

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна
Хімічний факультет

**X Всеукраїнська наукова
конференція студентів та аспірантів
"Хімічні Каразінські читання - 2018"
(ХКЧ'18)**

Тези доповідей

23–25 квітня 2018 року

Харків
2018

X Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання – 2018" (ХКЧ'18), 23–25 квітня 2018 року: тези доповідей.– Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2018. – 212 с.

Рекомендовано до друку рішенням Вченої Ради хімічного факультету від 16 березня 2018 року, протокол № 3.

НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Калугін О. М.	Голова комітету, декан хімічного факультету, к.х.н., професор
Дорошенко А. О.	зав. каф. органічної хімії, д.х.н., професор
Мчедлов-Петросян М. О.	зав. каф. фізичної хімії, д.х.н., професор
В'юник І. М.	зав. каф. неорганічної хімії, д.х.н., професор
Юрченко О. І.	зав. каф. хімічної метрології, д.х.н., професор
Коробов О.І.	зав. каф. хімічного матеріалознавства, д.х.н., професор
Чебанов В. А.	зав. каф. прикладної хімії, д.х.н., професор
Колосов М.О.	заступник декана з наукової роботи, к.х.н., доцент

ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ

Калугін О. М.	Голова комітету, декан хімічного факультету, к.х.н., професор
Колосов М.О.	заступник декана з наукової роботи, к.х.н., доцент
Леонова Н. О.	старший викладач кафедри хімічної метрології, к.х.н.
Батрак А.С.	аспірант кафедри неорганічної хімії
Колесник Я.В.	доцент кафедри неорганічної хімії, к.х.н., доц.
Рябчунова А.В.	старший викладач кафедри неорганічної хімії
Пономарьов В.	студент 4 курсу хімічного факультету
Клочанюк О.	студент 4 курсу хімічного факультету
Калінін Д.	голова СНТ хімічного факультету, студент 5 курсу
Марфунін М.О.	студент 4 курсу хімічного факультету
Степанюк Д.С.	студент 6 курсу хімічного факультету
Крутієнко А.Г.	студент 5 курсу хімічного факультету
Підворотня А.В.	студент 5 курсу хімічного факультету
Єрмоленко Г.Ю.	студент 5 курсу хімічного факультету

Представлені тези доповідей за теоретичними та практичними результатами наукових досліджень, виконаних студентами та аспірантами вищих навчальних закладів і науково-дослідницьких установ України.

Тези доповідей подаються в авторській редакції.

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2018

УСТАНОВЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ СТРИХНИНА В ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДЕ МЕТОДАМИ ДВУМЕРНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

Белов К. В.¹, Ходов И. А.^{2,3}

¹ Ивановский государственный университет, биолого-химический факультет, г. Иваново, Россия

² Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, г. Иваново, Россия

³ Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

iakh@isc-ras.ru

Многие алкалоиды, будучи биологически активными соединениями, представляют особый интерес для химического сообщества. Представленный класс соединений используется человеком во многих отраслях деятельности, таких как: фармацевтика, медицина, сельское хозяйство и др. Среди огромного многообразия представителей данного класса соединений, можно выделить стрихнин, обладающий сложной, а потому и наиболее интересной для изучения структурой. Исследование данного представителя алкалоидного класса играет особую роль в понимании биологических и химических процессов на молекулярном уровне, так как он, в терапевтических дозах, оказывает стимулирующее действие на органы чувств (обостряет зрение, слух, тактильное чувство), возбуждает сосудодвигательный и дыхательный центры, а также мышцу сердца, стимулирует процессы обмена. Фармакологическое действие и биологическая активность данного соединения на настоящий момент недостаточно изучены, поэтому особый интерес представляет исследование данного соединения в различных растворителях с целью понимания его химических превращений. Для этого нами был применен комплексный подход, который включает в себя использование различных методов ЯМР спектроскопии.

В частности, для достижения поставленных задач нами была произведена серия экспериментов методами ЯМР спектроскопии (^1H - ^{13}C НМВС, ^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^1H TOCSY) в сильно полярном диметилсульфоксиде (ДМСО). Используемый подход, позволил нам не только однозначно определить химическую структуру исследуемого соединения, но и выявить внутримолекулярные взаимодействия. Стоит отметить, что данный подход является достаточно эффективным при изучении таких сложных структур как алкалоиды, а используемые нами двумерные методы, позволяют построить целостную картину поведения исследуемого соединения в растворе ДМСО.

