



ЭФФЕКТ РАСТВОРИТЕЛЯ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЖНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ



Соборнова В.В.^{1,2}, Белов К.В.¹, Киселев М.Г.¹, Ходов И.А.¹

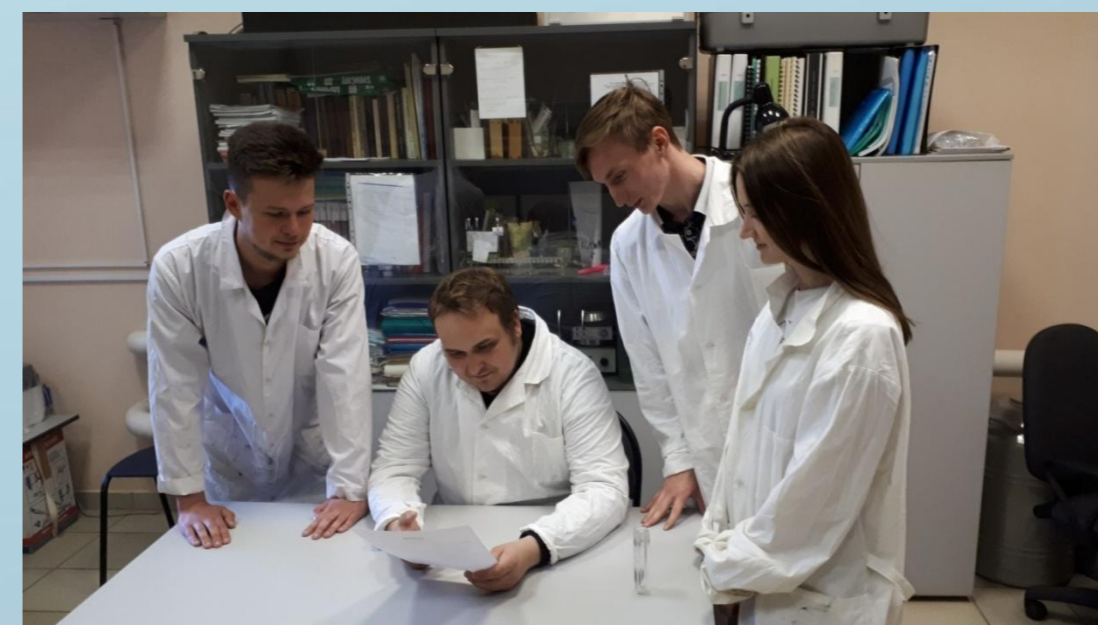
¹*G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russian Federation*

