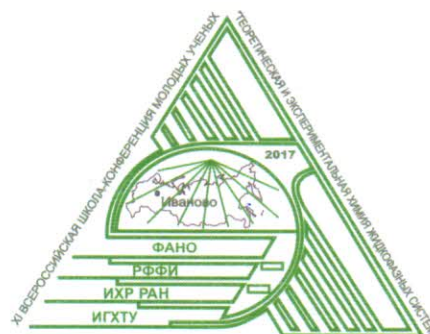


**XI ВСЕРОССИЙСКАЯ
ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**



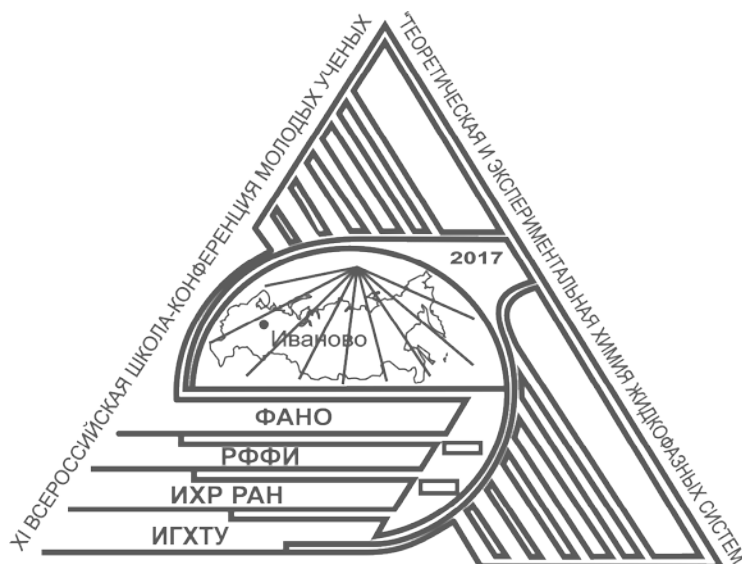
**“ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ
ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ”
(КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)**

30 октября - 4 ноября 2017 г.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

ИВАНОВО

**Федеральное агентство научных организаций России
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
"Ивановский государственный химико-технологический университет"**



**XI ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА - КОНФЕРЕНЦИЯ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ
"ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ
ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ"
(КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)**

**30 октября - 4 ноября 2017 г.
Иваново**

hydration shell of the $-\text{CO}_2^-$ group. Moreover, the developed methodology for the theoretical analysis of the ATR-IR spectrum could serve as a template for future IR/Raman studies of the strong interaction of the $-\text{CO}_2^-$ group with steric hindrance of bioactive molecules with the water molecules in dilute aqueous solutions.

HEME VS. SIROHEME MODELS OF THE SULFITE REDUCTASE ACTIVE SITE

Adrian Brânzanic¹, Ulf Ryde², Radu Silaghi-Dumitrescu¹

¹ Department of Chemistry, Babeş-Bolyai University, str. Arany Janos 11., Cluj-Napoca, Romania

² Department of Theoretical Chemistry, Lund University, Lund, Sweden

Theoretical investigations are carried out on bioinorganic models derived from the active site of sulfite reductase in which differences in terms of energetics, bonding, spin coupling and electron transfer are emphasized between the biologically occurring siroheme- $[\text{Fe}_4\text{S}_4]$ system and the fictive heme- $[\text{Fe}_4\text{S}_4]$ system in order to give more insights on nature's preferences for the former system over the latter.

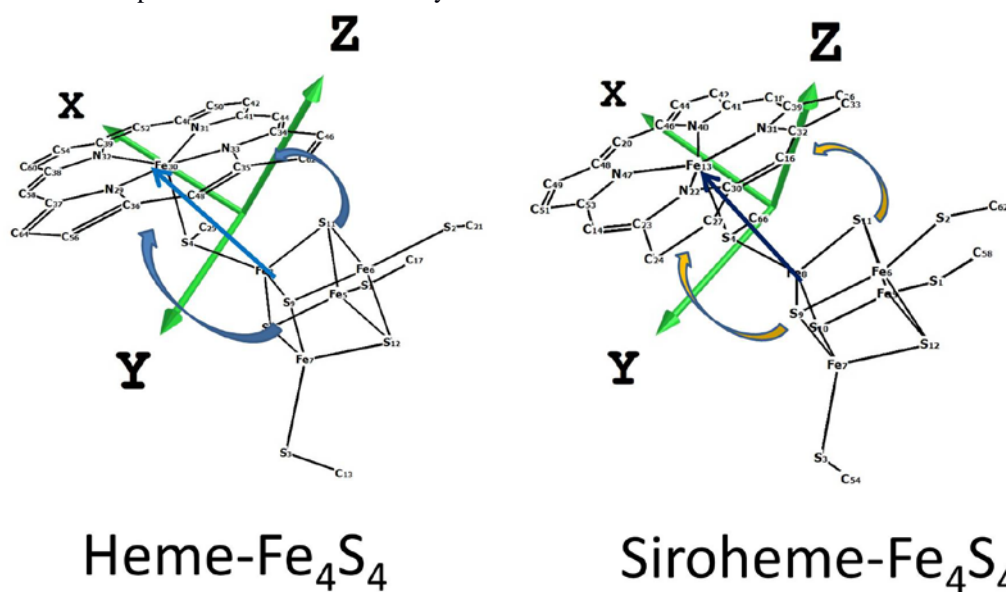


Fig.1. Possible electron route transfers from cubane to heme/siroheme.

