



Экспериментальное и квантово- химическое исследование спектральных свойств полициклических азотсодержащих соединений

Потапов Андрей Сергеевич

доктор химических наук, ведущий научный сотрудник

Лаборатория металл-органических координационных полимеров

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН

28 ноября 2019 г.

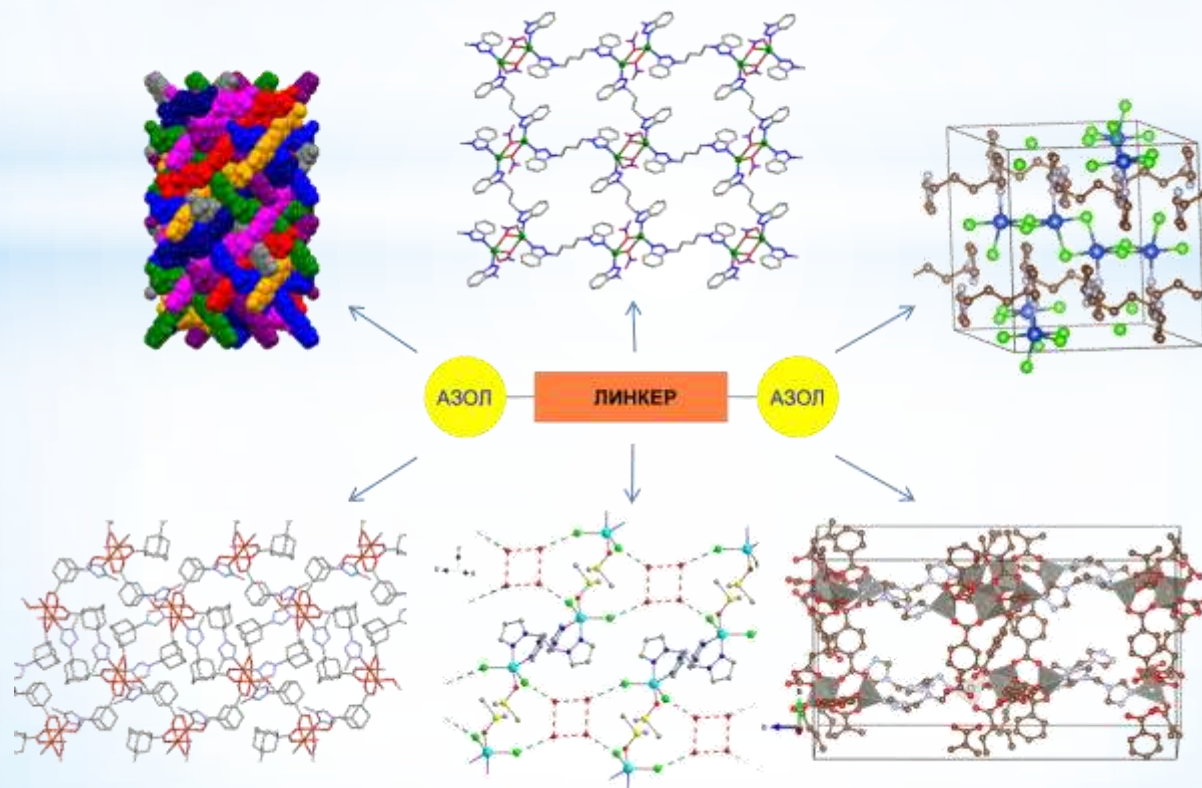
Потапов Андрей Сергеевич

доктор химических наук, ведущий научный сотрудник

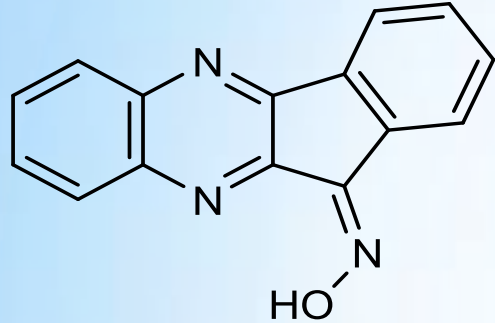
Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (г. Барнаул), кафедра химической технологии, 2004-2014 гг.

Томский политехнический университет, кафедра биотехнологии и органической химии (НОЦ Н.М. Кижнера), 2014-2019 гг.

Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, лаборатория металл-органических координационных полимеров, 2019-н.в.

