Письма в ЭЧАЯ. 2025. Т. 22, № 5(262). С. 1012

STRUCTURE AND DYNAMICS INVESTIGATION OF IBUPROFEN DIMERS BY DFT METHOD

P. Gergelezhiu [a, b, 1], *E. Raksha* [b, 2], *L. Savostina* [c], *G. Arzumanyan* [b], *A. Eresko* [b], *S. Malakhov* [d], *K. Mamatkulov* [b], *O. Ponomareva* [b], *A. Belushkin* [b, c, d], *D. Chudoba* [b]

[a] Branch of Lomonosov Moscow State University in Dubna, Dubna, Russia
[b] Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
[c] Institute of Physics, Kazan Federal University, Kazan, Russia
[d] National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

Ibuprofen is a representative of a group of nonsteroidal anti-inflammatory drugs widely used in modern medicine. This article presents the results of the ibuprofen structure and dynamics investigations using IR and Raman spectroscopy in combination with quantum chemical calculations in the DFT approximation. Ibuprofen R–S dimer cluster model was used for calculations. Discussion is focused on the key parameters of the molecular geometry of the cyclic R–S dimer and vibrations of the H-bonded carboxylic COOH group of ibuprofen.

Ибупрофен является представителем группы нестероидных противовоспалительных препаратов, широко используемых в современной медицине. В данной статье представлены результаты исследований структуры и динамики ибупрофена с использованием ИК- и раман-спектроскопии в сочетании с квантово-химическими расчетами в приближении DFT. Для расчета была использована кластерная модель димера R–S ибупрофена. Основное внимание сосредоточено на ключевых параметрах молекулярной геометрии циклического димера R–S и колебаниях карбоксильной группы COOH ибупрофена, участвующей в образовании водородной связи.

PACS: 82.80.–d

Received on April 7, 2025.

[1] E-mail: polinagergelez@mail.ru
[2] E-mail: elenaraksha@jinr.ru