²*Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, Russian Federation*

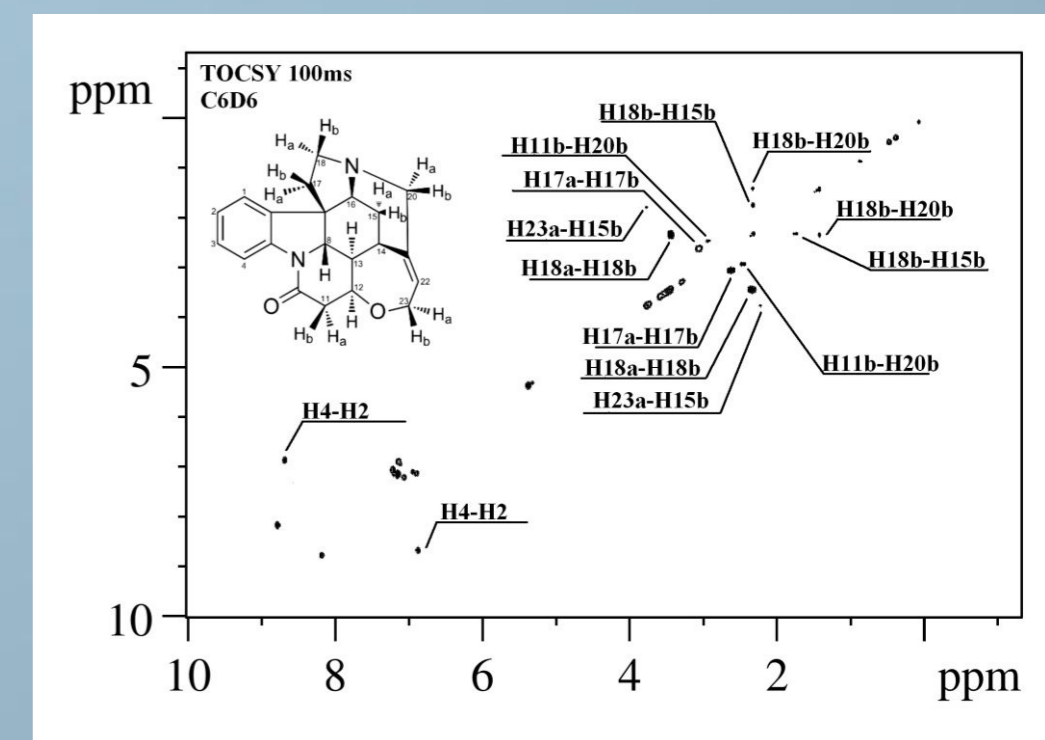
