

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Российский фонд фундаментальных исследований  
Сибирское отделение Российской академии наук  
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
Алтайский государственный университет  
Институт катализа СО РАН  
Институт общей и неорганической химии РАН  
Институт химии растворов РАН  
ЗАО «АЛТАЙВИТАМИНЫ»  
АО «Федеральный научно-производственный центр «Алтай»  
ЗАО «ШАГ»  
Журнал «Сверхкритические флюиды: теория и практика»

## **ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

### **IX ВСЕРОССИЙСКОЙ ШКОЛЫ- КОНФЕРЕНЦИИ МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ «СВЕРХКРИТИЧЕСКИЕ ФЛЮИДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ»**

24–28 сентября 2018 г.



*В рамках II-го Международного  
биотехнологического симпозиума  
«Bio-Asia – 2018»*

г. Барнаул

# ЯДЕРНЫЙ ЭФФЕКТ ОВЕРХАУЗЕРА В СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ФЛЮИДАХ

Белов К.В.<sup>1</sup>, Ходов И.А.<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> *Ивановский государственный университет, биолого-химический факультет,  
г. Иваново, Россия*

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

<sup>3</sup> *Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия*

[konstantinbelov31@gmail.com](mailto:konstantinbelov31@gmail.com)

Свойства лекарственных соединений в сверхкритических флюидах, представляют особый интерес в физико-химическом сообществе. Сверхкритическое состояние вещества находит свое применение во многих отраслях химической промышленности (сверхкритическая флюидная экстракция, сверхкритическая флюидная хроматография), однако самой прогрессивной областью является применение в качестве благоприятной среды для проведения реакций. Благодаря уникальной способности сверхкритической жидкости растворять в себе большие объемы газов, становится возможным её использование в качестве чрезвычайно эффективного и практичного растворителя. В связи с этим, необходимо уметь точно и однозначно определять химическую структуру лекарственных соединений в сверхкритических флюидах. Полученная информация, безусловно, поможет пролить свет на особенности применения сверхкритических флюидов в химической промышленности. Объектом исследования было выбрано модельное соединение (RS) -2- (4- (2-метилпропил) фенил) пропановой кислоты (ибупрофен), лекарственный препарат нестероидного происхождения, обладающий болеутоляющим и жаропонижающим действием.

В данной работе для достижения поставленных целей, был применен комплексный подход, включающий в себя различные методы ядерного магнитного резонанса ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , HMBSC, HSQC, TOCSY). Однако основным инструментом для определения химической структуры ибупрофена в сверхкритическом диоксиде углерода, стала спектроскопия NOESY (ядерная спектроскопия с эффектом Оверхаузера).

Таким образом, в представленной работе были изучены и установлены особенности применения ЯМР спектроскопии. В частности двумерной спектроскопии NOESY, как метода изучения химической структуры

лекарственных соединений на примере (RS) -2- (4- (2-метилпропил) фенил) пропановой кислоты в сверхкритическом диоксиде углерод. Были получены одно и двумерные спектры, выявлены соответствующие корреляции, и установлена однозначная структура исследуемого объекта.

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.

[1] Khodov, I. A. The importance of suppressing spin diffusion effects in the accurate determination of the spatial structure of a flexible molecule by nuclear Overhauser effect spectroscopy / Efimov, S. V., Klochkov, V. V., Batista De Carvalho, L. A. E., Kiselev, M. G. // Journal of Molecular Structure, 2016, 1106, pp.373-381.

[2] Efimov, S.V. Detailed NOESY/T-ROESY analysis as an effective method for eliminating spin diffusion from 2D NOE spectra of small flexible molecules / Khodov, I.A. Ratkova, E.L. Kiselev, M.G. Berger, S. Klochkov, V.V. // Journal of Molecular Structure, 2016, 1104, pp.63-69.