

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ



**XXII ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

Нижний Новгород
23-25 апреля 2019 г.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

**XXII ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЁНЫХ-ХИМИКОВ
(С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ)**

Нижегород, 23-25 апреля 2019 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Нижегород
Издательство Нижегородского государственного университета
2019

УДК 54
ББК 24
Д 22

XXII Всероссийская конференция молодых учёных-химиков (с международным участием) (Нижний Новгород, 23–25 апреля 2019 г.): тезисы докладов. Нижний Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2019. - 577 с.

ISBN 978-5-91326-506-7

В сборник включены тезисы докладов XXII Всероссийской конференции молодых учёных-химиков (с международным участием). В ежегодных **конференциях**, проходящих в Университете Лобачевского, участвуют молодые ученые, аспиранты, студенты и школьники. Эти конференции способствуют активизации научно-исследовательской деятельности молодых ученых и специалистов, расширению их научного кругозора и связей между различными научными направлениями, обмену актуальной информацией, выявлению инновационного потенциала молодежи, расширению связей между наукой и производством.

ISBN 978-5-91326-506-7

УДК 54
ББК 24

Электронная версия сборника тезисов докладов на сайте:
<http://www.youngchem-conf.unn.ru/>

Определение пространственной структуры молекулы мефенаминовой кислоты в растворе ДМСО методом 2D NOESY

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

¹ *Ивановский государственный университет, Иваново, Россия*

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

³ *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*

⁴ *Коимбрский университет, Коимбра, Португалия*

E-mail: konstantinbelov31@gmail.com

В современной фармацевтической химии и фармакологической промышленности особую роль играет кристаллическая форма исследуемых соединений, которая определяет их физико-химические и биологические характеристики. Для понимания механизмов формирования кристаллов различной полиморфной формы необходимо исследовать возможные факторы на них влияющие. Мы выбрали для исследования особый вид полиморфизма, который не редко встречается для лекарственных соединений – конформационно определяемый. Одним из типичных представителей группы нестероидных противовоспалительных средств, который обладает данным полиморфизмом - является мефенаминовая кислота. В настоящее время обнаружено две полиморфные формы MEF I и MEF II. Таким образом, целью настоящей работы является изучение и выявление наиболее вероятных конформаций молекулы мефенаминовой кислоты для определения вероятных механизмов образования кристаллических форм, что, безусловно, будет иметь высокую значимость для фармакологии. Для достижения поставленной цели, в данной работе был применен комплексный подход ЯМР, включающий в себя спектроскопию ядерного эффекта Оверхаузера (2D NOESY) и квантово-химические расчеты. Данный подход позволил получить значения межатомных расстояний, основываясь на информации о скоростях кросс-релаксации. Анализ полученных величин позволил выявить преобладающие конформации молекул мефенаминовой кислоты.

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.

Список литературы

- [1] Lozano J.J., Pouplana R., López M., Ruiz J. // *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*. 1995. V. 335. № 1-3. P.215–227.
- [2] Lee E.H., Byrn S.R., Pinal R. // *J. Pharm. Sci.* 2012. V. 101. № 12. P.4529–4539.
- [3] Khodov I.A., Efimov S.V., Nikiforov M.Y., Klochkov V. V., Georgi N. // *J. Pharm. Sci.* 2014. V. 103. № 2. P. 392–394.