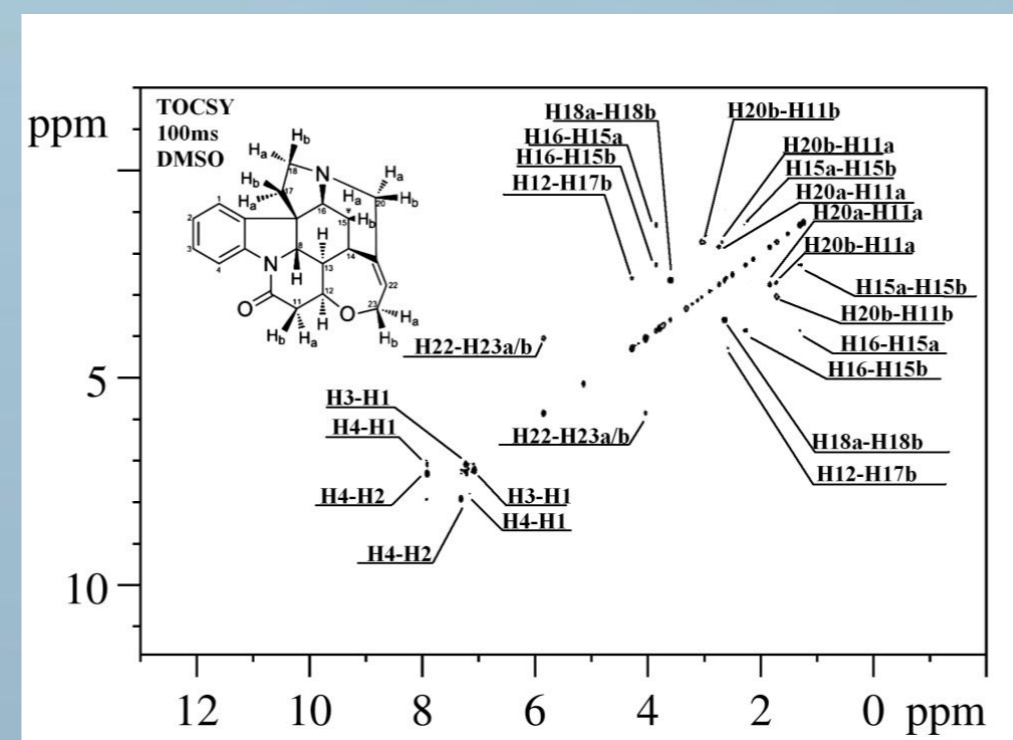
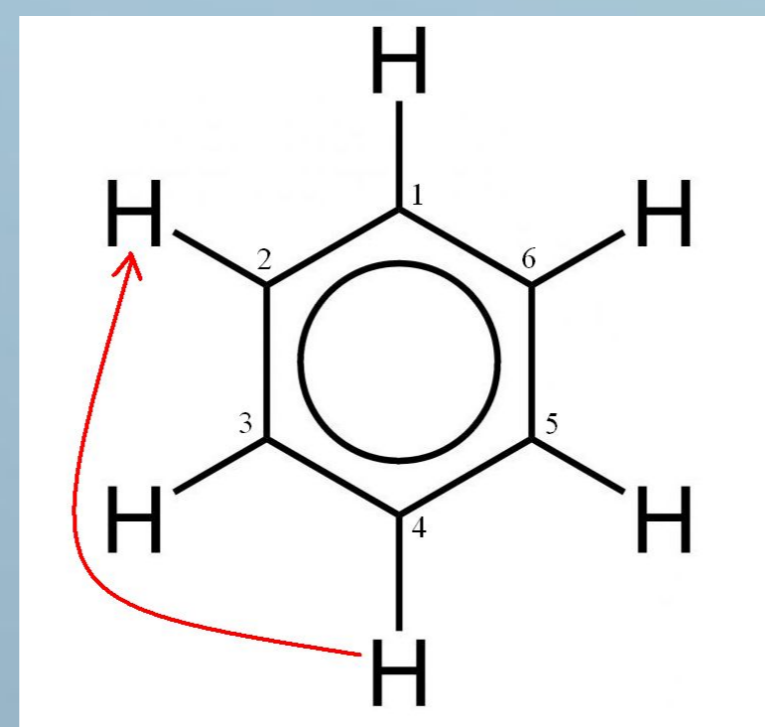
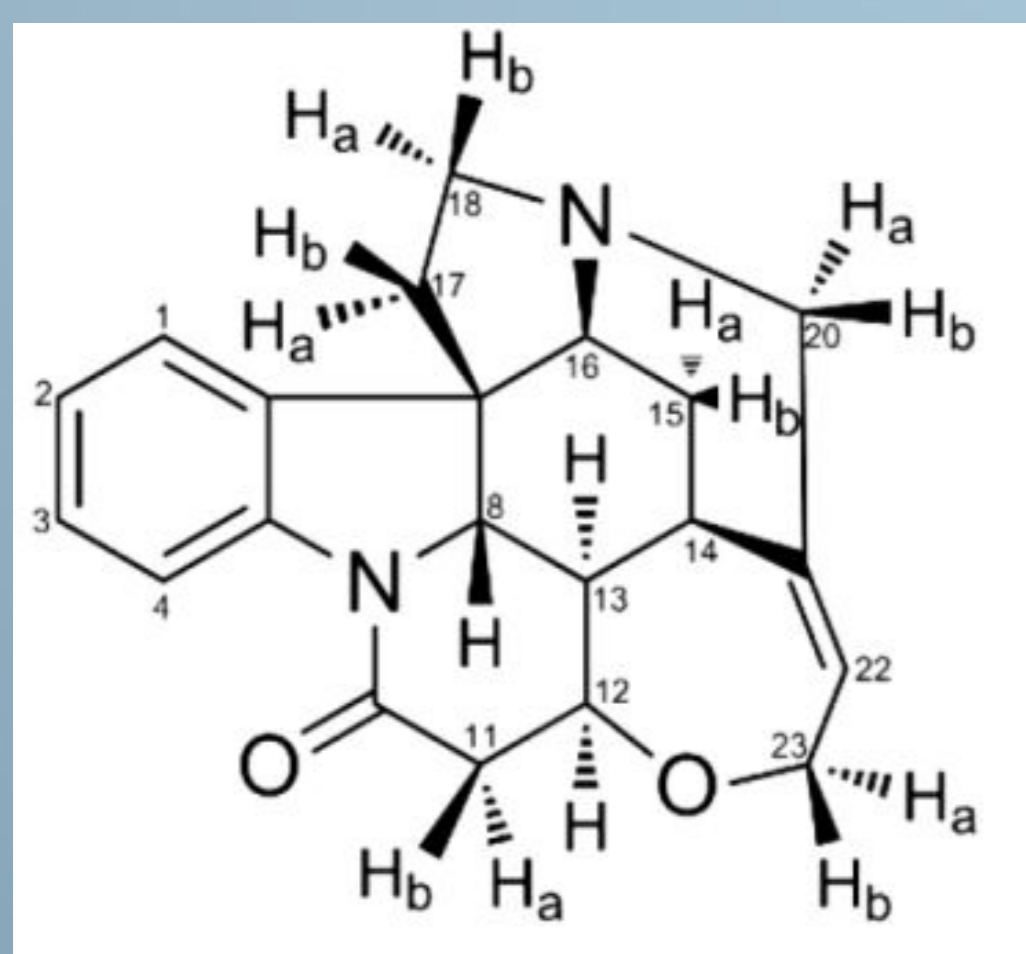
e-mail: iakh@isc-ras.ru



