



**Материалы
XI Всероссийской школы-конференции молодых учёных
«Сверхкритические флюидные технологии
в решении экологических проблем»**

(29 июня–01 июля 2020 г.)

ISBN 978-5-261-01502-4



9 785261 015024

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова
Российская академия наук
Уральское отделение РАН
Федеральный исследовательский центр комплексного изучения Арктики
имени академика Н.П. Лаврова РАН
Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова
Российский фонд фундаментальных исследований
Правительство Архангельской области
Журнал «Сверхкритические флюиды: теория и практика»

Материалы
XI Всероссийской школы-конференции молодых учёных
«Сверхкритические флюидные технологии
в решении экологических проблем»

(29 июня–01 июля 2020 г.)

г. Архангельск
2020

из квантовых расчетов, что избавляет от проблем, связанных с неточностями аппроксимированных значений критических параметров, и, возможно, дает более точные значения свободной энергии сольватации, а следовательно, и растворимости.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Budkov Y.A., Kolesnikov A.L., Ivlev D.V., Kalikin N.N., Kiselev M.G. // Journal of Molecular Liquids. 2019. 276. P. 801.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № RFMEFI61618X0097).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ ПИРАЦЕТАМА НА ОСНОВЕ ОДНО- И ДВУМЕРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР ПРИ СВЕРХКРИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРАХ СОСТОЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЯ

И.Д. Крюкова^{1,2}, К.В. Белов¹, И.А. Ходов¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново, Россия

²Ивановский государственный университет, г. Иваново, Россия

В современной фармацевтической индустрии синтез новых и модернизация имеющихся ноотропных лекарственных препаратов является одной из актуальных задач. Одним из перспективных объектов в данной области является 2-оксо-1-пирролидинацетамид (пирацетам). Пирацетам – препарат, широко применяющийся для улучшения обменных процессов мозга, повышения концентрации АТФ в мозговой ткани, стимуляции гликолитических процессов и др. Известно, что на проявление биологической активности препарата может влиять пространственная структура и конформационное состояние молекул исследуемого препарата.

На распределение конформеров биологически активных молекул может оказывать значительное влияние целый ряд факторов, в том числе и

используемая среда (растворитель). Вероятно, что использование диоксида углерода в состоянии сверхкритического флюида как растворителя может привести к значительным изменениям конформационных распределений молекулы парацетама, что в перспективе позволит обнаружить пути синтеза новых полиморфных форм данного ноотропного препарата. Ранее было показано, что метод на основе спектроскопии ЯМР является достаточно полезным для определения пространственной структуры и конформационного многообразия малых биологически активных молекул. Было показано, что используемый нами подход позволяет получать информацию о долевом распределении конформеров исследуемых молекул как на качественном [1], так и на количественном уровне [2]. Мы считаем, что применение метода, описанного в работе [3], основанного на двумерной спектроскопии ЯМР, будет полезным для решения вопроса долевого распределения конформеров молекулы парацетама в диоксиде углерода при сверхкритических параметрах состояния.

В данной работе были проведены эксперименты по отнесению сигналов ЯМР соответствующим характеристическим группам. Были получены спектры ядерного эффекта Оверхаузера, анализ которых позволил выявить особенности пространственной структуры парацетама.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Determination of preferred conformations of mefenamic acid in DMSO by NMR spectroscopy and GIAO calculation / I.A. Khodov et al. // AIP Conf. Proc. – 2019. – 2063, 040007.
2. Spatial structure, thermodynamics and kinetics of formation of hydrazones derived from pyridoxal 5'-phosphate and 2-furoic, thiophene-2-carboxylic hydrazides in solution / G.A. Gamov et al. // Journal of Molecular Liquids. – 2019. – 283. – P. 825–833.
3. Spatial structure of felodipine dissolved in DMSO by 1D NOE and 2D NOE-SY NMR spectroscopy / I.A. Khodov et al. // Journal of Molecular Structure. – 2013. – 1035 – P. 358–362.

Работа выполнена на УНУ «Флюид-Спектр» при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-29-06008 и 18-03-00255) и гранта президента РФ (№ МК-1409.2019.3).