The intensity of colours emphasize the increase of electron tunneling transmission through the cysteinic sulfur route and its decrease over the other possible routes when siroheme is connected to the cluster instead of heme.

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ВЕЛИЧИНЫ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ПРИ УСТАНОВЛЕНИИ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АЛКОЛОИДОВ НА ПРИМЕРЕ СТРИХНИНА

Белов К.В.¹, Ходов И.А.^{2,3}

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

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

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

iakh@isc-ras.ru

Так как большинство алкалоидов являются биологически активными веществами, используемыми во многих сферах человеческой жизни (медицина, фармацевтика, и т.д.), установление их пространственной структуры, является актуальной задачей современной химии. Среди всех алкалоидов наиболее сложной и интересной структурой обладает молекула стрихнина, в связи с этим она была выбрана в качестве объекта исследования.

Для достижения данной цели, были использованы современные методы 1D и 2D ЯМР спектроскопии. В частности были применены гомо- (TOCSY) и гетероядерные (HMBC, HSQC) виды спектроскопии. Данная методика позволила однозначно произвести отнесение сигналов в спектрах ^1H и ^{13}C с химической структурой стрихнина в разных органических растворителях, как полярных, так и не

Секция 1

полярных. Таким образом, были получены величины химических сдвигов ЯМР ^1H и ^{13}C для стрихнина в ДМСО, хлороформе и бензоле. Анализ данных, позволил установить влияние растворителя на величину химического сдвига и определить причины его обуславливающие.

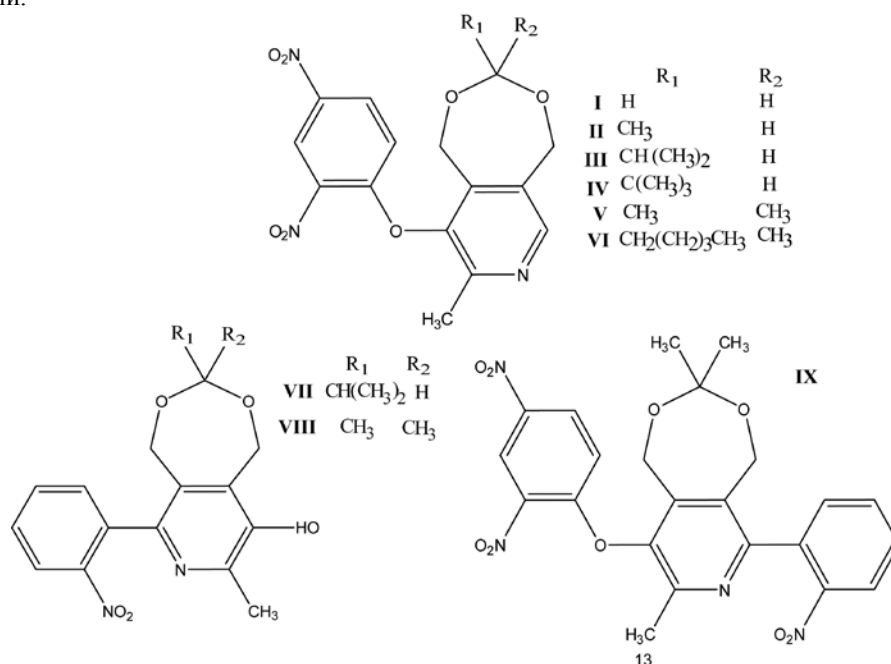
Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты № 16-03-00640 и 16-53-150007) и гранта президента РФ по поддержке молодых ученых (МК-9048.2016.3).

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА МЕТОДАМИ ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ

Рахматуллин И.З., Галиуллина Л.Ф., Гарипов М.Р., Стрельник А.Д., Штырлин Ю.Г., Клочков В.В.
Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань
IZRahmatullin@kpfu.ru

На сегодняшний день техника ядерного магнитного резонанса (ЯМР) является одним из самых мощных инструментов в области конформационного анализа, изучающего стереодинамические процессы. В этом смысле, семичленные гетероциклы являются интересными объектами для ЯМР исследований благодаря широкому диапазону различных структурных видов этих молекул. Кислородсодержащие гетероциклические соединения входят в состав большого числа сложных молекул, представляющих практически полезный интерес для различных отраслей науки, техники и медицины в качестве лазерных преобразователей, новых лекарственных препаратов, биологически активных соединений, высокоэффективных материалов.

Ранее проведенные исследования выявили некоторые корреляции между стерической структурой и реакционной способностью подобных соединений [1]. Проведены исследования внутримолекулярных конформационных процессов, происходящих при комнатной температуре в девяти вновь синтезированных производных пиридоксина (**I-IX**) в растворе, методом динамической ЯМР спектроскопии.



Для всех рассматриваемых соединений методом анализа полной формы линии сигналов спектра ЯМР ^1H в растворе при разных температурах (183-323 К) были определены основные конформационные процессы (вращения вокруг С-О и С-С связей, кресло-твист и твист-твист взаимопревращения семичленного цикла) и оценены их энергии активации.

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.

1. A.S. Petukhov, A.D. Strel'nik, V.Yu. Fedorenko, I.A. Litvinov, O.A. Lodochnikova, Yu.G. Shtyrlin, E.N. Klimovitskii, *Russian journal of general chemistry*, 2007, **77**(8), 1416-1421.