# 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]*

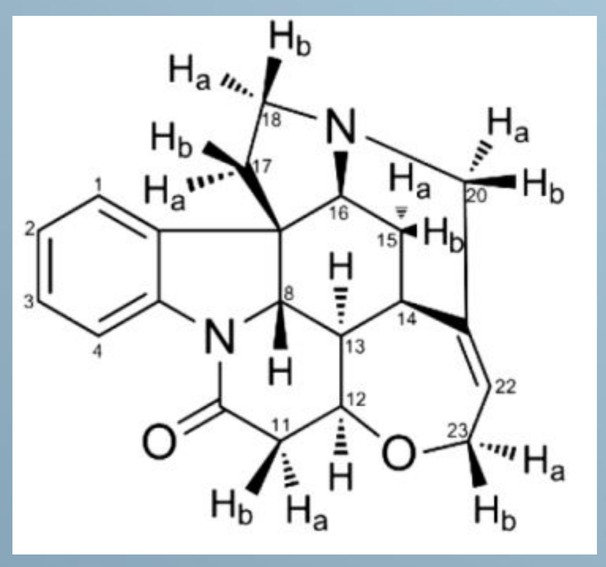
*[1]G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Ivanovo, Russian Federation*

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

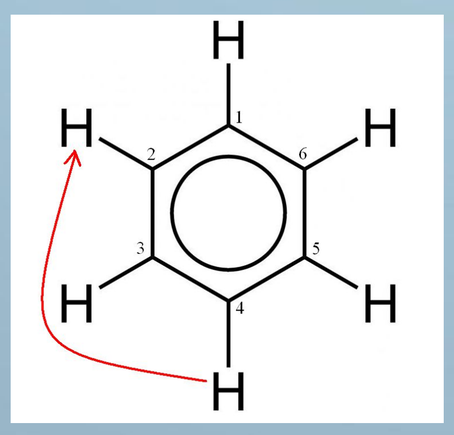
*e-mail: iakh@isc-ras.ru*

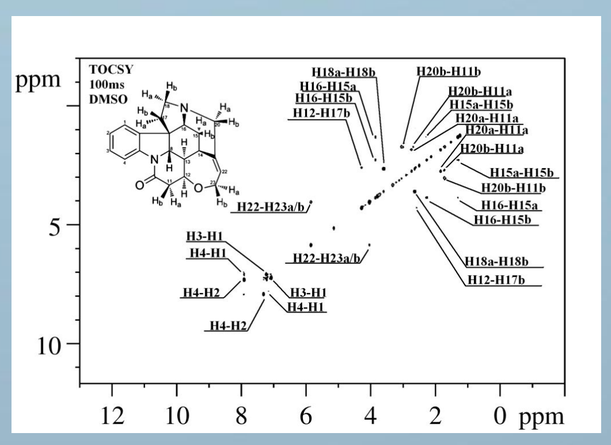
*Сверхпроводящий магнит спектрометра "AVANCE IIITM - 500" с B0 =11,7 Тл*