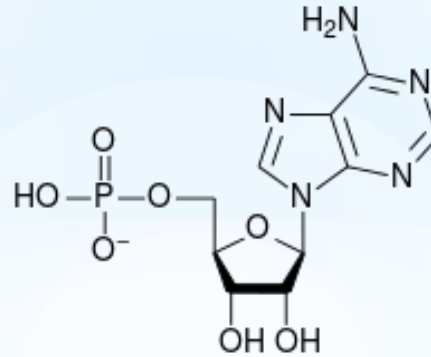


Синтез и установление структуры новых ингибиторов JNK3 киназы

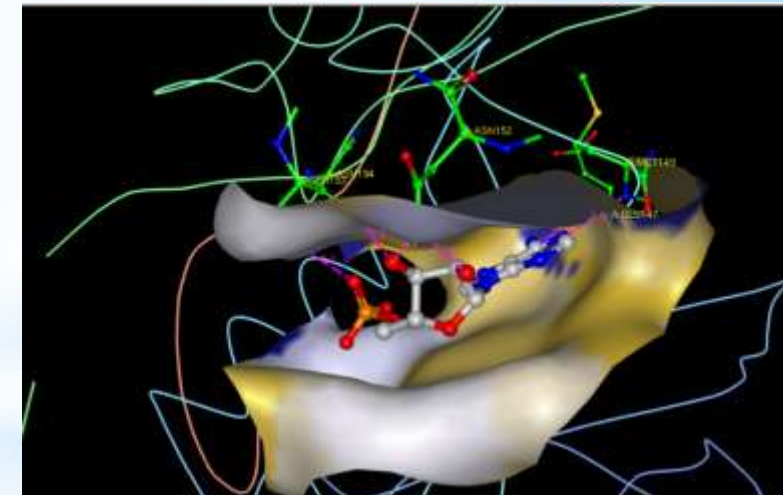
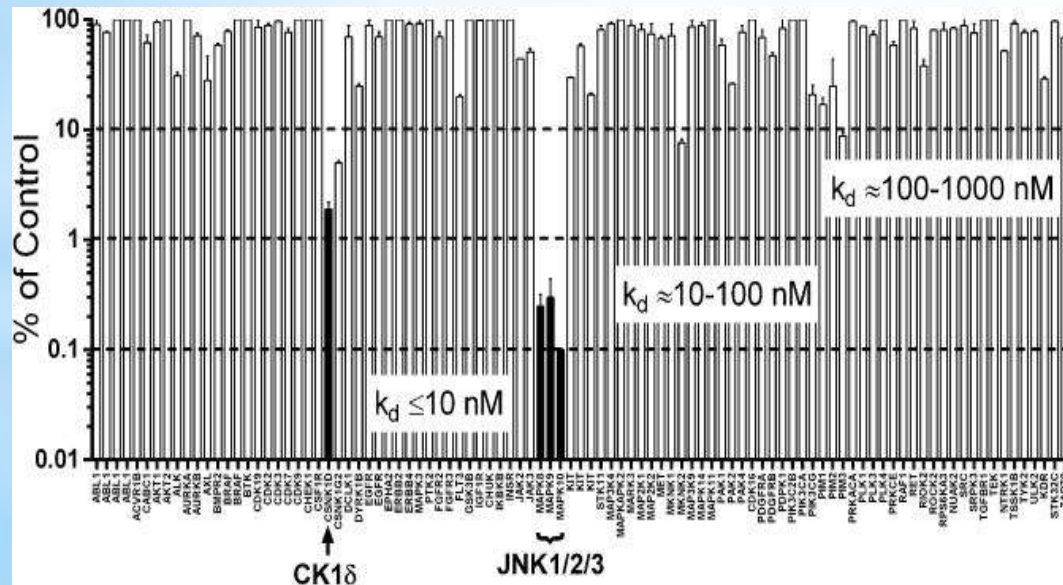
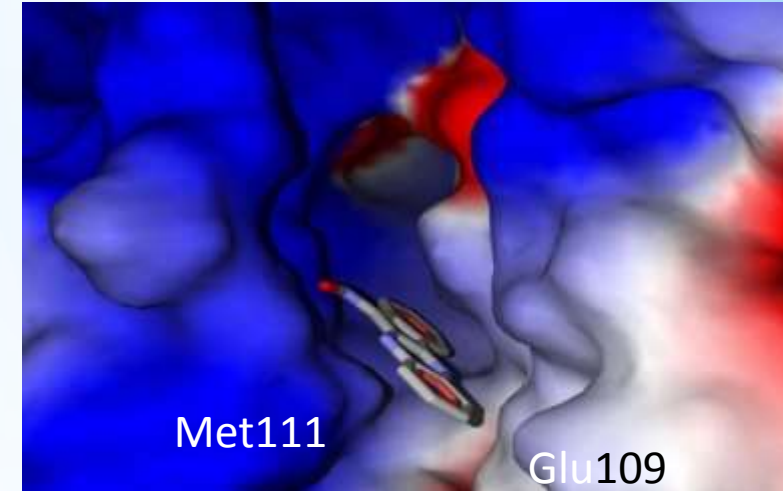


11H-индено[1,2-б]хиноксалин-11-он оксим (IQ-1)

