

CONFERENCE CLUSTER
SOLVATION
CRYSTALLIZATION
SMART MATERIALS
2018

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018



XIII Международная
научная конференция
«Проблемы сольватации
и комплексообразования
в растворах»



X Международная
научная конференция
«Кинетика и механизм
кристаллизации.
Кристаллизация и материалы
нового поколения»



Международный симпозиум
«Умные материалы»

Летняя школа-конференция
молодых ученых
«Моделирование умных материалов»

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

1-6 июля 2018 г.
Суздаль, Россия

**Федеральное агентство научных организаций
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Российская академия наук
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ивановский государственный химико-технологический университет**

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018:

**XIII Международная научная конференция
«Проблемы сольватации и комплексообразования в
растворах»**

**X Международная научная конференция
«Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация и материалы нового поколения»**

Международный симпозиум «Умные материалы»

1 – 6 июля 2018 г.

г. Суздаль, Россия

В настоящей работе представлен подход к синтезу корролов ABC- и A₂B-типа, которые в своей структуре содержат как гидрофобные, так и гидрофильные (монокатионные) фрагменты ароматической и алифатической природы (рис.). Данные соединения были очищены и идентифицированы с помощью методов 1D- (¹H, ¹³C) и 2D-(HSQC, HMBC, COSY) ЯМР-спектроскопии, а также масс-спектрометрии (МАЛДИ). Для оценки гидро-/липофильных свойств полученных соединений были определены коэффициенты межфазового распределения в системе «1-октанол-вода» в температурном диапазоне 298-318 К. Степень перехода из октанола в водную фазу возрастает в ряду корролов: (1) < (2) < (3).

1. Корролы и их производные: Синтез, свойства, перспективы практического применения//Березин Д.Б., Каримов Д.Р., Кустов А.В./Под ред. О.И. Койфмана. – М.: ЛЕНАНД, 2018. – 304 с.
2. Smith D.A., van de Waterbeemd H., Walker D.K., Mannhold R., Kubinyi H., Timmerman H. Pharmacokinetics and Metabolism in Drug Design / Wiley-VCH Verlag GmbH, 2001. - 155 p.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ МЕФЕНАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ В РАСТВОРЕ МЕТОДАМИ ¹³C ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Белов К.В.¹, Ходов И.А.^{2,3}, Киселев М.Г.², Батиста де Карвальо Л.А.Е.⁴

¹ Ивановский государственный университет, биолого-химический факультет, г. Иваново

² Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново

³ Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань

⁴ Университет г. Коимбра (Португалия)

iakh@isc-ras.ru

Одним из типичных представителей группы нестероидных противовоспалительных средств является мефенаминовая кислота (2-[(2,3-диметилфенил) амино] бензойная кислота). Является производной N-фенилантралиновой кислоты и используется в качестве препарата с жаропонижающим и противовоспалительным действием. Данное соединение используется при лечении болевых синдромов, отеков, воспалений, лихорадочных состояний и т.д. В настоящее время известны два полиморфа мефенаминовой кислоты MEF I и MEF II. Более устойчивой формой является MEF I впервые полученная Макконнеллом и др. Метастабильная структура MEF II была открыта в 2006 году Ли и др. В обоих полиморфах, молекулы мефенаминовой кислоты образуют кристаллические формы за счет водородных связей между карбоксильными группами, находясь в различных конформациях. Поэтому, целью настоящей работы является выявление наиболее вероятных конформеров.

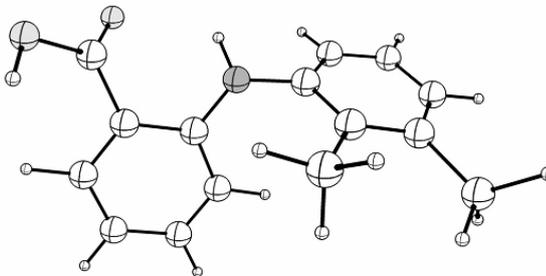


Рисунок 1. Химическая структура молекулы 2-[(2,3-диметилфенил) амино] бензойной кислоты

В данной работе для достижения поставленной задачи был применен комплексный метод ядерного магнитного резонанса и компьютерного моделирования. Ранее, в наших работах не раз затрагивалась тема важности определения доминирующих конформеров биологически активных молекул в растворах органических соединений. Основываясь на методе квантово-химических расчетов GIAO (gauge-independent /gauge – included atomic orbital) и экспериментальных методов гомо (TOCSY) и гетероядерной (2D HMBC, 2D HSQC) ЯМР спектроскопии были проведены расчеты констант химических сдвигов в одномерных спектрах ¹³C. Для определения наиболее вероятной конформации молекулы мефенаминовой кислоты в ДМСО были построены соответствующие корреляции расчетных и экспериментальных величин химических сдвигов ЯМР ¹³C.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 и в рамках государственного задания номер государственной регистрации: 01201260481.