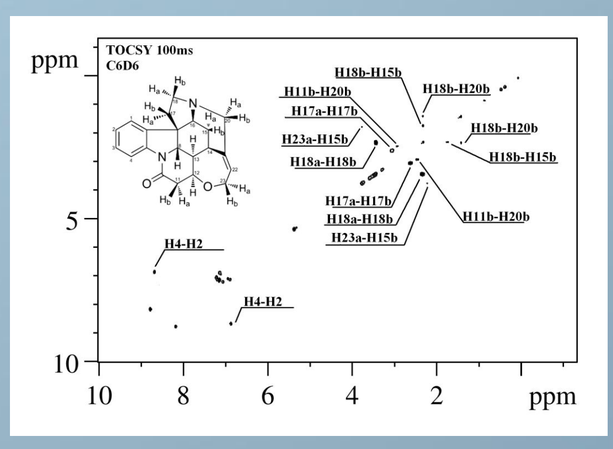
*Research Group - Fluid State NMR*



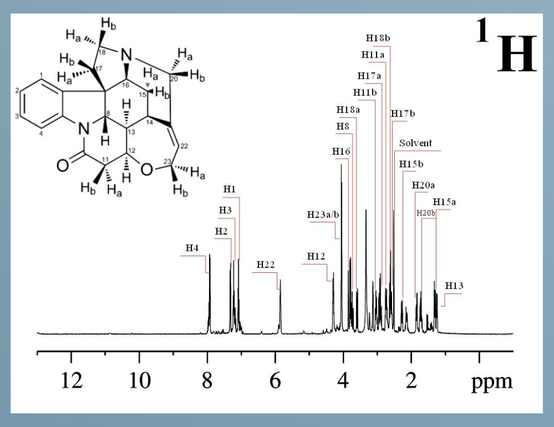

*Структура молекулы стрихнина*



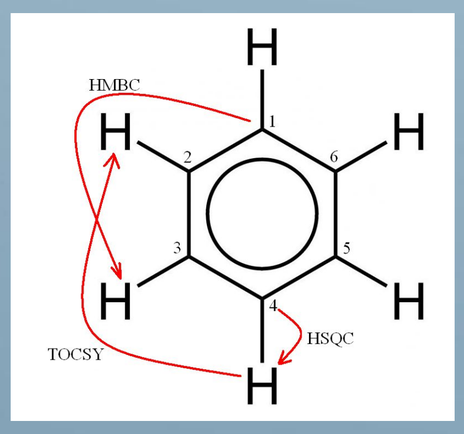



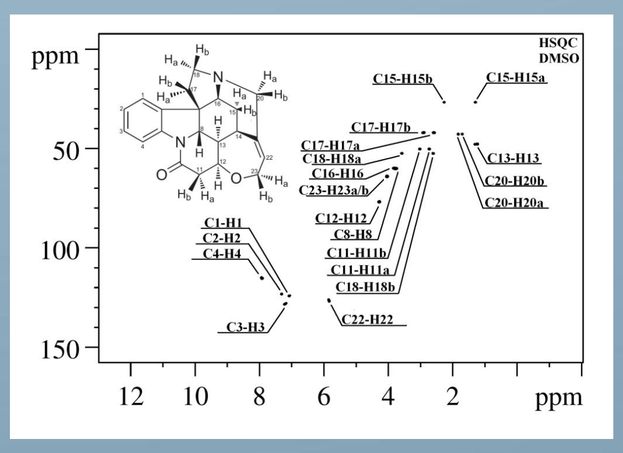



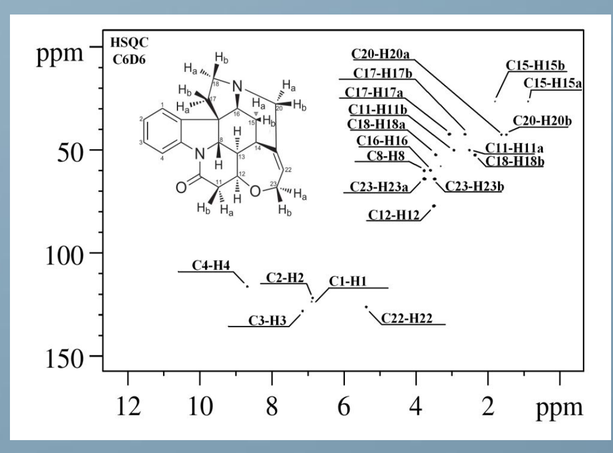

Спектроскопия TOCSY (TOtal Correlation SpectroscopY - Корреляционная спектроскопия)



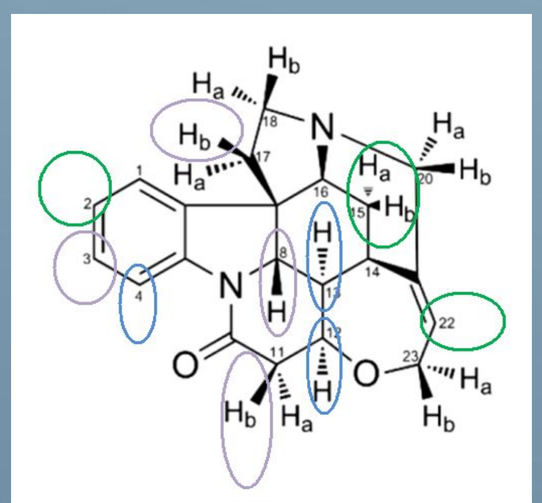

*Спектр 1H стрихнина в ДМСО-д1 и бензоле-д1*

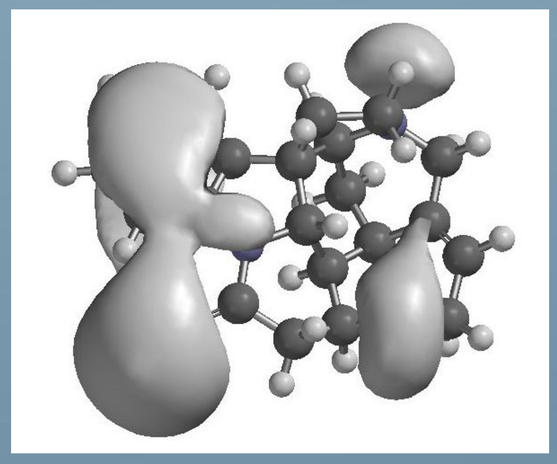



*СпектрHSQC стрихнина в ДМСО-д1 и бензоле-д1*

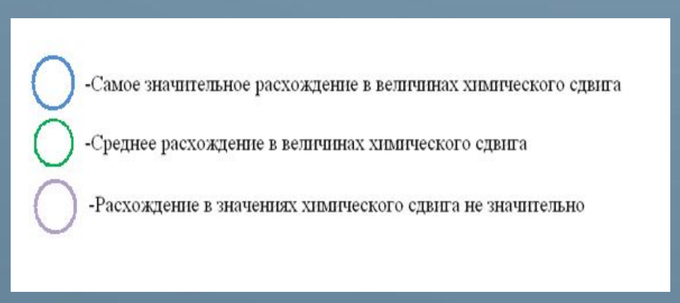


*Электростатическая отрицательная потенциальная поверхность молекулы стрихнина*

| assig 1H | C6D6 | ДМСО | 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*




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

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.