Сверхпроводящий магнит спектрометра "AVANCE III TM" - 500" с B0 = 11,7 Тл

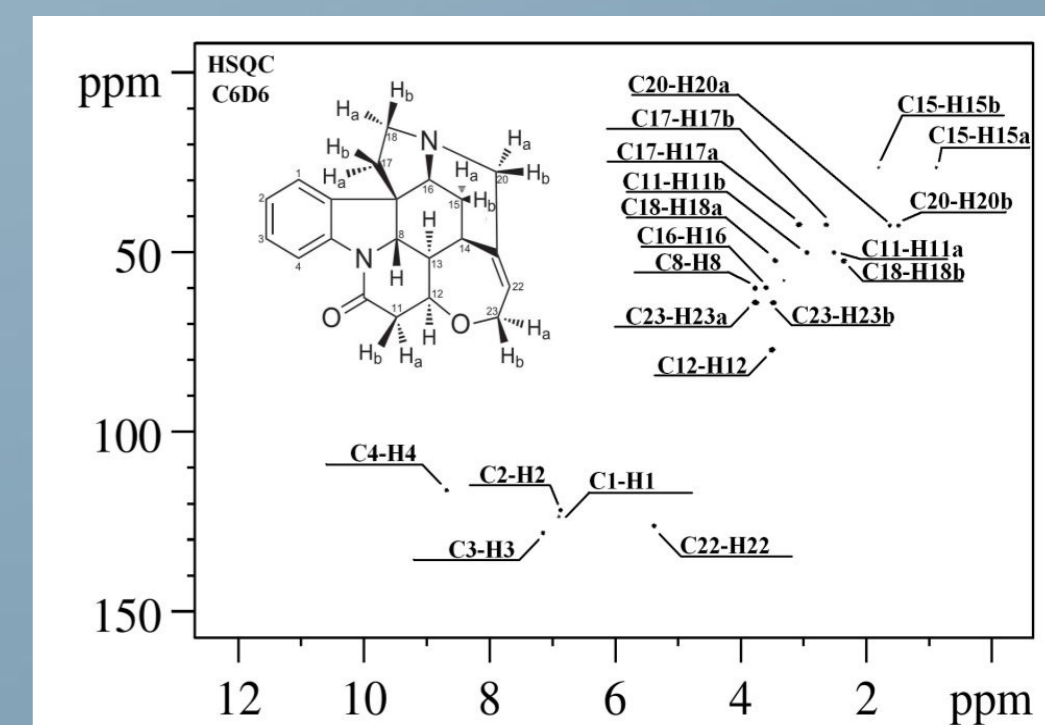