- плоская молекула
- доноры и акцепторы водородной связи

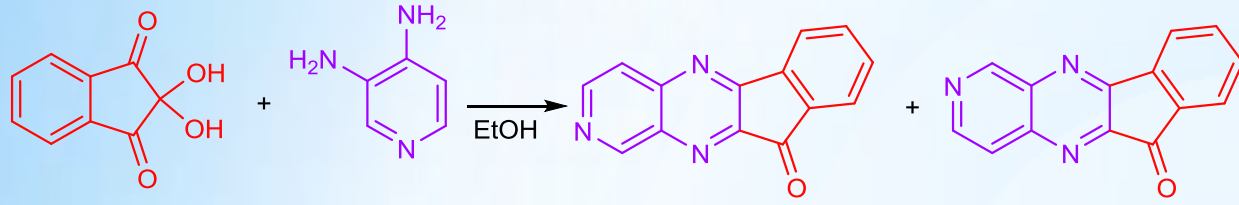


Нативный лиганд JNK3 - аденозинмонофосфат



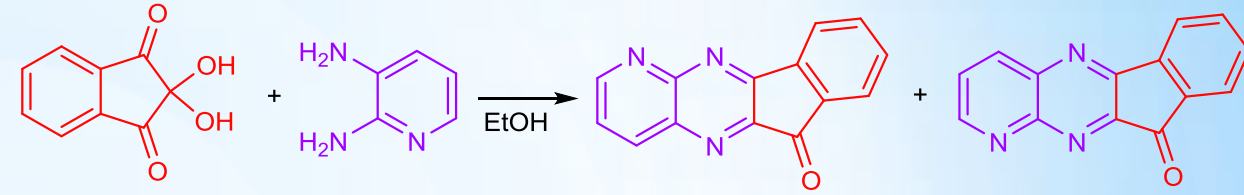
Ингибирование JNK3 снижает долю поврежденных в результате окислительного стресса клеток

Синтез и установление структуры новых ингибиторов JNK3 киназы



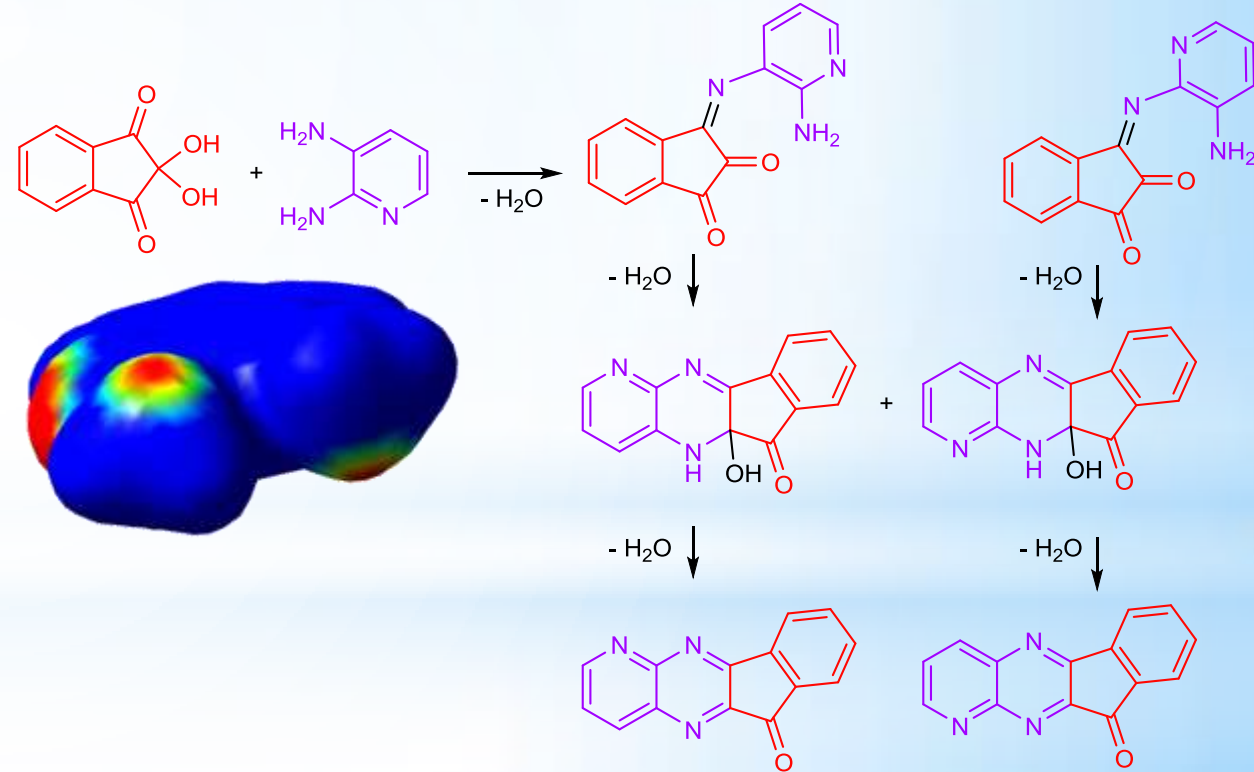
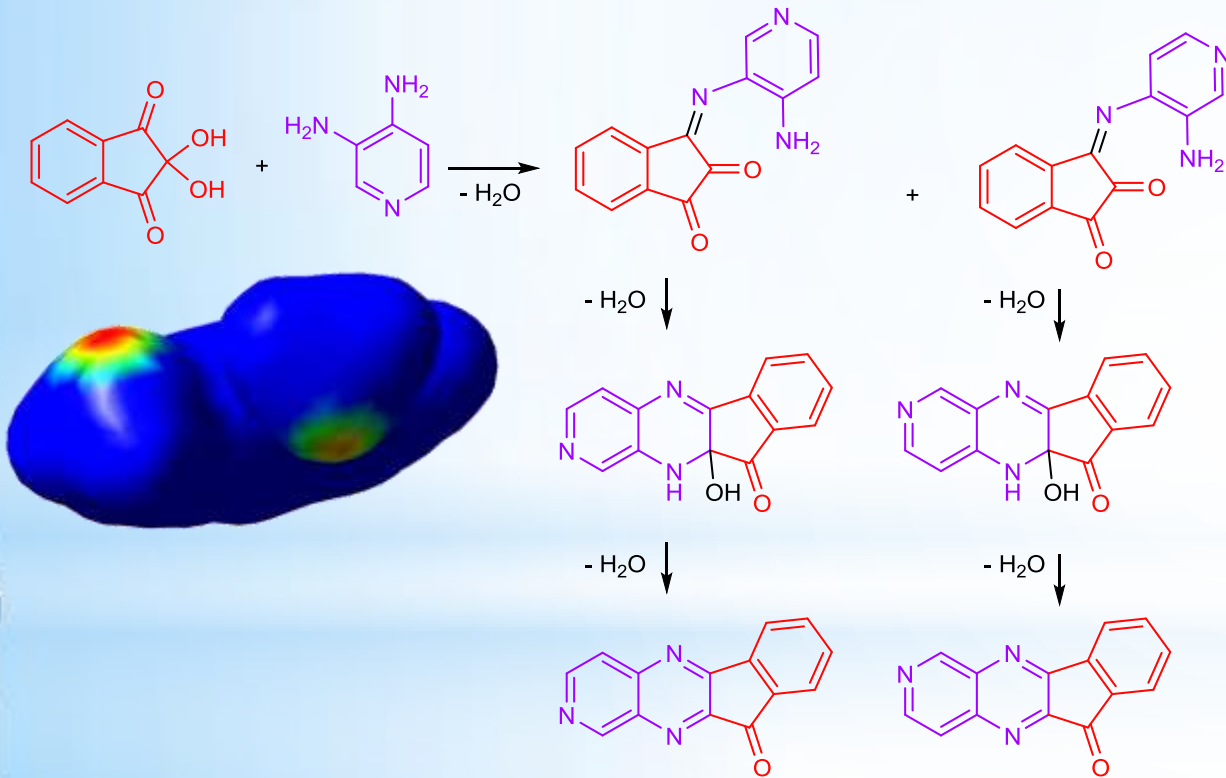
только один из изомеров!

