



Российская академия наук
ФАНО
Российский фонд фундаментальных исследований
ФГБУН Институт химии растворов РАН
ФГБУН Институт общей и неорганической химии РАН
ФГБУН Институт Фотонных Технологий ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН
Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова
ЗАО «ШАГ»
Редакционная коллегия журнала
«Сверхкритические флюиды: теория и практика»

**IX Научно-практическая конференция
с международным участием
«Сверхкритические флюиды:
фундаментальные основы,
технологии, инновации»**

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

9-14 октября 2017 г.

Краснодарский край, г. Сочи

Сочи-2017

ББК – 94.3
УДК – 54.1
Т29

ISBN – 978-5-4465-1576-9

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ



ИХР РАН

ИОНХ РАН

ФГБУН Институт химии растворов РАН

ФГБУН Институт общей и неорганической химии РАН



*ФГБУН Институт Фотонных Технологий
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»
РАН*



*Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова*



ЗАО «ШАГ»



*Редакционная коллегия журнала
«Сверхкритические флюиды: теория и
практика»*

ФИНАНСОВАЯ ПОДДЕРЖКА



*Российский фонд фундаментальных
исследований*

*Мероприятие проводится при финансовой
поддержке Российского фонда
фундаментальных исследований,
Проект № 17-03-20377*



Президиум Российской Академии Наук

ЗАО «ШАГ»



ФАНО России
ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО
НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

ФАНО

Waters
THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

Waters GmbH

КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОВОДИТСЯ ПОД ПРЕДСЕДАТЕЛЬСТВОМ:

В.В. Лунина, академика РАН, МГУ

*В.Я. Панченко, академика РАН, Институт Фотонных Технологий ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН*

ЗАМЕСТИТЕЛИ ПРЕДСЕДАТЕЛЕЙ ОРГКОМИТЕТА:

М.Г. Киселев, д.х.н., профессор, ИХР РАН (Иваново)

*В.Н. Баграташвили, д.ф.-м.н., профессор, Институт Фотонных Технологий
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (Троицк, Москва)*

В.М. Новоторцев, академик РАН, ИОНХ РАН (Москва)

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

И.М. Абдулагатов, проф, д.т.н., Институт физики ДНЦ РАН

М.А. Анисимов, профессор, д.х.н., Мэриленд (США)

К.Г. Боголицын, профессор, д.х.н., САФУ (Архангельск)

В.М. Бузник, академик РАН, ИМЕТ РАН (Москва)

В.М. Валяшко, профессор, д.х.н., ИОНХ РАН (Москва)

А.А. Востриков, д.ф.-м.н., проф., чл.-корр. РИА, ИТ СО РАН (Новосибирск)

Ф.М. Гумеров, д.т.н., профессор, КНИТУ (Казань)

А.М. Егоров, академик РАН, МГУ (Москва)

Д.А. Леменовский, д.х.н., профессор, МГУ (Москва)

О.Н. Мартыанов, д.ф.-м.н ИК СО РАН (Новосибирск)

В.И. Минкин, академик РАН, ЮФУ (Ростов-на-Дону)

Н.В. Меньшутина, профессор, д.т.н., РХТУ (Москва)

Б.Ф. Мясоедов, академик РАН, ГЕОХИ РАН (Москва)

О.П. Паренаго, профессор, д.х.н., ИНХС, (Москва)

М. Поляков, профессор, Ноттингемский университет (Великобритания)

*В.К. Попов, д.ф.-м.н., Институт Фотонных Технологий ФНИЦ
"Кристаллография и фотоника" РАН (Троицк, Москва)*

И.А. Ревельский, д.х.н., профессор, МГУ (Москва)

М.Ю. Синев, д.х.н., ИХФ РАН (Москва)

И. Смирнова профессор Технический университет Гамбурга ТУНН (Германия)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

О.О. Паренаго, к.х.н., ИОНХ РАН (Москва)

В.В. Рябова, ИХР РАН (Иваново)

Н.А. Кожевникова, СКФ-ТП (Москва)

А.В. Черкасова, к.х.н., ИХФ РАН (Москва)

М.Г. Тарасевич, ЗАО «ШАГ», (Москва)

СЕКРЕТАРИАТ

Е.Н. Голубева, д.х.н., МГУ (Москва)

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР В ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ПРИ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ СОСТОЯНИЯ.Ходов И.А.^{1,2}, Дышин А.А.¹, Ивлев Д.В.¹, Киселев М.Г.¹¹*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова, Иваново*²*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань*iakh@isc-ras.ru

Получение количественной информации о конформационном распределении малых биологически активных молекул лекарственных препаратов в скСО₂ является актуальной задачей с точки зрения не только прогнозирования биодоступности но и мониторинга процессов нуклеации полиморфных форм [1, 2]. В данной работе было обсуждено проведение эксперимента ЯМР при сверхкритических параметрах состояния. А также, была разработана новая конструкция ячейки, позволившая устранить значительную неоднородность поля, и, как следствие, увеличить чувствительность эксперимента при сверхкритических параметрах состояния. Кроме того, было показано качественное совпадение популяций конформеров, рассчитанных из МД моделирования и ЯМР эксперимента.

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 и 17-03-00459) и гранта президента РФ по поддержке молодых ученых (МК-9048.2016.3).

1. Khodov I.A. Inversion of population distribution of felodipine conformations at increased concentration in dimethyl sulfoxide is a prerequisite to crystal nucleation. / Khodov I.A., Efimov S. V, Nikiforov M.Y., Klochkov V. V, Georgi N. // Journal of pharmaceutical sciences – 2014. – Т. 103 – № 2 – С.392–394.

2. Khodov I.A. Determination of preferred conformations of ibuprofen in chloroform by 2D NOE spectroscopy. / Khodov I.A., Efimov S. V, Klochkov V. V, Alper G.A., Batista de Carvalho L.A.E. // European journal of pharmaceutical sciences : official journal of the European Federation for Pharmaceutical Sciences – 2014. – Т. 65С – С.65–73.