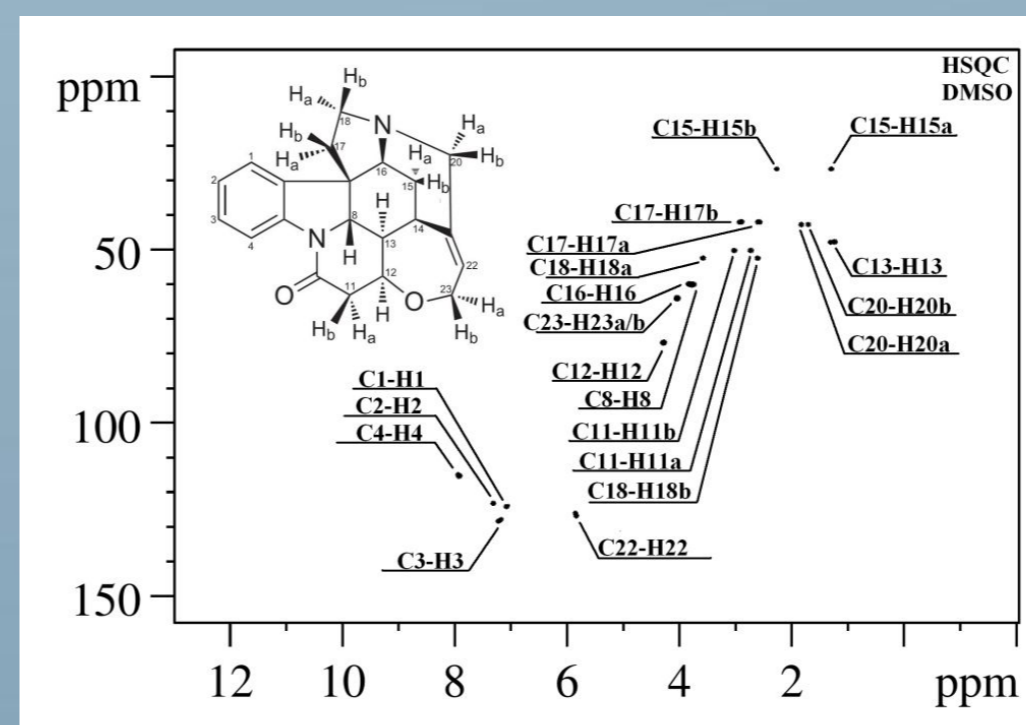
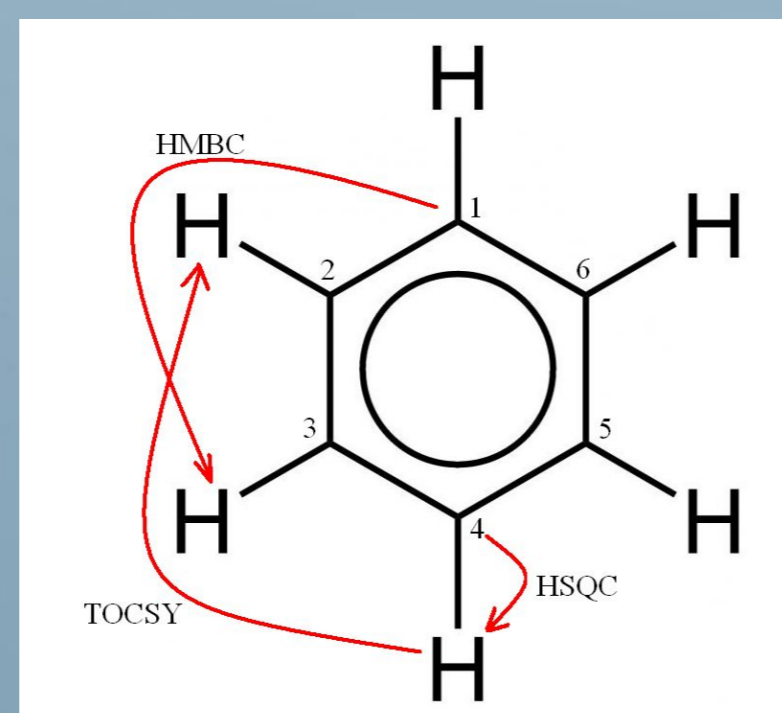
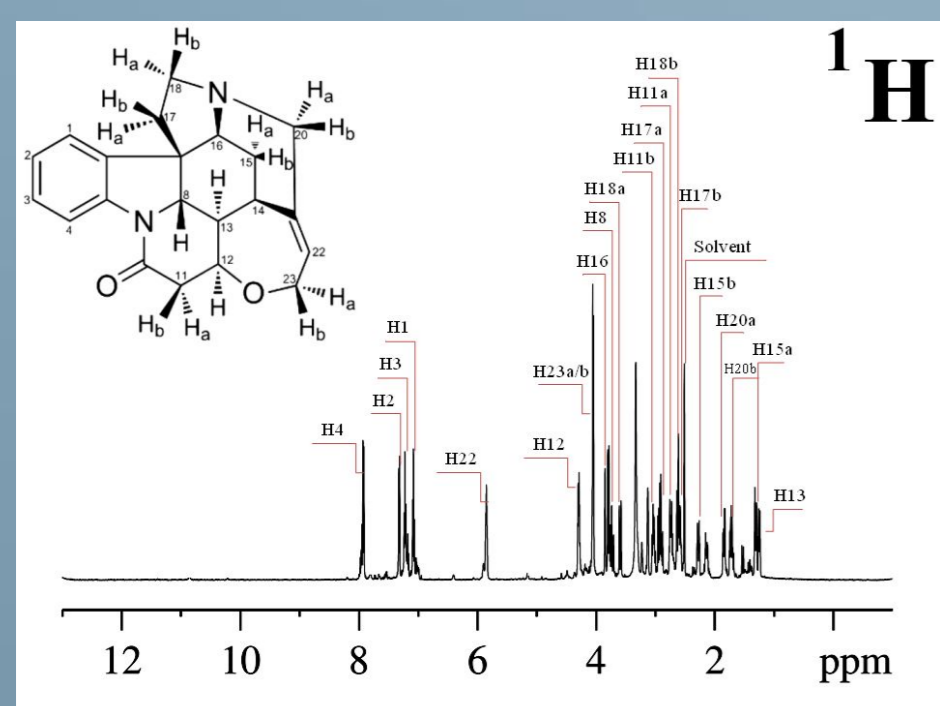