10H-индено[1,2-*b*]пиридо[3,4-*e*]пирозин-10-он



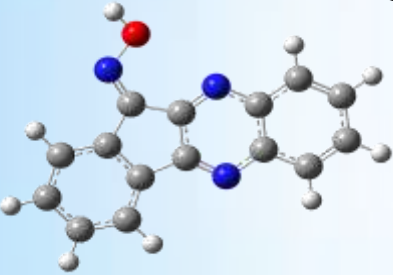
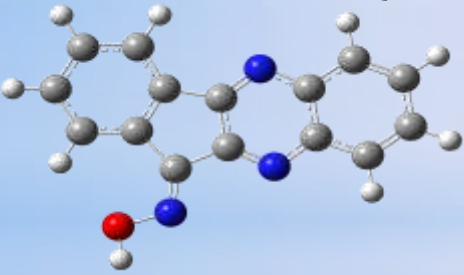
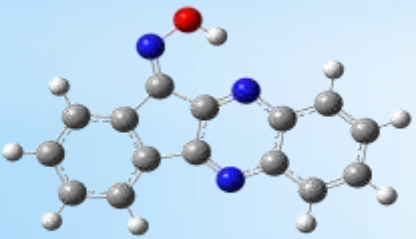
90 : 10 (какой преобладает?)

