

Федеральное агентство научных организаций
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Российская академия наук
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ивановский государственный химико-технологический университет



**IX Международная научная конференция
"Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация и материалы будущего"**

13 - 16 сентября 2016 г.
г. Иваново, Россия

высокая температура фазового перехода жидкокристаллической фазы. Исследованы реологические свойства синтезированных систем, показано резкое увеличение вязкости системы при изменении надмолекулярной организации и переходе от микроэмульсионных к жидкокристаллическим системам. *Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-33-00247 мол_а.*

ОТНЕСЕНИЯ СИГНАЛОВ ^{13}C ЯМР СТРИХНИНА В ХЛОРОФОРМЕ ПРИ ПОМОЩИ ГЕТЕРОЯДЕРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Чебрякова А.И.¹, Белов К.В.² Ходов И.А.^{3,4}

¹ Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

² Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

³ Институт химии растворов им. Г.А. Крестова, Иваново, Россия

⁴ Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

Идентификация химических соединений в растворе является важным этапом в исследовании кинетики формирования кристалла. Основным методом позволяющим производить качественную идентификацию таких соединений в растворе является ЯМР ^{13}C спектроскопия, однако отнесения сигналов даже простых органических лекарственных соединений не всегда является простой и однозначной задачей. Как было показано в работе [1] в литературе могут существовать разночтения в интерпретации отнесений сигналов ^{13}C для ибупрофена, однако при помощи современных методов гомо- ($2\text{D } ^{13}\text{C}-^{13}\text{C}$ INADEQUATE) и гетероядерной ($2\text{D } ^1\text{H}-^{13}\text{C}$ HNBC, $2\text{D } ^1\text{H}-^{13}\text{C}$ HSQC) корреляционной спектроскопии удалось получить однозначное отнесение сигналов ибупрофена в хлороформе. Кроме того, получение качественного и однозначного отнесения сигналов является важным для последующего конформационного анализа малых молекул лекарственных соединений в растворе [2-3].

Целью данной работы является получение отнесений сигналов ^{13}C ЯМР спектра для модельного соединения стрихнина в растворе хлороформа. Для достижения данной цели и проверки валидности отнесения линий ЯМР изучаемого соединения применялись современные виды градиентных модификаций двумерной гетероядерной корреляционной ЯМР спектроскопии: gradient-selected Heteronuclear Multiple Bond Correlation (gs-HNBC) и gradient selected Heteronuclear Single Quantum Correlation (gs-HSQC).

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 поддержки фондов РФФИ (проекты № 16-03-00640 и 16-53-150007) и гранта Президента РФ по поддержке молодых ученых (МК-9048.2016.3).

1. I.A. Khodov, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, G.A. Alper, L.A.E. Batista de Carvalho, *Eur. J. Pharm. Sci.*, 2014, **65**, 65–73.

2. I.A. Khodov, S.V. Efimov, V.V. Klochkov, L.A.E. Batista de Carvalho, M.G. Kiselev, *J. Mol. Struct.*, 2016, **1106**, 373–381.

3. S.V. Efimov, I.A. Khodov, E.L. Ratkova, M.G. Kiselev, S. Berger, V.V. Klochkov, *J. Mol. Struct.*, 2016, **1104**, 63–69.

ВОДОРОДНЫЕ СВЯЗИ РАСТВОРЕННОЕ ВЕЩЕСТВО–ПОЛЯРНЫЙ СОРАСТВОРИТЕЛЬ И СЕЛЕКТИВНАЯ СОЛЬВАТАЦИЯ В СРЕДЕ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ФЛЮИДА НА ПРИМЕРЕ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕЕ ПРОИЗВОДНЫХ

Одинцова Е.Г., Петренко В.Е., Антипова М.Л., Гурина Д.Л.

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия
ver@isc-ras.ru

Интерес к исследованию сольватации салициловой кислоты и ее производных в среде сверхкритического растворителя обусловлен не только перспективами применения современных сверхкритических технологий в фармацевтической промышленности, но и такими общетеоретическими вопросами, как влияние типа и расположения функциональных групп на растворимость соединений, близких по своей химической природе, а также роль специфических взаимодействий растворенное вещество – соразтворитель в процессе сольватации.