Research Group - Fluid State NMR

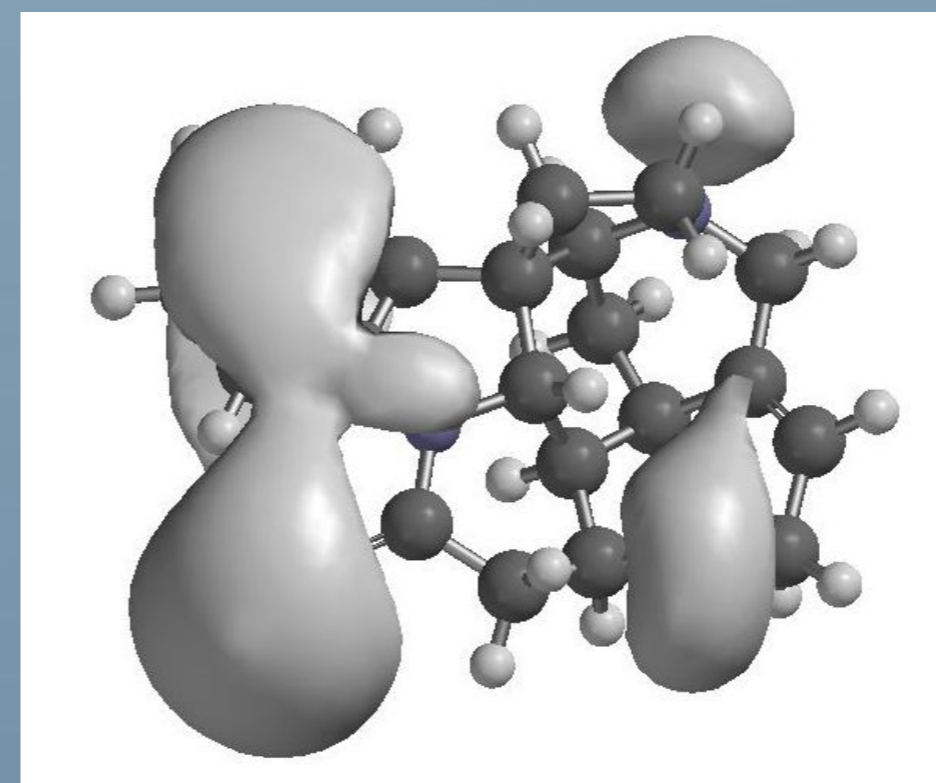