6H-индено[1,2-*b*]пиридо[3,2-*e*]пирозин-6-он

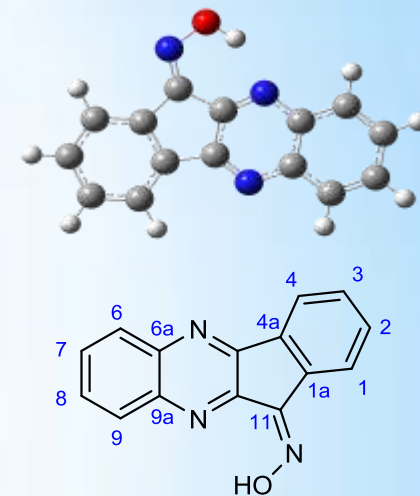
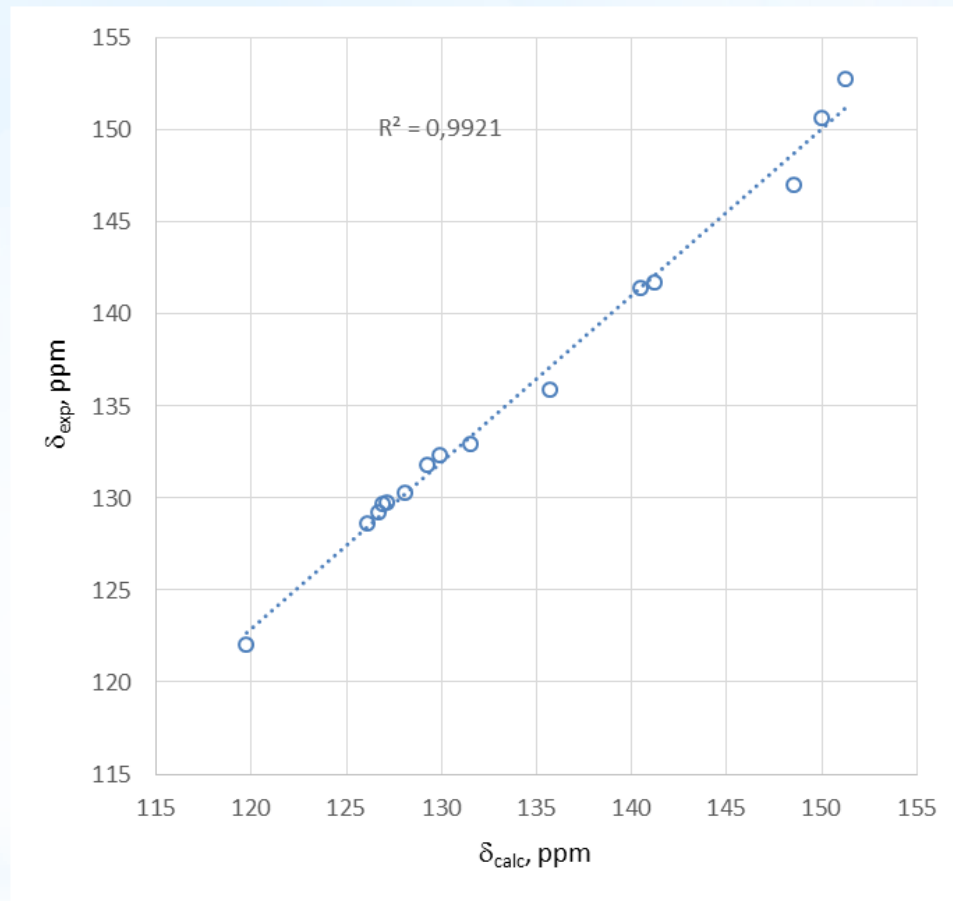
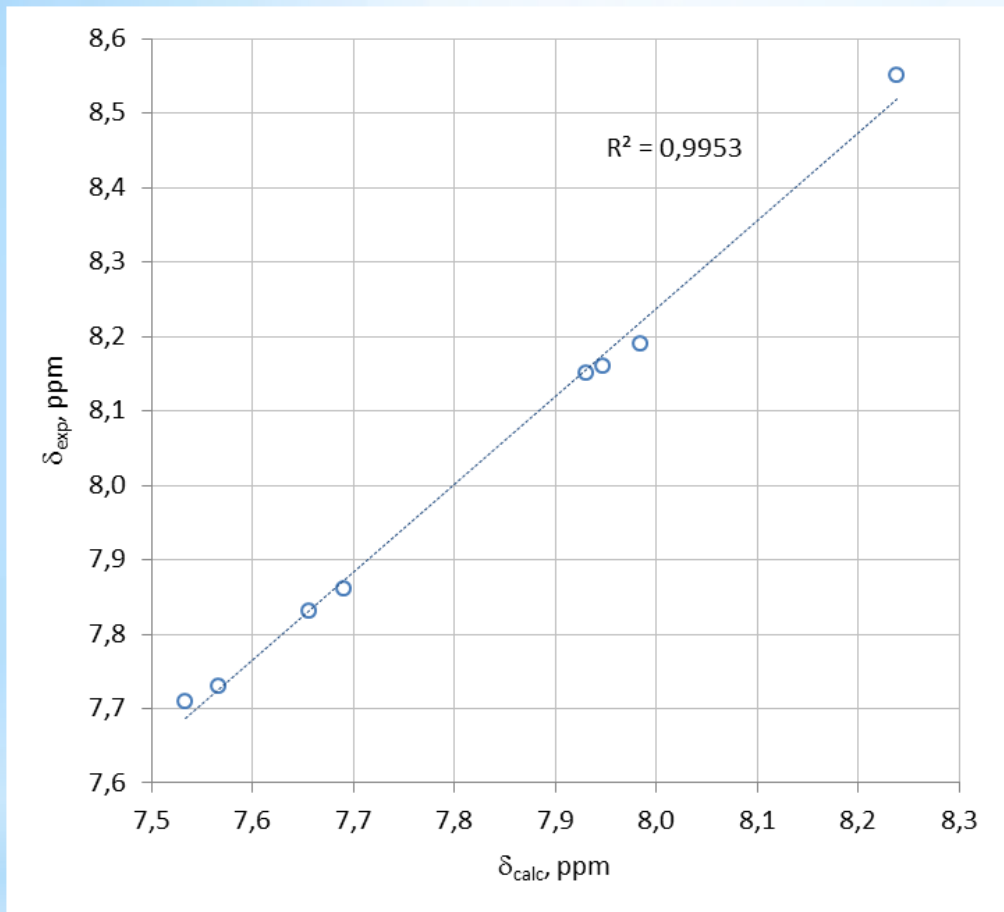


90:10

Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров ЯМР

	G _{rel} , kJ/mol					
	B3LYP/ 6-31+G(d), gas	B3LYP/6- 311++g(2d,p) IEFPCM	M11/6- 311++g(2d,p) gas	M11/6- 311++g(2d,p) IEFPCM	M11/6- 311++g(2d,p) SMD	CBS-4M, IEFPCM
 IQ1-Z0	0	0	0	1,25	1,84	8,57
 IQ1-Z180	9,17	0,0022	10,05	6,27	23,88	9,79
 IQ1-E180	3,65	$3,2 \cdot 10^{-5}$	4,23	0	0	0

Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров ЯМР



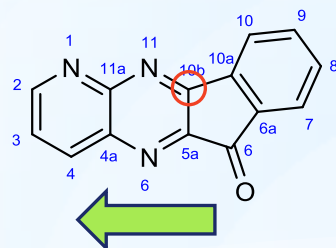
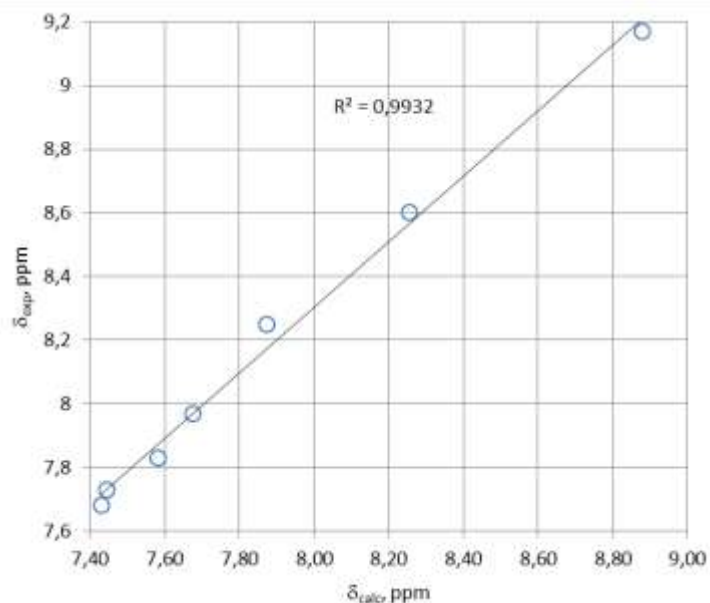
Расчет констант магнитного экранирования

B3LYP/6-311+G(2d,p) // GIAO WP04/6-311+G(2d,p) / IEFPCM (DMSO)

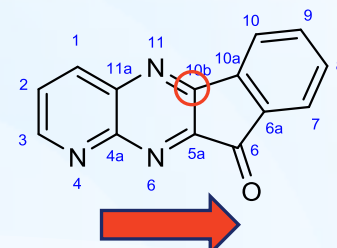
Коэффициенты для пересчета констант в химические сдвиги ^1H и ^{13}C относительно TMS:

E. Benassi // J. Comp. Chem. 2017. 38. 87

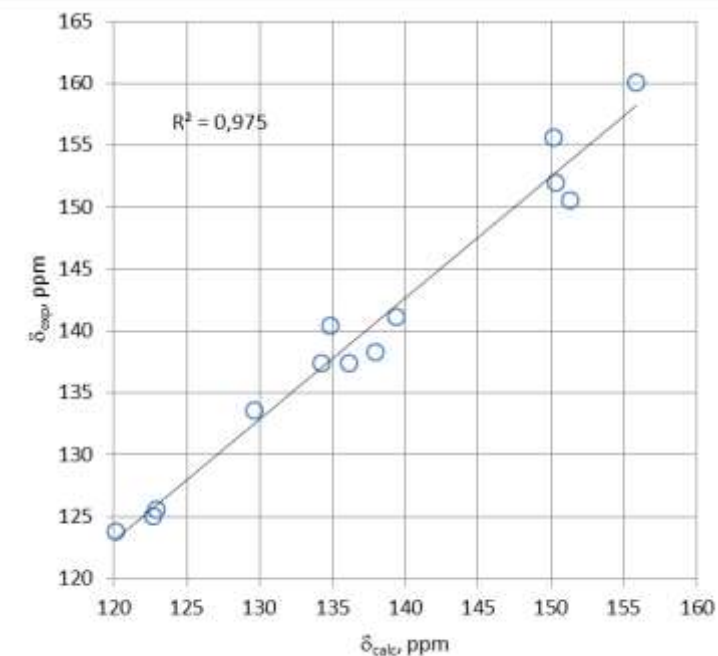
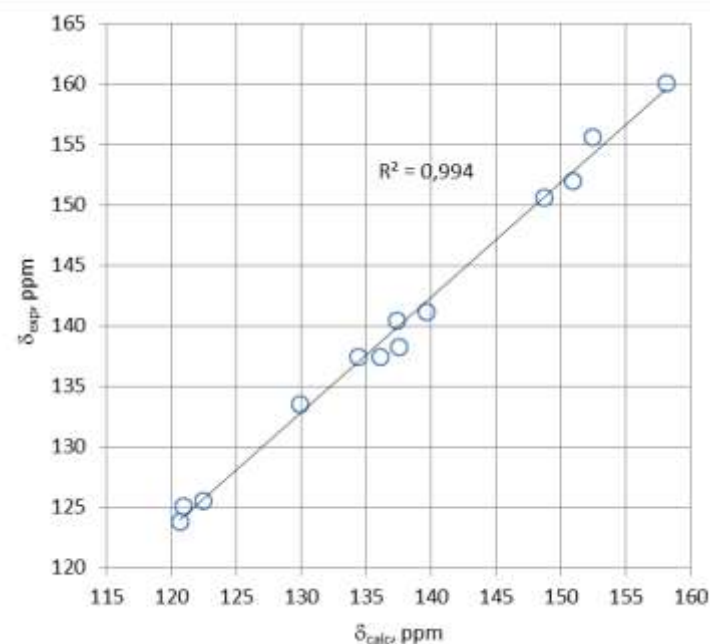
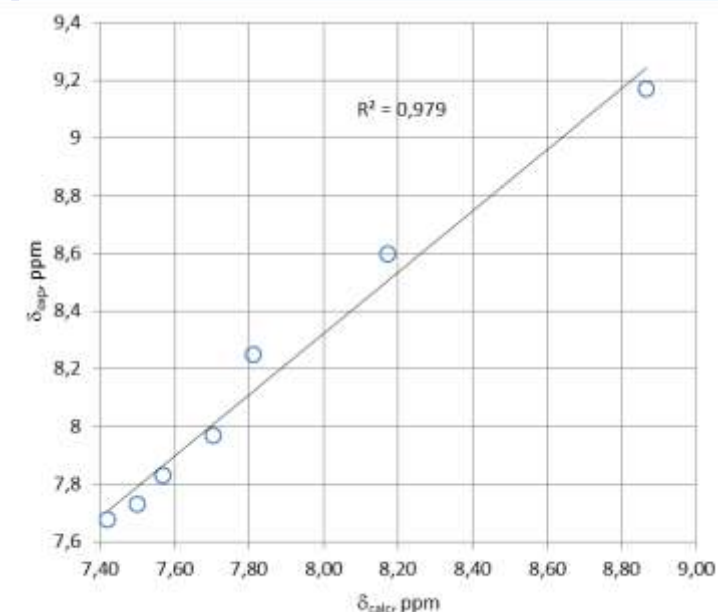
Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров ЯМР



