

МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ФАРМАЦЕВТИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

СИНТЕЗ І АНАЛІЗ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН І ЛІКАРСЬКИХ СУБСТАНЦІЙ

Тези доповідей Всеукраїнської науково-практичної
конференції з міжнародною участю, присвяченої
80-річчю з дня народження доктора фармацевтичних наук,
професора О. М. Гайдукевича

12-13 квітня 2018 року
м. Харків

Харків
НФаУ
2018

Редакційна колегія:

проф. А. А. Котвіцька, акад. НАН України, проф. В. П. Черних, доц. А. І. Федосов, проф. А. Л. Загайко, проф. І. С. Гриценко, проф. В. А. Георгіянц, проф. Л. А. Шемчук, проф. Л. О. Перехода, проф. О. М. Свечнікова, проф. С. В. Колісник

Синтез і аналіз біологічно активних речовин і лікарських субстанцій : тези доповідей Всеукр. наук.-практ. конф. з міжнар. участю, присвяченої 80-річчю з дня народження доктора фармацевтичних наук, професора О. М. Гайдукевича (12-13 квітня 2018 р.). – Х. : НФаУ, 2018. – 404 с.

Збірка містить матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції з міжнародною участю «Синтез і аналіз біологічно активних речовин і лікарських субстанцій» (12-13 квітня 2018 р.). Матеріали згруповано за науковими напрямками: конструювання, синтез і модифікація біологічно активних сполук, дослідження зв'язку структура – активність, методи фармакологічного скринінгу; сучасні підходи до створення нових лікарських та косметичних засобів, функціональних харчових та дієтичних добавок; аналітичні аспекти у синтезі біологічно активних сполук та створенні нових лікарських засобів; контроль якості лікарської рослинної сировини, фітопрепаратів, парфумерно-косметичних засобів та функціональних харчових добавок; сучасний фармацевтичний аналіз та стандартизація ліків; хіміко-токсикологічний аналіз біологічно активних речовин та лікарських засобів.

Для широкого кола науковців та практичних працівників фармації і медицини.

Матеріали подаються мовою оригіналу. За достовірність опублікованих результатів повну відповідальність несуть автори.

АНАЛИЗ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СУБСТАНЦИЙ 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, Иваново, Россия*

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

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

⁴ *Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия*
konastntinbelov31@gmail.com

Известно, что многие алкалоиды, будучи биологически активными соединениями, в определенных дозах обладают фармацевтическими свойствами. Представители данного класса соединений использовались человеком не только как психостимулирующее средство, но и в качестве лекарственных соединений, например. Стоит отметить, что на сегодняшний день, все еще трудно дать однозначный ответ о свойствах и химической структуре данных соединений. Поэтому, исследование алкалоидов, вызывают особый интерес в физико-химическом сообществе, с целью установления их химических и структурных параметров.

Широкий спектр исследований алкалоидов, а в частности стрихнина, свидетельствует, что он является достаточно востребованным в медицине. В терапевтических дозах данное соединение оказывает положительное влияние на органы чувств, а так же возбуждает сосудодвигательные и дыхательные центры. Из выше сказанного следует, что исследование алкалоидов, является одной из актуальнейших задач современной междисциплинарной науки, которая включает в себя химию, физику, биологию и медицину. В настоящей работе, для изучения особенностей структуры алкалоидов в дейтеро- хлороформе, нами был применен метод двумерной ЯМР спектроскопии.

Для точной идентификации структуры исследуемого алкалоида были применены такие методы двумерной ЯМР спектроскопии, как: HSQC, HMBC, TOCSY. Данные методы позволили нам не только определить химическую структуру, но и выявить важные внутримолекулярные особенности исследуемого объекта, такие как межатомные взаимодействия типа $^1\text{H}-^1\text{H}$, $^1\text{H}-^{13}\text{C}$.

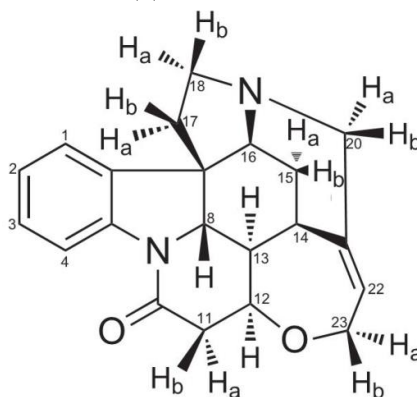


Рисунок 1. Химическая структура молекулы стрихнина

Кроме того, было показано, что данный подход является крайне эффективным, именно для таких сложных систем, как алкалоиды, и комплексная двумерная ЯМР спектроскопия, включающая в себя гомо- и гетероядерные методы позволяет однозначно определить химическую структуру изучаемого соединения.

В этой работе были выявлены особенности изучения алкалоидов методами двумерной корреляционной ЯМР спектроскопии на примере стрихнина в хлороформе, обозначены преимущества и недостатки данного подхода, а так же произведено отнесение сигналов в двумерных спектрах, выявлены соответствующие корреляции, и определена однозначная структура исследуемой молекулы.

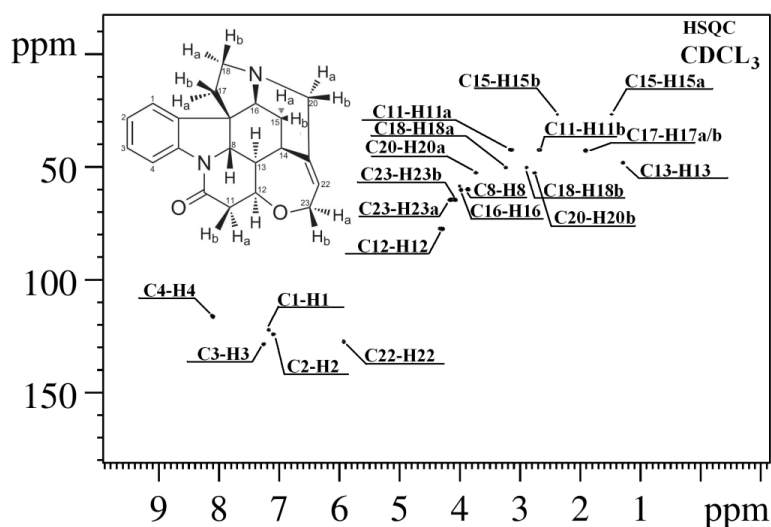


Рисунок 2. Спектр ^1H - ^{13}C HSQC стрихнина в хлороформе

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. 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.