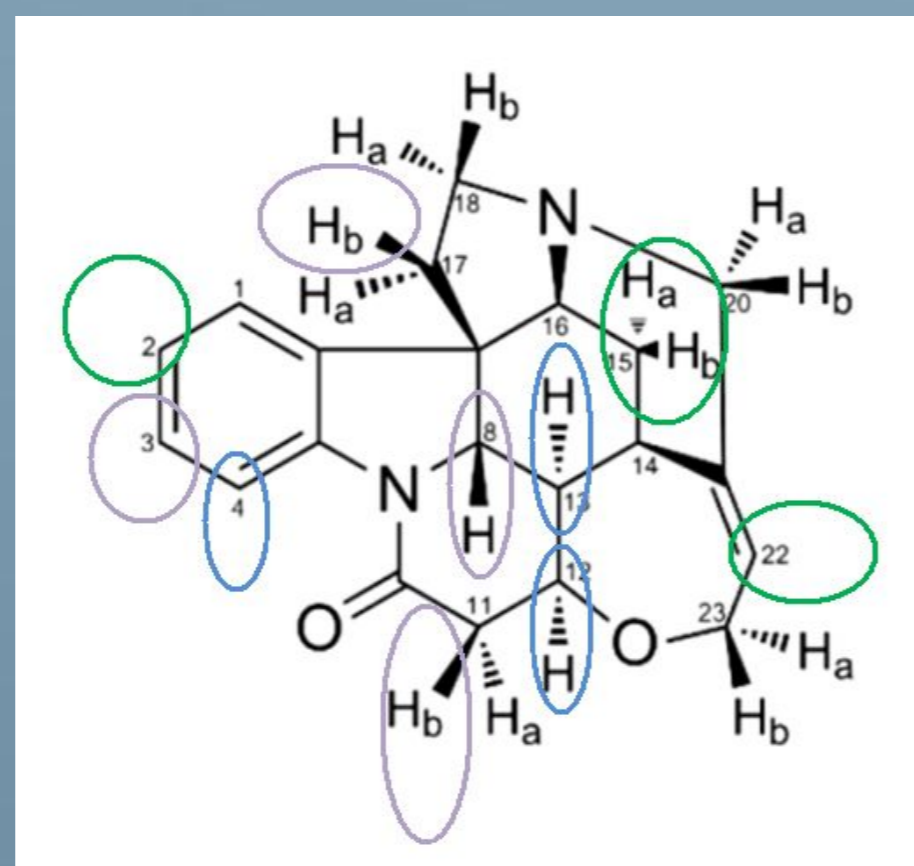
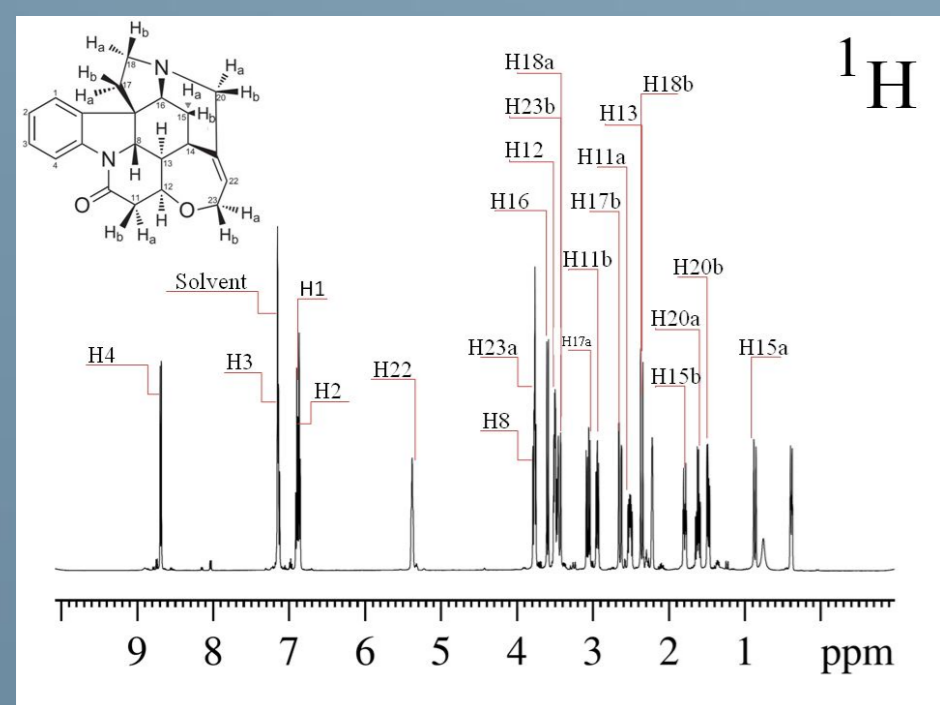