В представленной работе были рассмотрены достоинства и недостатки ЯМР метода при изучении сложных систем, применительно к анализу их структуры. Таким образом, были получены двумерные спектры стрихнина в диметилсульфоксиде, произведено отнесение сигналов в спектрах, выявлены

соответствующие корреляции в двумерных спектрах, и определена однозначная структура исследуемой молекулы.

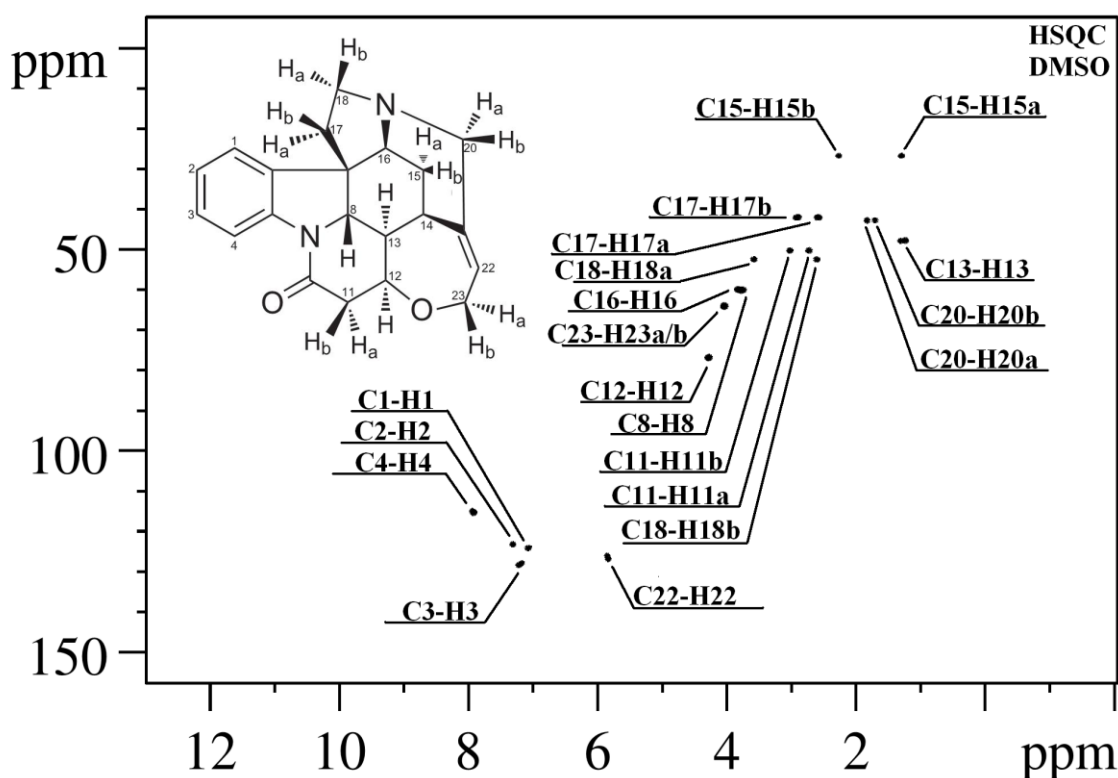


Рисунок 2. Спектр ^1H - ^{13}C HSQC стрихнана в диметилсульфоксиде

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 поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 и в рамках государственного задания номер государственной регистрации: 01201260481.

[1] Kalmykov, P. A. Theoretical and experimental study of imine-enamine tautomerism of condensation products of propanal with 4-aminobenzoic acid in ethanol / Khodov, I. A., Klochkov, V. V., Klyuev, M. V. // Russian Chemical Bulletin, 2017, 66(1), pp.70-75.

[2] Khodov, I. A. The importance of suppressing spin diffusion effects in the accurate determination of the spatial structure of a flexible molecule by nuclear overhauser effect spectroscopy / Efimov, S. V., Klochkov, V. V., Batista De Carvalho, L. A. E., Kiselev, M. G. // Journal of Molecular Structure, 2016, 1106, pp.373-381.

[3] Khodov, I. A. Comment on "conformational analysis of small organic molecules using NOE and RDC data: A discussion of strychnine and α -methylene- γ -butyrolactone" / Kiselev, M. G., Efimov, S. V., Klochkov, V. V. // Journal of Magnetic Resonance, 2016, 266, pp.67-68.