

Министерство образования и науки
Российской Федерации

Российский
химико-технологический
университет им. Д. И. Менделеева

Выпуск 190

АКТУАЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Сборник научных трудов

Москва 2018 г.

УДК 54.057:547.96:615.273.5 544.18+615.212 665.5(045)

ББК 35:35.66

А43

Актуальные аспекты химической технологии биологически актив-
А43 **ных веществ:** сб. научных трудов. Вып. 190 / под общ. ред.
А. Е. Коваленко. М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2018. 216 с.
ISBN 978-5-7237-1610-0

Сборник составлен из оригинальных тезисов докладов конференции теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области технологии получения новых биомедицинских препаратов, а также определения основных аналитических задач и методов определения наркотических, психотропных и новых допинговых средств в различных матрицах. Издание подготовлено на кафедре экспертизы в допинг- и наркоконтроле и кафедре технологии химико-фармацевтических и косметических средств Российского химико-технологического университета им. Д. И. Менделеева.

Предназначается для научных и инженерно-технических работников предприятий, преподавателей вузов, студентов и аспирантов.

УДК 54.057:547.96:615.273.5 544.18+615.212 665.5(045)

ББК 35:35.66

Редакционная коллегия:

Коваленко Алексей Евгеньевич – канд. техн. наук, заведующий кафедрой экспертизы в допинг- и наркоконтроле РХТУ им. Д. И. Менделеева

Пенкина Юлия Александровна – канд. техн. наук, доцент кафедры технологии химико-фармацевтических и косметических средств РХТУ им. Д. И. Менделеева

Смагина Вероника Валерьевна – ассистент кафедры технологии химико-фармацевтических и косметических средств РХТУ им. Д. И. Менделеева

Научное издание

**АКТУАЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ**

Сборник научных трудов

Выпуск 190

Текст репродуцирован с оригиналов авторов

Формат 60×84 1/16.

Усл. печ. л. 12,56. Уч.-изд. л. 20,6. Тираж 150 экз.

Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева

Издательский центр

Адрес университета и издательского центра:

125047 Москва, Миусская пл., д. 9

ISBN 978-5-7237-1610-0

© Российский химико-технологический
университет им. Д. И. Менделеева, 2018

веществ приводит к увеличению интенсивности флуоресценции Xe_6 . Наибольшее увеличение интенсивности флуоресценции наблюдается при добавлении в раствор Xe_6 поли-*N*-винилпирролидона.

Полученные из спектров флуоресценции значения квантового выхода флуоресценции φ_k для систем Xe_6 -ПВП ($\varphi_k=0.164$), Xe_6 -БСА ($\varphi_k = 0.155$) и Xe_6 -ПЭГ ($\varphi_k=0.16$) согласуются с данными по спектрам поглощения и подтверждают гипотезу о последовательном разрушении агрегатов Xe_6 и появлении фракции дезагрегированных молекул Xe_6 . Низкое значение $\varphi_k = 0.12$ для Xe_6 - ТХ-100, возможно, связано с частичной агрегацией красителя и образованием комплекса другого типа, характеризующегося низким квантовым выходом флуоресценции. Система Xe_6 -хитозан характеризуется агрегацией красителя в растворе, что уменьшает фотохимическую активность ФС.

Сделанные в работе выводы могут быть полезными при разработке метода управляемой агрегации ФС и создании лекарственных препаратов для ФДТ и диагностики, прогнозировании их фотодинамической активности и тестировании *in vivo* эффективных ФС.

ЛИТЕРАТУРА

1. Динамика и эффективность фотосенсибилизированного образования синглетного кислорода хлорином e_6 : влияние рН раствора и поливинилпирролидона / М. В. Пархоц [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 107. № 6. С. 1026 – 1032.

2. Шляхтин С. В., Трухачева Т. В. Возможности и перспективы использования производных хлорофилла для создания эффективных и безопасных фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии // Вестник фармации. 2010. Т. 2. № 48. С. 1 – 20.

УДК 544.021

К. В. Белов¹, И. А. Ходов^{2,3}, М. Г. Киселев²

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

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

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

ДВУМЕРНАЯ ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ В КАЧЕСТВЕННОМ АНАЛИЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ПРИМЕРЕ АЛКАЛОИДОВ

Данное исследование посвящено описанию возможностей ЯМР спектроскопии применительно к качественному анализу биологически активных соединений на примере алкалоидов. Были обсуждены результаты одно- и двумерной спектроскопии ЯМР (^1H , ^{13}C , ^1H - ^{13}C

HMBC, ^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^1H TOCSY) для модельной молекулы стрихнина в различных растворителях (бензол, хлороформ, диметилсульфоксид).

