

VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC FEATURES OF IBUPROFEN AND KETOPROFEN: IR AND RAMAN SPECTROSCOPY COMBINED WITH DFT CALCULATIONS

K. Logacheva^{a,1}, *P. Gergelezhiu*^a, *E. Raksha*^{b,2},
L. Savostina^a, *G. Arzumanyan*^b, *A. Eresko*^b,
S. Malakhov^c, *K. Mamatkulov*^b, *O. Ponomareva*^b,
A. Belushkin^{a,b,c}, *D. Chudoba*^b

^a Institute of Physics of Kazan Federal University, Kazan, Russia

^b Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

^c National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow

Vibrational spectroscopic features of Ibuprofen and Ketoprofen (nonsteroidal anti-inflammatory drugs) were determined as a result of joint analysis of experimental and DFT-calculated data. There is a good agreement between the experimental (IR, Raman) and calculated (BP86/def2-SVP) vibrational frequencies of Ibuprofen and Ketoprofen.

В результате совместного анализа экспериментальных и рассчитанных в приближении DFT данных определены особенности колебательных спектров ибупрофена и кетопрофена (нестероидных противовоспалительных препаратов). Получено хорошее соответствие между экспериментальными (ИК, рамановская) и расчетными (BP86/def2-SVP) частотами колебаний ибупрофена и кетопрофена.

PACS: 33.20.Tr

Received on February 1, 2024.

¹E-mail: kalogacheva@stud.kpfu.ru

²E-mail: elenaraksha@jinr.ru