

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Башкирский государственный университет»



**«ПРОБЛЕМЫ И ДОСТИЖЕНИЯ ХИМИИ КИСЛОРОД-
И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ БИОЛОГИЧЕСКИ
АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ»**

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

*III Всероссийской молодежной конференции
(14 - 17 ноября 2018 г. Уфа)*

**УФА
РИЦ БашГУ
2018**

УДК 547+544
ББК 24.2+24.5

*Мероприятие проводится при финансовой поддержке Российского фонда
фундаментальных исследований, проект № 18-33-10035;
при участии РХО имени Д.И. Менделеева*

Редакционная коллегия:

д-р хим. наук, профессор Р.Ф. Талипов (*отв. редактор*)
д-р хим. наук, профессор Р.М. Ахметханов
д-р хим. наук, профессор А.Г. Мустафин
канд. хим. наук, доцент Э.Р. Латыпова
канд. хим. наук, доцент А.Х. Фаттахов
канд. хим. наук, доцент И.В. Сафарова
аспирант Г.Г. Кутлугильдина

Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений: тезисы III Всероссийской молодежной конференции (г. Уфа, 14-17 ноября 2018 г.) / отв. ред. Р.Ф. Талипов – Уфа: РИЦ БашГУ, 2018. – 249 с.

ISBN 978-5-7477-4762-3

В сборнике представлены материалы III Всероссийской молодежной конференции «**Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений**», прошедшей 14 - 17 ноября 2018 г. в Уфе. Тексты воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 547+544
ББК 24.2+24.5

ISBN 978-5-7477-4762-3

© БашГУ, 2018

ЭФФЕКТ РАСТВОРИТЕЛЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ СТРУКТУРЫ
КИСЛОРОД- И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ МЕТОДАМИ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ НА ПРИМЕРЕ
АЛКАЛОИДОВ.

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

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

² *Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

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

⁴ *Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия*

Большинство алкалоидов, будучи биологически активными соединениями, представляют высокий научный интерес в физико-химическом сообществе. Поэтому, установление химической структуры подобных соединений является одной из актуальных задач в современной химии. На сегодняшний день, многие представители класса алкалоидов, находят свое применение в медицине, фармацевтике и сельском хозяйстве. Среди всего многообразия представителей данного класса, особо сложной, а потому интересной для изучения структурой обладает индоловый алкалоид – стрихнин. В настоящее время, все еще трудно дать однозначный ответ на вопрос о том, каковы истинные свойства и химическая структура подобных соединений. В данной работе, для понимания особенностей химической структуры алкалоидов в различных полярных и неполярных растворителях, нами был использован комплексный метод спектроскопии ядерного магнитного резонанса.

Для достижения поставленных целей, был решен ряд задач, с использованием, как одномерных, так и двумерных методов ЯМР спектроскопии: ¹H, ¹³C, HSQC, HMBC и TOCSY с различными временами смешивания. Данный подход позволил однозначно определить химическую структуру стрихнина в трех различно полярных дейтерированных растворителях (бензол, хлороформ и диметилсульфоксид).

В ходе работы, были установлены основные причины смещения резонансных сигналов, в одномерных водородных ЯМР спектрах, в том числе влияние отрицательной электростатической потенциальной поверхности стрихнина. Кроме того, были проанализированы и исключены другие возможные факторы способные оказать влияние на изменение положения резонансного сигнала, такие как конформационные эффекты и образование ассоциатов.

$E = -19.98 \text{ kcal/mol}$

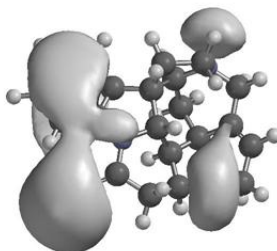


Рисунок 1. Карта отрицательного электростатического потенциала молекулы стрихнина

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.

Литература

1. 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.
2. 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.
3. 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.

© Белов К.В., Еремеев.И.Е., Ходов И.А., 2018 г.