Значение алкалоидов для жизнедеятельности организмов до сих пор недостаточно изучено. Алкалоиды играют важную роль в защите растений от внешних воздействий, например, поедания животными и насекомыми. Кроме того, некоторые алкалоиды являются важными нейромедиаторами у животных, а также определяют рост растений. Поэтому становится необходимым количественная оценка содержания алкалоидов в исследуемых субстанциях. Данная информация, безусловно, поможет пролить свет на возможные биологические механизмы, а также установить закономерности влияния алкалоидов на процессы жизнедеятельности организмов.

В настоящей работе основным методом качественной оценки содержания алкалоидов была выбрана ЯМР спектроскопия. Данный подход позволяет не только решать задачи по определению количества содержания вещества в исследуемой системе, но и устанавливать химический состав и структуру биологически активных веществ, причём это является весьма эффективным для сложных систем, таких как алкалоиды (аймалин, винкамин, стрихнин и др.). В данной работе показаны возможности ЯМР спектроскопии для решения такого рода задач, рассмотрены одномерные методы ^1H и ^{13}C ЯМР спектроскопии, а также современные двумерные гомо- и гетероядерные методы, такие как: ^1H - ^{13}C HSQC, ^1H - ^{13}C HMBC, ^1H - ^1H TOCSY.

Было показано что одно- и двумерные методы являются не только взаимозаменяемыми, но и существенно дополняют друг друга в плане информативности. Были рассмотрены достоинства и недостатки использованных подходов применительно к качественному анализу биологически активных веществ на модельном соединении (стрихнин в различных растворителях).

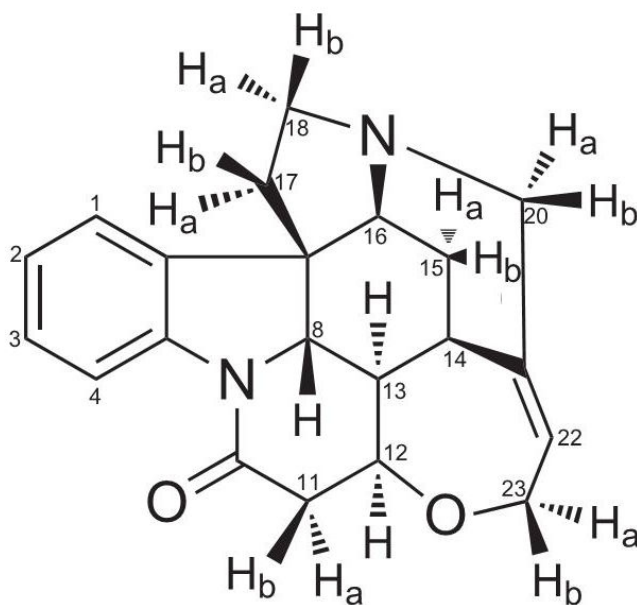


Рисунок 1 – Химическая структура молекулы стрихнина.

Таким образом, были получены спектры ЯМР стрихнина в бензоле, хлороформе и диметилсульфоксиде, которые позволили однозначно определить положение сигналов характеристических групп, меняющихся от растворителя к растворителю.

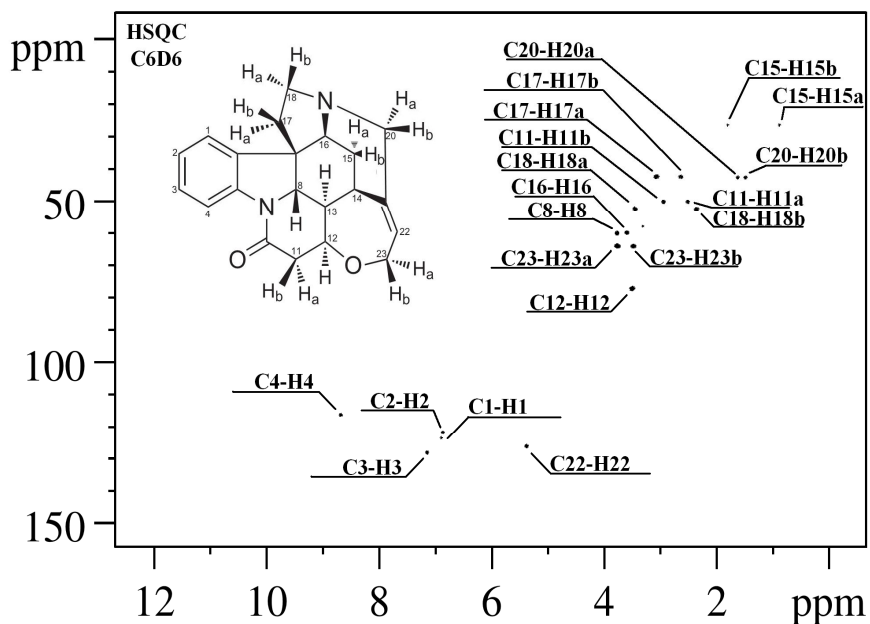


Рисунок 2 – Спектр 1H-13C HSQC стрихнина в бензоле.

