

Рис. 1. 2,4,6-трихлорфенол между графеновыми плоскостями

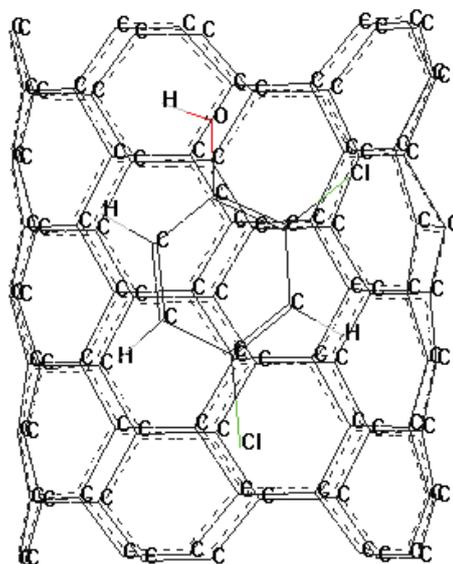


Рис. 2. 2,4-дихлорфенол внутри углеродной нанотрубки

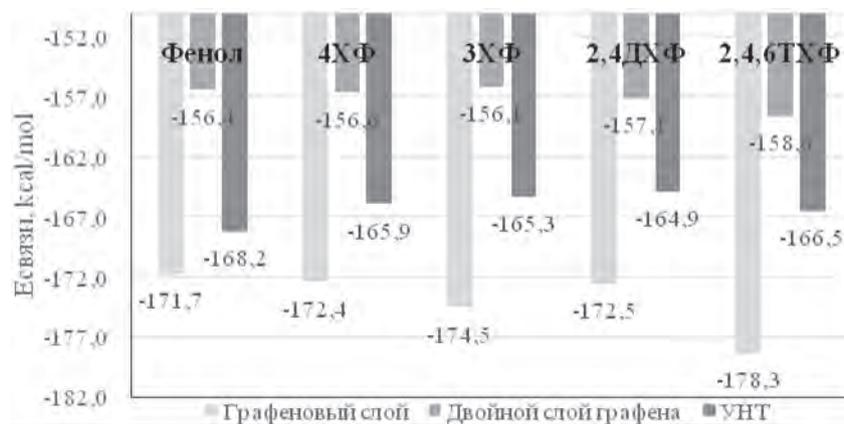


Рис. 3. Энергии связи, отнесённые к одному атому углерода

## АЛЛОБЕТУЛИН КАК ОСНОВНОЙ ПРОДУКТ ТЕРМИЧЕСКОЙ ПЕРЕГРУППИРОВКИ БЕТУЛИНА

С.С. Калиева<sup>1</sup>, Е.Е. Нурпейис, М.К. Заманова<sup>3</sup>  
 Научные руководители – д.х.н., профессор А.А. Бакибаев<sup>2</sup>;  
 к.х.н. Е.А. Мамаева<sup>3</sup>; д.х.н., профессор А.К. Ташенов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева

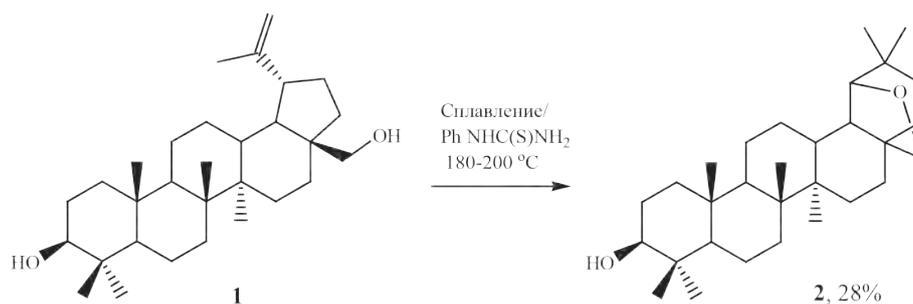
<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет  
 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 36

<sup>3</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, enlik.nurpeis.94@mail.ru

В настоящее время исследователи уделяют большое внимание изучению биологической активности природных тритерпеноидов, которые потенциально могут обладать высокой противо-

вирусной, противоопухолевой, противовоспалительной, антиоксидантной и гепатопротекторной активностями [1].

Выделяемый из внешней коры березы (бе-



ресты) тритерпеноид – бетулин проявляет широкий спектр биологической активности. Учитывая доступность в природе и потенциальную фармацевтическую ценность бетулина и его производных, поиск новых способов получения соединений на основе бетулина, остается по-прежнему актуальным. Одним из таких соединений является аллобетулин, обладающий выраженной биологической активностью.

При этом, известно, что содержание аллобетулина в природных источниках значительно меньше, чем других доступных тритерпеноидов, например самого бетулина [2]. Известны одно- и двухстадийные способы получения аллобетулина. Одностадийные способы получения: путем воздействия на бетулин ортофосфорной кислоты, диметилсульфата,  $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3$ , *p*-толуолсульфокислоты, трифторуксусной кислоты. Двухстадийные методы получения: под действием муравьиной или уксусной кислоты на бетулин в присутствии серной кислоты с последующим щелочным омылением 3-ацильного производного до аллобетулина [3].

Основной целью нашей работы было изучение термической устойчивости бетулина при высоких температурах.

Бетулин 1 (3 $\beta$ ,28-дигидрокси-20(29)-лупен или луп-20(29)-ен-3 $\beta$ ,28-диол) получали и выде-

ляли по методу [4].

Нами было установлено, что при нагревании бетулина 1 в присутствии добавок фенилтиомочевинины при температуре 180–200 °С в течение 2,5 часов происходит образование аллобетулина 2 с неоптимизированным 28%-ным выходом.

Образование аллобетулина 2 на основе бетулина 1 достоверно установлено с использованием современных физико-химических методов анализа (ЯМР  $^1\text{H}$ , ИК-спектроскопии, хромато-масс-спектрометрии). Контроль реакции проводили методом тонкослойной хроматографии с использованием элюирующей системы гексан:этилацетат = 1:1, детектирование пятен осуществляли модифицированным реактивом Эрлиха (*p*-диметиламино-бензальдегид:  $\text{H}_2\text{SO}_4$ :  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ).

Показано, что в результате термической трансформации бетулина 1 при повышенных температурах в присутствии фенилтиомочевинины происходит образование изомерного бетулину соединения – аллобетулина 2, обладающего выраженной противовирусной активностью.

Работа выполнена на базе национально исследовательского Томского политехнического университета при финансовой поддержке стипендии International PLUS.

### Список литературы

1. Толстиков А.Г., Флехтер О.Б., Шульц Э.Э., Балтина Л.А. // *Химия в интересах устойчивого развития*, 2005.– №3.– С.1–30.
2. Кислицын А.Н. // *Химия древесины*, 1994.– №3.– С.3–28.
3. Пат. RU 2402561 / Казакова О.Б., Медведева Н.И., Казаков Д.В., Толстиков Г.А.
4. Кузнецова С.А., Скворцова Г.П., Маляр Ю.Н. и др. // *Химия растительного сырья*, 2013.– №2.– С.93–100.