

CURRENT CHEMICAL PROBLEMS (CCP-2019)

Vasyl' Stus Donetsk National University  
L. M. Litvinenko Institute of Physical-Organic  
Chemistry and Coal Chemistry



International Year  
of the Periodic Table  
of Chemical Elements

II INTERNATIONAL (XII UKRAINIAN)  
SCIENTIFIC CONFERENCE  
FOR STUDENTS AND YOUNG SCIENTISTS

# CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



ABSTRACT BOOK

Vinnytsia 2019

ISBN 978-617-7742-70-7

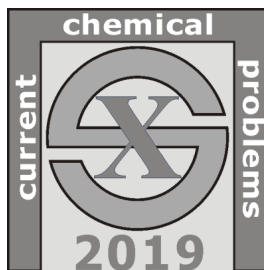


9 786177 742707

www.tvoru.com.ua

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE  
NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE  
VASYL' STUS DONETSK NATIONAL UNIVERSITY  
L. M. LITVINENKO INSTITUTE OF PHYSICAL-ORGANIC  
CHEMISTRY AND COAL CHEMISTRY

# CURRENT CHEMICAL PROBLEMS



II International (XII Ukrainian) scientific conference  
for students and young scientists

BOOK OF ABSTRACTS



By the International Year of the Periodic Table

March 19–21, 2019  
Vinnytsia

UDC 54(06)  
C 95

*Approved by the Academic Council of Vasyl' Stus Donetsk National University  
(minutes N 8, 01.03.2019)  
SSO "UkrISTEI" registration certificate N 82, 26.02.2019*

**Current chemical problems (CCP-2019):** book of abstracts of the II International (XII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 19–21, 2019, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. Vinnytsia, 2019. 248 p.

II International (XII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists "Current Chemical Problems" (CCP-2019) was held at Vasyl' Stus Donetsk National University on March 19–21, 2019.

The book of abstracts contains the results of investigations, obtained in the educational and research establishments of Ukraine, Republic of Azerbaijan, Russian Federation, Republic of Poland, Estonia, Brazil, Germany in the fields of analytical, quantum, inorganic, organic, physical, medicinal and pharmaceutical chemistry, biochemistry, chemical education, chemical engineering, chemistry of polymers and composites.

Conference partners:  
UkrChemAnalysis Ltd.  
Otava Ltd.  
Association of Perfumery and Cosmetics of Ukraine  
Vasyl' Stus DonNU Student Council  
Chemlaborreactive Ltd.  
Vinnytsia Chamber of Commerce and Industry  
"INSTRUMENT-SERVIS"  
"ALSI-Chrom"  
"MixLab"  
UkrOrgSyntez Ltd.

Editorial board: O. M. Shendrik (ed.-in-ch.)  
S. V. Zhyltsova (executive secretary)  
I. O. Opejda  
S. V. Radio  
G. M. Rozantsev  
O. M. Shved

Editorial board address: 21021, Vinnytsia, vul. 600-richchia, 21, Educational and Scientific Institute of Chemistry of Vasyl' Stus Donetsk National University.

ISBN 978-617-7742-70-7

© Vasyl' Stus DonNU, 2019  
© Authors, 2019  
© O. M. Shendrik (ed.-in-ch.), 2019  
© LLC "TVORY", 2019

**ЭКСПРЕСС-МЕТОД КАЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ СОДЕРЖАНИЯ  
АЛКАЛОИДОВ В ОРГАНИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ**

*Белов К. В.*<sup>1,2</sup>, Ефимов С. В.<sup>3</sup>, Ходов И. А.<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской академии наук,  
Иваново, Россия

<sup>2</sup>Ивановский Государственный Университет, Иваново, Россия

<sup>3</sup>Казанский (Приволжский) Федеральный Университет, Казань, Россия  
iakh@isc-ras.ru

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), на сегодняшний день является одним из ведущих методов идентификации структуры и анализа молекул химических соединений в растворах [1]. Спектроскопия ЯМР - это отличный инструмент для получения исчерпывающей информации о внутримолекулярных характеристиках [2]. Однако, анализ и расшифровка спектральных данных, является крайне времязатратной задачей для исследователя. Поэтому сокращение времени получения информации из спектров ЯМР является одной из актуальных задач современной физической и аналитической химии.

В данной работе был предложен экспресс подход к отнесению резонансных сигналов одномерных ЯМР спектров для класса алкалоидов. В качестве объекта исследования был выбран типичный представитель данного класса – стрихнин, молекула которого отличается сложной, а потому интересной для изучения структурой. Предложенный подход основан на известном эффекте зависимости химического сдвига от растворителя [3,4]. Данный эффект проявляется в том, что при растворении одного и того же вещества в различных растворителях, величины химических сдвигов могут существенно меняться. Причем, явные изменения происходят в тех сигналах спектра ЯМР, которые относятся к группам молекул наиболее подверженным электрофильной атаке со стороны растворителя. При помощи программного обеспечения Spartan v.1.1.4, была рассчитана карта электростатического отрицательного энергетического потенциала молекулы исследуемого соединения, что позволило выявить области электрофильной атаки. Так же, для решения поставленной задачи был применен комплекс методов ЯМР включающий в себя, как гомо-, так и гетероядерные двумерные подходы, что позволило получить однозначную информацию об отнесении сигналов <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C [5].

Анализ полученных результатов позволил сформулировать суть предлагаемого метода, которая состоит в получении быстрого отнесения сигналов спектра <sup>1</sup>H ЯМР для алкалоидов при помощи только одномерных ЯМР спектров в различных органических растворителях и карты электростатического отрицательного энергетического потенциала, без использования двумерных подходов. Причем, время отнесения сигналов спектров ЯМР и обнаружение характеристических групп уменьшается с нескольких месяцев до нескольких дней.

*Работа выполнена при финансовой поддержке фондов РФФИ  
(проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой  
программы № RFMEFI161618X0097 и в рамках государственного задания номер  
государственной регистрации: 01201260481.*

1. Khodov I.A. et al. J. Magn. Reson. 2016, 266, P. 67.
2. Khodov I.A. et al. J. Pharm. Sci. 2014, 103, P. 392.
3. Frank H.S. et al. J. Phys. Chem. 1945, 13, P. 507.
4. Evans D.F. et al. J. Am. Chem. 1981, 103, P. 481.
5. Khodov I.A. et al. AIP Conf. Proc. 2019, 2063, P. 040007-1.