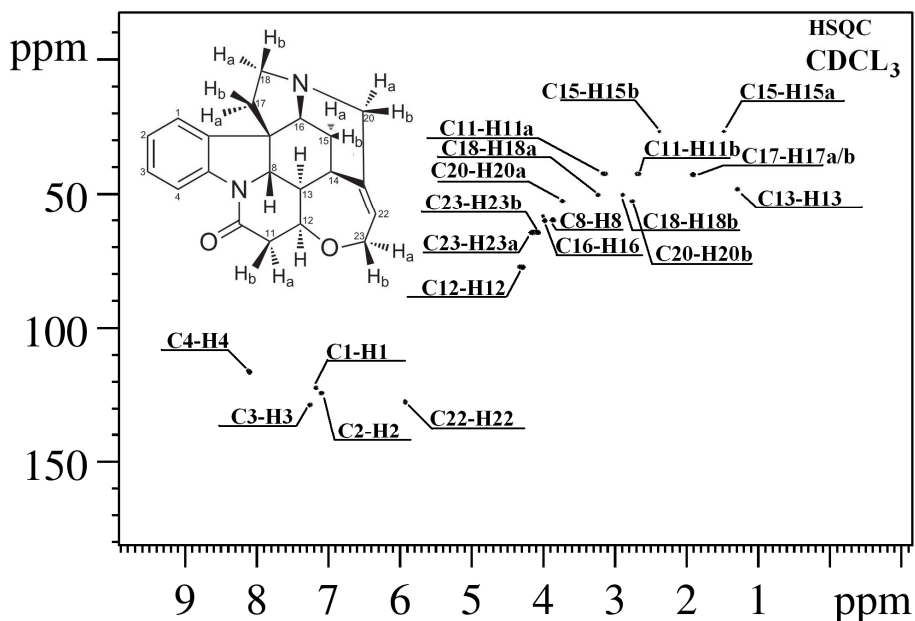


Рисунок 3 – Спектр 1H-13C HSQC стрихнина в хлороформе

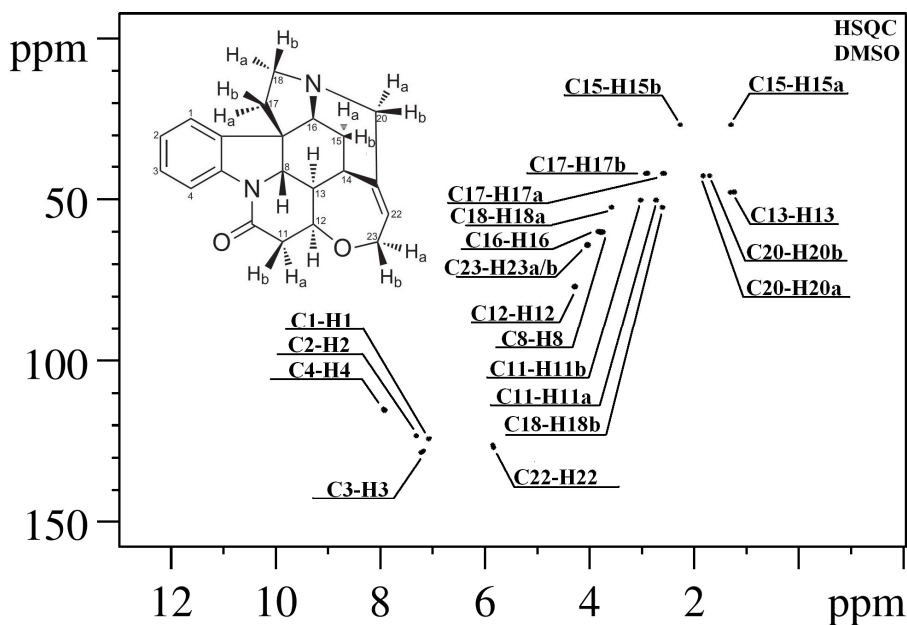


Рисунок 4 – Спектр ^1H - ^{13}C HSQC стрихнина в диметилсульфоксиде

Работа выполнена за счёт 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. Kalmykov P. A., Khodov I. A., Klochkov V. V., Klyuev M. V. Theoretical and experimental study of imine-enamine tautomerism of condensation products of propanal with 4-aminobenzoic acid in ethanol // *Russ. Chem. Bull.* 2017. V. 66. Iss. 1. P. 70 – 75.
2. The importance of suppressing spin diffusion effects in the accurate determination of the spatial structure of a flexible molecule by nuclear overhauser effect spectroscopy / I. A. Khodov, S. V. Efimov, V. V. Klochkov, L. A. E. Batista de Carvalho, M. G. Kiselev // *J. Mol. Struct.* 2016. V. 1106. P. 373 – 381.
3. Comment on "conformational analysis of small organic molecules using NOE and RDC data: A discussion of strychnine and α -methylene- γ -butyrolactone" / I. A. Khodov, M. G. Kiselev, S. V. Efimov, V. V. Klochkov // *J. Magn. Reson.* 2016. V. 266. P. 67 – 68.