



VIII МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ИОХ РАН,

посвященная 85-летию со дня основания ИОХ РАН, 22–23 мая 2019 г.



сборник тезисов докладов

Институт органической химии имени Н. Д. Зелинского РАН



VIII МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ИОХ РАН

Сборник тезисов докладов

22–23 мая 2019 года

Москва



МОСКВА – 2019

Труды конференции подготовлены коллективом
Совета молодых ученых ИОХ РАН в составе:

*О. В. Битюкова, В. А. Виль, М. Н. Жаркова, А. Н. Измestьева,
Е. А. Князевой, В. Б. Крылова, А. С. Максименко,
Е. А. Сильяновой, В. В. Парахина, Л. Л. Ферштата, И. А. Ярёмченко*

VIII Молодежная конференция ИОХ РАН: сборник тезисов докладов : 22–23 мая
2019 г., Москва . – Москва : МАКС Пресс, 2019. – 184 с.

ISBN 978-5-317-06145-6

e-ISBN 978-5-317-06146-3

В настоящем сборнике представлены тезисы пленарных, устных, смешанных и стендовых докладов участников VIII Молодежной конференция ИОХ РАН. Тематика работ охватывает актуальные вопросы органического синтеза, изучения механизмов реакций, химии природных соединений, катализа, физико-химических методов анализа и теоретические исследования.

Сборник представляет интерес для научных работников, преподавателей, аспирантов и студентов химических вузов.

УДК 54
ББК 24

VIIIth Youth Conference of the Institute of Organic Chemistry (IOC) of the Russian Academy of Sciences : Book of Abstracts : May 22nd–23rd 2019, Moscow. – Moscow : MAKS Press, 2019. – 184 p.

ISBN 978-5-317-06145-6

e-ISBN 978-5-317-06146-3

This book contains proceedings of plenary, oral and poster presentations of participants of the VIII Youth conference ZIOC RAS. The scope of work covers topical issues of organic synthesis, study of reaction mechanisms, chemistry of natural compounds, catalysis, physical-chemical methods of analysis and theoretical investigations.

The book could be useful for researchers, teachers, postgraduates and students.

*Электронная версия сборника тезисов конференции доступна на веб-сайте:
<http://zioc.ru/events/conferences/2019/molconf>*

*Electronic version of the book of conference abstracts is available on the web-site:
<http://zioc.ru/events/conferences/2019/molconf>*

VIII МОЛОДЕЖНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

ИОХ РАН

22-23 мая 2019 г. Москва

Научный комитет

Егоров М.П.	<i>академик</i>	Никишин Г.И.	<i>член-корр. РАН</i>
Анаников В.П.	<i>член-корр. РАН</i>	Нифантьев Н.Э.	<i>член-корр. РАН</i>
Бубнов Ю.Н.	<i>академик</i>	Стахеев А.Ю.	<i>д.х.н., профессор</i>
Верещагин А.Н.	<i>д.х.н.</i>	Тартаковский В.А.	<i>академик</i>
Дильман А.Д.	<i>д.х.н., профессор РАН</i>	Терентьев А.О.	<i>член-корр. РАН</i>
Злотин С.Г.	<i>д.х.н., профессор</i>		

Организационный комитет

Председатель:

Егоров М.П. *академик, директор ИОХ РАН*

Заместитель председателя:

Ярёменко И.А. *к.х.н.*

Члены оргкомитета:

Битюков О.В.	<i>асп.</i>	Крылов В.Б.	<i>к.х.н.</i>
Виль В.А.	<i>к.х.н.</i>	Максименко А.С.	<i>асп.</i>
Жарков М.Н.	<i>к.х.н.</i>	Сильянова Е.А.	<i>асп.</i>
Изместьев А.Н.	<i>к.х.н.</i>	Парахин В.В.	<i>к.х.н.</i>
Князева Е.А.	<i>к.х.н.</i>	Ферштат Л.Л.	<i>к.х.н.</i>

При поддержке:



Совет молодых
ученых ИОХ РАН



**ОСОБЕННОСТИ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ 2-[(2,3-
ДИМЕТИЛФЕНИЛ) АМИНО] БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ):
ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ И
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ.**

К.В. Белов¹, И.А. Ходов^{1,2}, С.В. Ефимов², В.В. Клочков²

¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук*

153045, г. Иваново, ул. Академическая, д. 1. E-mail: kvb@isc-ras.ru

²*Казанский (Приволжский) Федеральный Университет*

420008, Казань, ул. Кремлевская, 18.

2-[(2,3-диметилфенил) амино] бензойная кислота, известная под коммерческим названием как мефенаминовая кислота, является популярным противовоспалительным средством. Исследование такого рода соединений на молекулярном уровне позволит наметить пути их модификации для совершенствования их фармакологического действия. Известно, что различных полиморфные формы одного и того же лекарственного препарата могут обладать разной биодоступностью. На сегодняшний день известно две полиморфные модификации 2-[(2,3-диметилфенил) амино] бензойной кислоты, MEF I и MEF II. В обоих полиморфах, молекулы мефенамовой кислоты способны к образованию кристаллических форм, за счет возникновения и разрыва внутримолекулярных водородных связей между карбоксильными группами, находясь в различных конформационных состояниях. Целью данной работы является выявление наиболее предпочтительных конформаций для обоих полиморфов мефенамовой кислоты.

В ходе работы были рассчитаны низкоэнергетические конформеры и тензоры экранирования атомов углерода для определения величин химических сдвигов ^{13}C различных конформеров исследуемой кислоты. Методами современной гомо- (2D TOCSY) и гетероядерной (2D HMBС, 2D HSQC) спектроскопии ЯМР было проведено отнесение сигналов спектра ^{13}C ЯМР к соответствующим протонам молекулы. Для определения преобладающей конформации молекулы были построены соответствующие корреляционные зависимости расчетных и экспериментальных значений химических сдвигов ^{13}C . Исходя из значения среднеквадратичного отклонения был сделан предположительный вывод о преобладающей конформационной структуре.

Работа выполнена при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), и в рамках государственного задания номер государственной регистрации: 01201260481.