	calc	exp	Δ
C-2	152,45	155,64	3,19
C-3	120,86	125,09	4,23
C-4	137,31	140,41	3,10
C-10b	158,15	160,04	1,89

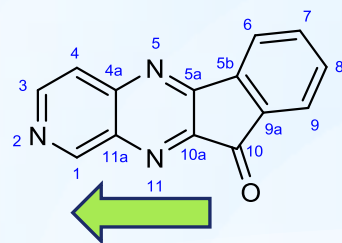
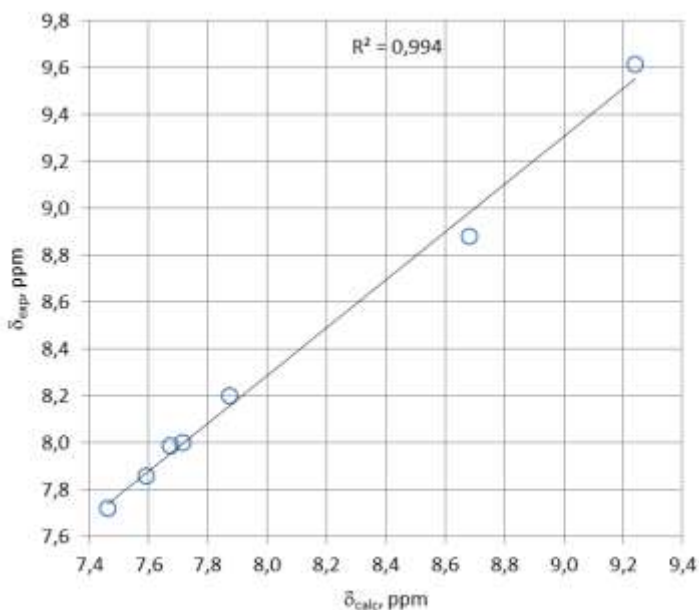


	calc	exp	Δ
C-1	134,89	140,41	5,52
C-2	122,89	125,56	2,67
C-3	150,17	155,64	5,47
C-10b	155,82	160,04	4,22

