

**Материалы XXVI Международной
научной конференции студентов,
аспирантов и молодых учёных
«Ломоносов-2019»
секция «Химия»**

электронное издание

МОСКВА

8-12 апреля 2019

УДК 54
ББК 24я43
М34

Отв. ред. Н.А. Коваленко

М34 Материалы XXVI Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2019», секция «Химия». –М.: Издательство «Перо», 2019. – 70 Мб. [Электронное издание]. – Систем. требования: процессор x86 с тактовой частотой 500 МГц и выше; 512 Мб ОЗУ; Windows XP/7/8; видеокарта SVGA 1280x1024 High Color (32 bit). – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-9-00150-123-7

При поддержке РФФИ, № 19-03-20096

ISBN 978-5-9-00150-123-7

УДК 54
ББК 24я43
© Авторы статей, 2019

Новый качественный способ экспресс оценки строения органических соединений класса алкалоидов на основе ЯМР спектроскопии и квантовохимических расчетов.

Белов К.В.¹, Ходов И.А.^{2,3}, Клочков В.В.³, Ефимов С.В.³

¹ ФГБОУ ВО "Ивановский Государственный Университет", Иваново, Россия

² Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

³ ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет", Казань, Россия
E-mail: ilya.khodov@gmail.com

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), обладает высокой информативностью, однако малой чувствительностью. [1,2]. И поэтому оптимизация времени анализа данных полученных ЯМР спектров является одной из важнейших задач. Молекула стрихнина обладает типичной для алкалоидов гетероциклической структурой, а потому является хорошим модельным соединением для апробации предполагаемого подхода.

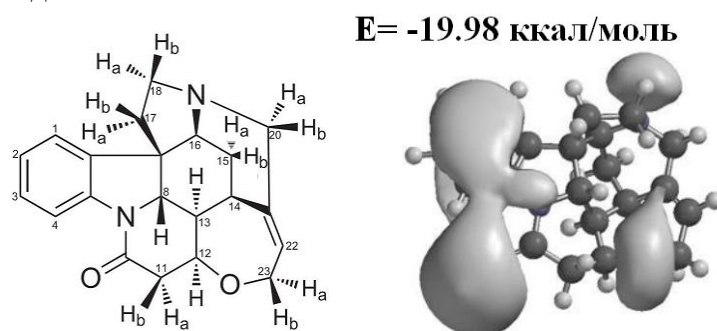


Рисунок 1. Химическая структура молекулы стрихнина (слева). Карта электростатического отрицательного энергетического потенциала молекулы стрихнина (справа).

В данной работе был предложен новый экспресс метод для отнесения линий спектров ЯМР, основанный на известном эффекте сольватационного химического сдвига, который обусловлен различными типами межмолекулярных неспецифических взаимодействий. Данный эффект проявляется в том, что при растворении одного и того же вещества в растворителях с различной полярностью, величины химических сдвигов некоторых групп могут существенно меняться. При помощи метода квантовохимического компьютерного моделирования была рассчитана карта электростатического отрицательного энергетического потенциала вокруг молекулы исследуемого соединения, а также был проведен ЯМР эксперимент для определения сигналов групп подверженных электрофильной атаке со стороны молекул растворителя.

В ходе исследований был проведен исчерпывающий анализ одно и двухмерных спектров ЯМР молекулы стрихнина в различно полярных растворителях. Был сформулирован экспресс подход к отнесению сигналов ЯМР для алкалоидов. Данный подход существенно ускоряет время анализа сигналов, а также в перспективе сможет позволить быстро оценить содержание алкалоидов в продуктах и в крови.

Работа выполнена 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. Kalmykov P.A., Khodov I.A., Klochkov V.V., Klyuev M.V. Russ. Chem. Bull. 2017. 66. 70 – 75.
2. Khodov I.A., Nikiforov M.Yu., Alper G.A., Mamardashvili G.M., Mamardashvili N.Zh., Koifman O.I., Journal of Molecular Structure, 2015, 426-430.