



ИХР РАН

VIII Международная научная
конференция

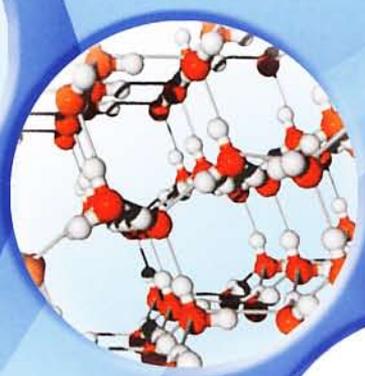
КИНЕТИКА и МЕХАНИЗМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ.

**Кристаллизация как форма
самоорганизации вещества**

*III Всероссийская школа молодых ученых
по кинетике и механизму кристаллизации*

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

24-27 июня 2014 г.
ИВАНОВО, Россия



Российская академия наук
Научный совет по химической технологии
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ивановский государственный химико-технологический университет
Российское химическое общество им. Д. И. Менделеева



**VIII Международная научная конференция
"Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация как форма самоорганизации вещества"**

24 - 27 июня 2014
г. Иваново

Оргкомитет

Председатель оргкомитета

чл.-корр. РАН Мелихов И.В. (МГУ, Москва)

Сопредседатель

проф. Захаров А.Г. (ИХР РАН, Иваново)

Ученый секретарь

к.х.н. Алексеева О.В. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Абрамов Ю. (США)

акад. РАН Алдошин С.М. (ИПХФ РАН, Черноголовка)

чл.-корр. РАН Алымов М.И. (ИМЕТ РАН, Москва)

чл.-корр. РАН Баринин С.М. (ИМЕТ РАН, Москва)

проф. Бауэр-Брендл А. (Дания)

чл.-к. Бачурин С.О. (ИФАВ РАН, Черноголовка)

д.х.н. Бердонос С.С. (МГУ, Москва)

чл.-корр. РАН Бойнович Л.Б. (ИФХЭ РАН, Москва)

проф. Велага С. (Швеция)

чл.-корр. РАН Гудилин Е.А. (МГУ, Москва)

чл.-корр. РАН Гусаров В.В. (ИХС РАН, С.-Петербург)

акад. РАМН Егоров А.М. (МГУ, Москва)

проф. Идрисси А. (Франция)

акад. РАН Иевлев В.М. (ГТУ, Воронеж)

проф. Каманина Н.В. (ОАО "ГОИ им.С.И.Вавилова", С.-Петербург)

проф. Кесслер В. (Швеция)

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

чл.-корр. РАН Койфман О.И. (ИГХТУ, Иваново)

д.х.н. Козик В.В. (ТГУ, Томск)

проф. Колесников А.А. (СПбГТИ (ТУ), С.-Петербург)

проф. Колкер А.М. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Кулов Н.Н. (ИОНХ РАН, Москва)

акад. РАН Лукин В.В. (МГУ, Москва)

д.х.н. Перлович Г.Л. (ИХР РАН, Иваново)

проф. Рашкович Л.Н. (МГУ, Москва)

проф. Сейсенбаева Г. (Швеция)

акад. РАН Солнцев К.А. (ИМЕТ РАН, Москва)

проф. Сырбу С.А. (ИГХТУ, Иваново)

д.м.н. Трещалина Е.М. (ГУ РОНЦ, Москва)

проф. Усольцева Н.В. (ИвГУ, Иваново)

проф. Федоров П.П. (ИОФ РАН, Москва)

акад. РАН Цивадзе А.Ю. (ИФХЭ РАН, Москва)

чл.-корр. РАН Чекмарев А.М. (РХТУ, Москва)

чл.-корр. РАН Чернов А.А. (ИК РАН, Москва)

акад. РАН Чурбанов М.Ф. (ИХВВ РАН, Н.Новгород)

проф. Шарнин В.А. (ИГХТУ, Иваново)

акад. РАН Шевченко В.Я. (ИХС РАН, С.-Петербург)

Локальный оргкомитет

Волкова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)

Ефремова Л.С. (ИХР РАН, Иваново)

Иванов К.В. (ИХР РАН, Иваново)

Куликова Л.Б. (ИХР РАН, Иваново)

Носков А.В. (ИХР РАН, Иваново)

Потемкина О.И. (ИХР РАН, Иваново)

Пуховский Ю.П. (ИХР РАН, Иваново)

Родионова А.Н. (ИХР РАН, Иваново)

Рябова В.В. (ИХР РАН, Иваново)

Трусова Т.А. (ИХР РАН, Иваново)

В докладе обсуждается распределение популяций конформаций ибупрофена в зависимости от температуры и концентрации смеси.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 13-03-12041.

ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ МЕХАНИЗМОВ НУКЛЕАЦИИ ПОЛИМОРФНЫХ ФОРМ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ НАСЫЩЕННЫХ РАСТВОРОВ: НА ПРИМЕРЕ ИБУПРОФЕНА В ХЛОРОФОРМЕ

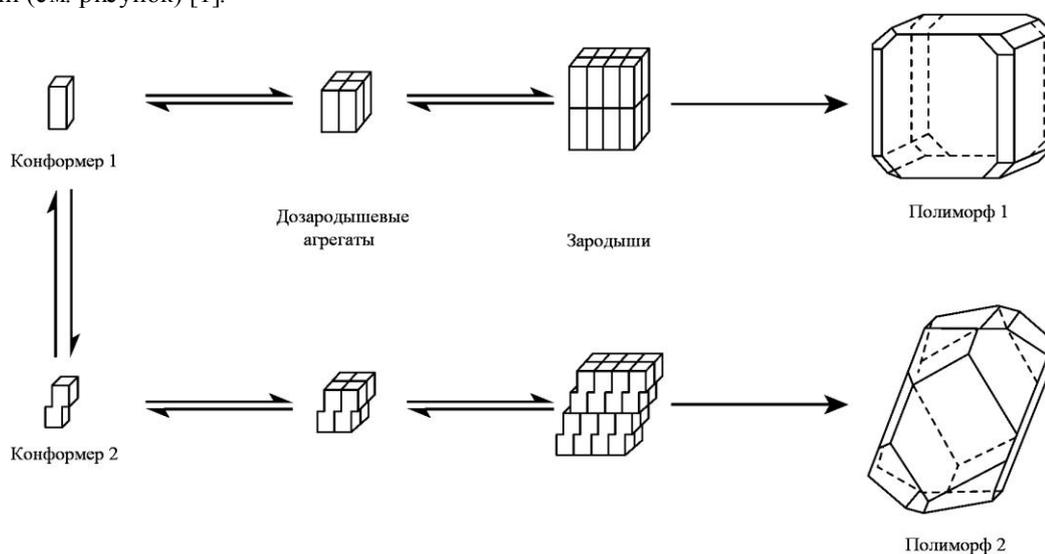
Ходов И.А.¹, Ивлев Д.В.¹, Голубев В.А.¹, Ефимов С.В.², Клочков В.В.², Никифоров М.Ю.¹, Альпер Г.А.¹, Киселев М.Г.¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

Переход между полиморфными формами может оказать отрицательное влияние на растворимость и биодоступность лекарственных соединений. Таким образом, становится необходимым найти подход к предсказанию нуклеации стабильных полиморфных форм из насыщенных растворов. Преобладающие конформеры молекул в насыщенном растворе могут определять механизмы нуклеации полиморфных модификаций (см. рисунок) [1].



В настоящей работе представлены результаты исследования конформационного многообразия ибупрофена в хлороформе на основе предложенного подхода, который включает в себя совместный анализ данных двумерной NOESY ЯМР спектроскопии, термодинамических расчетов и МД моделирования. Были выявлены закономерности инверсии конформационного состояния ибупрофена при переходе от разбавленного к насыщенному раствору в хлороформе. Похожие закономерности также наблюдались ранее для фелодипина в ДМСО [2].

Благодарности: Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ (грант № 12-03-00775-а, 13-03-97041 р_поволжье_а и 13-03-12041-а), а также международного гранта Marie Curie International Research Staff Exchange Scheme PIRSES-GA-2009-247500. ЯМР исследования выполнены на оборудовании центра коллективного пользования "Верхневолжский региональный центр физико-химических исследований".

1. L. Yu, S.M. Reutzel-Edens, C.A. Mitchell. *Org. Process Res. Dev.*, 2000, **4**, 396–402.
2. I.A. Khodov, S.V. Efimov, M. Yu. Nikiforov, V.V. Klochkov, Nikolaj Georgi. *J. Pharm. Scienc.*, 2014, **103**, 392–394.

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ПОЛИМОРФНОГО БИЯДЕРНОГО КОМПЛЕКСА ПАЛЛАДИЯ(II) С ЦИСТЕИНОМ

Товпинец Ю.С.¹, Степанова М.А.¹, Ерёмин А.В.¹, Ваулина Д.Д.¹, Беляев А.Н.¹, Гуржий В.В.²

¹Санкт-Петербургский государственный технологический институт (ТУ), Санкт-Петербург

²Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург

tovpinets.jul@gmail.com

В настоящее время координационные соединения металлов платиновой группы активно изучаются благодаря возможности их применения в процессах катализа, супрамолекулярной химии и медицине.