Спектроскопия TOSY (Total Correlation Spectroscopy - Корреляционная спектроскопия)

Структура молекулы стрихнина



Спектр HSQC стрихнина в ДМСО-d1 и бензоле-d1



Спектр 1H стрихнина в ДМСО-d1 и бензоле-d1

- -Самое значительное расхождение в величинах химического сдвига
- -Среднее расхождение в величинах химического сдвига
- -Расхождение в значениях химического сдвига не значительно

Belov K. V. The spatial structure of macroheterocyclic compounds, as a key factor affecting the course of the macrocyclization reaction / Belov K. V., Ereemeev I.E., Sobornova V. V., Klochkov V. V., Khodov I.A. // Macroheterocycles – 2020. – Т. 13 – № 1 – С.44–54.

Электростатическая отрицательная потенциальная поверхность молекулы стрихнина

assign 1H	C6D6	DMCO	Δ
H4	8,68	7,91	0,77
H3	7,14	7,21	-0,07
H1	6,89	7,07	-0,18
H2	6,86	7,3	-0,44
H22	5,37	5,83	-0,46
H12	3,51	4,28	-0,77
H23a	3,76	4,04	-0,28
H16	3,59	3,83	-0,24
H8	3,77	3,77	0
H20a	1,62	1,82	-0,2
H18a	3,45	3,57	-0,12
H11b	2,94	3,02	-0,08
H18b	2,36	2,6	-0,24
H20b	1,49	1,7	-0,21
H11a	2,51	2,72	-0,21
H15b	1,8	2,26	-0,46
H17a	3,07	2,91	0,16
H17b	2,62	2,58	0,04
H15a	0,88	1,29	-0,41
H13	2,39	1,23	1,16

Таблица сравнения констант химического сдвига

Были экспериментально выявлены причины возникновения сольватационных эффектов, проявляющихся в виде изменений в величинах химических сдвигов, возникающих в спектрах ЯМР при смене растворителей. Установлено, что одним из важнейших параметров неоднозначности химических сдвигов в одномерных спектрах ЯМР, является полярность растворителя, данное предположение было доказано посредством проведения и анализа ЯМР эксперимента с использованием различных полярных и неполярных растворителей.