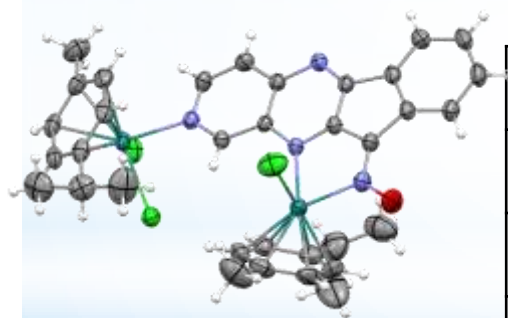
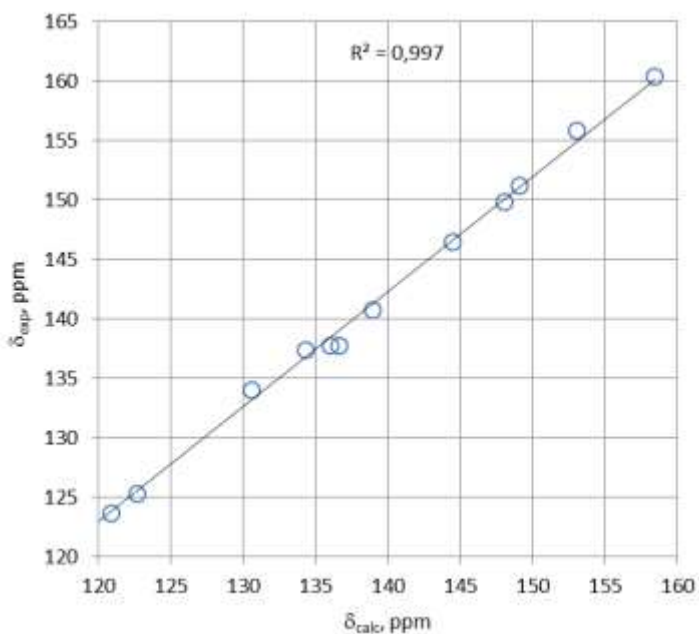
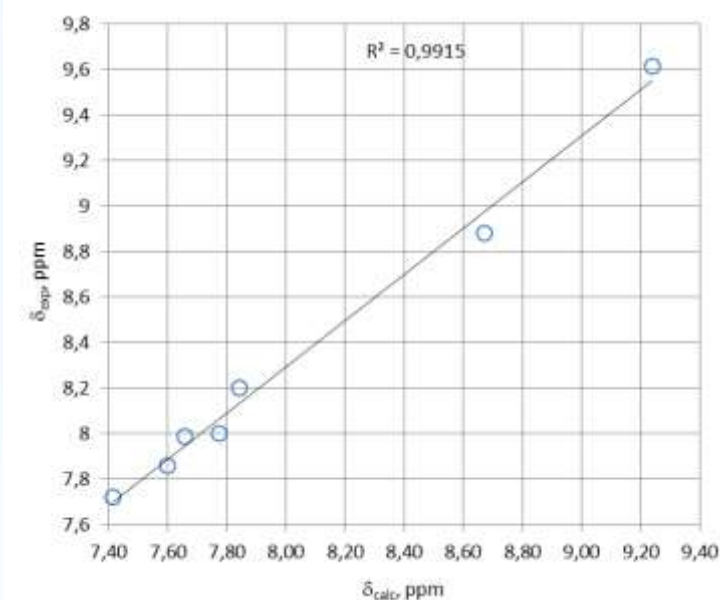
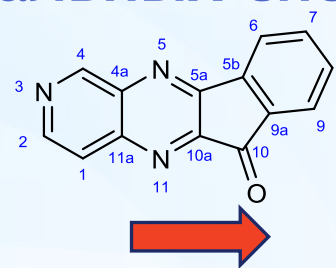


B3LYP/6-311+G(2d,p) // GIAO WP04/6-311+G(2d,p) / IEFPCM (CHCl₃)
E. Benassi // J. Comp. Chem. 2017. 38. 87

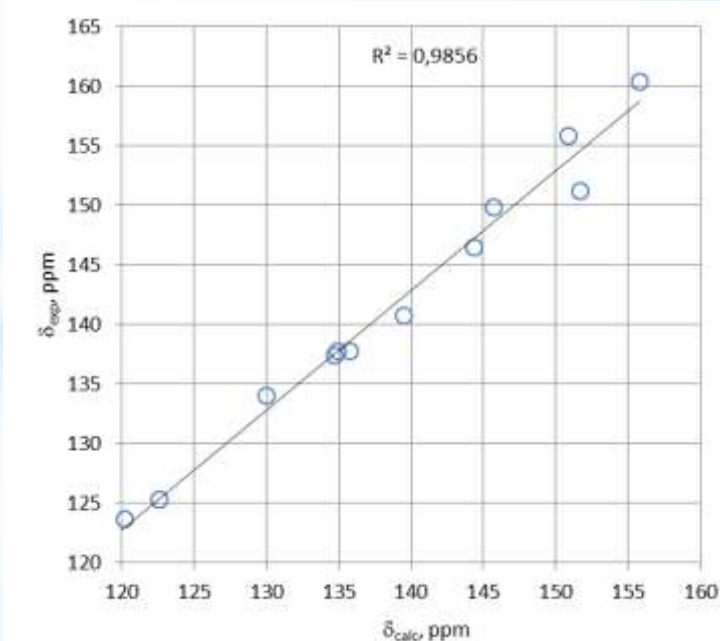
Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров ЯМР



	calc	exp	Δ
C-1	153,04	155,76	2,72
C-3	122,65	125,26	2,61
C-4	120,84	123,64	2,80



	calc	exp	Δ
C-1	119,90	122,37	2,47
C-2	145,74	149,84	4,10
C-4	150,92	155,76	4,84



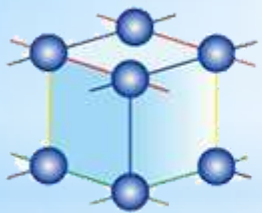
B3LYP/6-311+G(2d,p) // GIAO WP04/6-311+G(2d,p) / IEFPCM (CHCl₃)
 E. Benassi // J. Comp. Chem. 2017. 38. 87

Благодарности

Томский политехнический университет
к.х.н. Кузнецова А.С.

ИНХ СО РАН
к.х.н. Сухих Т.С.

Shihezi University
Dr. Enrico Benassi



Сибирский
СуперКомпьютерный
Центр
ИВМиМГ СО РАН