ЭКСПРЕСС-МЕТОД КАЧЕСТВЕННОЙ ОЦЕНКИ СОДЕРЖАНИЯ АЛКАЛОИДОВ В ОРГАНИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЯХ

Белов К. В.[1,2], Ефимов С. В.[3], Ходов И. А.[1,3]
[1]Институт химии растворов им. Г. А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия
[2]Ивановский Государственный Университет, Иваново, Россия
[3]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 ^{1}H и ^{13}C [5].

Анализ полученных результатов позволил сформулировать суть предлагаемого метода, которая состоит в получении быстрого отнесения сигналов спектра ^{1}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 № RFMEFI61618X0097 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.