-инженерного инсулина. «Росинсулин»® выпускается во флаконах, картриджах, одноразовых предварительно заполненных и много-разовых шприц-ручках. На предприятии создается инсулиновая помпа.

Препарат «Триазавирин» разработан российскими учеными на основе оригинальной молекулы. Обладает широким спектром прямой противовирусной активности в отношении более 15 видов вирусов, включая вирус гриппа, в том числе птичий и свиной. Эффективен для лечения и профилактики вирусных заболеваний, в том числе гриппа любой этиологии.

www.medsintez.com



ВЕДУЩИЙ ХИМИКО-ФАРМАЦЕВТИЧЕСКИЙ ХОЛДИНГ РОССИИ - крупнейшая компания, предоставляющая весь комплекс услуг по созданию и оснащению фармацевтических, химических, пищевых, биотехнологических производств, объектов химического синтеза, электронной и нефтехимических предприятий, различных лабораторных комплексов от greenfield project до выпуска первой таблетки, ампулы или продукции животного происхождения. В активе компании колоссальный опыт по организации «под ключ» аналитических и исследовательских лабораторий, полного цикла производства готовых лекарственных форм, промышленного производства фармацевтических субстанций, производства биологически активных веществ и биопродуктов, а также создание вивариев и радиофармпроизводств.

Консолидация проектировочных, строительных и инженерных решений с интеграцией единиц оборудования различных производителей в единую технологическую линию в структуре одного исполнителя обеспечивает заказчику уверенность в успешном вводе объекта в эксплуатацию.

В рамках системы «одного окна», сотрудничая с одним исполнителем, наши клиенты получают:

- комплексное проектирование, строительство объекта, монтаж конструкций комплексов чистых помещений собственного производства, инженерных систем
- проектирование, создание и оснащение технологических линий для разработок и производства лекарственных форм
- подбор и поставку оборудования для пилотного производства и контроля качества субстанций, лекарственных форм, определения биологической безопасности и контроля качества пищевых продуктов от международных и отечественных производителей
- разработку и генерирование современных технологий для производства, опытно-конструкторские и опытно-технологические работы по масштабированию химических технологий от лабораторного до промышленного уровней
- инсталляция и запуск, квалификация и сервисное обслуживание, подбор расходных материалов.

phct-group.com



ХОЛДИНГ УРАЛХИМПЛАСТ – один из крупнейших российских производителей синтетических смол для различных отраслей промышленности – специализируется на выпуске смол для теплоизоляционной, деревообрабатывающей, литейной, нефтяной, дорожной индустрии. На многих рынках занимает доминирующее положение.

Номенклатура и ассортимент продукции, выпускаемой Уралхимпластом, насчитывают более 100 позиций. Высокий технический уровень производства и качество большей части продукции компании подтверждены сертификатом TÜV и аттестованы по системе ISO 9001:2008.

Свердловская обл.
г. Нижний Тагил
Северное шоссе, 21
+7 /3435/ 34-62-01
+7 /3435/ 34-69-85
usr.ru

ЛАБТЕСТ**LABTEST**

Компания ООО «НКЦ «ЛАБТЕСТ» воплощает в себе более чем 30-ти летний опыт работы в области спектрального аналитического и научного оборудования, применяемого для анализа состава и свойств материалов.

В число наших пользователей входят сотни научных и контролирующих организаций, промышленных предприятий, работающих в таких областях, как металлургия, добыча и обогащение ископаемых, цемент, нефтехимия, агрохимия, геология, стекло, керамика, полимеры, наноматериалы, авиационные материалы, микроэлектроника, ядерные материалы, энергетика, транспорт, фармацевтика, экология, пищевая промышленность, криминалистика, и многое другое.

Мы поставляем оборудование, комплектующие и материалы, предлагаем решения и осуществляем инжиниринг в таких областях исследований и контроля, как: элементный, молекулярный и изотопный анализ; определение удельной поверхности, распределения размеров пор, размера и молекулярной массы частиц; определение магнитных свойств металлов, разработка новых композиционных материалов, определение реологических свойств, проведение биохимических исследований.

Важнейшим фактором работоспособности лаборатории является оперативная и квалифицированная техническая и методическая поддержка со стороны поставщика, возможность поставки со склада запасных частей, комплектующих и материалов. В данном направлении мы ведём напряжённую работу – совершенствуем логистику, обучаем специалистов, внедряем системы контроля.

Для оценки возможностей поставляемого оборудования мы проводим его демонстрацию в нашей лаборатории.

Важнейшим фактором успеха компании является ценовая политика, основными принципами которой является справедливость и прозрачность. Независимо от различных логистических потерь, наша цена остаётся неизменной и соответствует официальной цене в стране производителя оборудования.

В качестве основного капитала в «НКЦ «ЛАБТЕСТ» рассматривается репутация и профессионализм.

123557, г. Москва, Большой Тишинский пер., д. 38
+7 (495) 605-35-07, 605-36-10

MERCK**SIGMA-ALDRICH®****MERCK MILLIPORE И SIGMA ALDRICH ТЕПЕРЬ ОДНА КОМАНДА –
LIFE SCIENCE ПОДРАЗДЕЛЕНИЕ MERCK**

Life Science подразделение компании Merck объединило в себе продукты и услуги мирового класса, инновационные возможности и исключительный талант компаний Merck Millipore и Sigma-Aldrich, став одним из глобальных лидеров в направлении

Life Science.

Объединение основано на взаимном дополнении сильных сторон компаний и позволит нам отвечать Вашим потребностям еще лучше. Теперь в нашем портфеле более 300,000 продуктов. Merck является поставщиком многих известных брендов в данной области, таких как Millipore, Milli-Q®, SAFC и BioReliance®. Предлагаемые нами комплексные решения охватывают каждый этап биотехнологического процесса – от исследовательских центров до практических биотехнологических производств и подразделений контроля качества.

Наша широкая линейка инновационных продуктов и технологических решений, сбалансированная география и значительные производственные и исследовательские возможности, позволяют нам превосходить и удовлетворять потребности клиентов, так как все, что мы делаем, начинается с нашей общей цели – решать самые серьезные проблемы в жизни и науке в сотрудничестве с глобальным научным сообществом.

Merck Millipore + Sigma-Aldrich = Merck's life science business

merckgroup.com
sigmaaldrich.com

Уральское отделение Российской академии наук
XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии
Тезисы докладов в 5 томах
(Доклады представлены в авторской редакции)
Т. 5 : тез. докл. – Екатеринбург:
Уральское отделение Российской академии наук, 2016 г. – 272 с.
Т. 5. Химическое образование
International Symposium “From empirical to predictive chemistry”
International Symposium “Self-assembly and supramolecular organization”
Франция-Россия – 50 лет научно-технического сотрудничества
в области химии и материалов

Под редакцией О.А. Кузнецовой
Ответственный за выпуск: Ю.Г. Горбунова
Дизайн, верстка Е.В. Шестакова, Е.В. Останина

Подписано в печать 05.09.2016
Формат 70х100 1/16. Бумага ВХИ 80г/м2
Печать офсетная. Усл.печ.л. ____
Тираж 250 шт.

ООО «ДжиЛайм», Екатеринбург
Тел.: +7(343)362-42-28
www.glime.ru

ISBN 978-5-7691-2458-7

