

## ИССЛЕДОВАНИЕ КИСЛОТНО-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ДЕЗАЦЕТИЛИРОВАНИЯ ПЕР-АЦЕТИЛИРОВАННЫХ ГЛИКОПИРАНОЗИДОВ

К.М. Файсханова<sup>1</sup>, Е.В. Степанова<sup>1</sup>, Р.Т. Насибуллин<sup>2</sup>, Р.Р. Валиев<sup>2</sup>  
 Научный руководитель – к.х.н, старший преподаватель Е.В. Степанова

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, fayskanovakseniia@mail.ru

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

В химии углеводов в качестве защитных групп наиболее часто применяются ацетильные защитные группы [1]. Наиболее применяемый метод для снятия ацетильных групп является основной катализ [2], однако он имеет недостатки, т.к. приводит к удалению и всех других лабильных групп. Кислотное дезацетилирование является более селективным и позволяет получать 2-О-ацетиларилгликозиды [3]. Схема 1 отображает последовательность снятия ацетильных групп в реакции кислотного дезацетилирования. Схема была смоделирована на основании квантово-химических расчетов [4].

В данной работе была произведена экспериментальная оценка влияния растворителей различной полярности на константы скоростей для реакции этанолиза 2-О-ацетильной группы фенил 2-О-ацетилгликопиранозида 1 (схема 2).

В качестве растворителей были использованы ксилол, этанол и ДМСО, реакция проводилась при различных температурах 30 °С, 40 °С и 50 °С.

Экспериментальные данные подтверждены теоретическими расчетами в программе Gaussian с использованием метода B3LYP с ба-

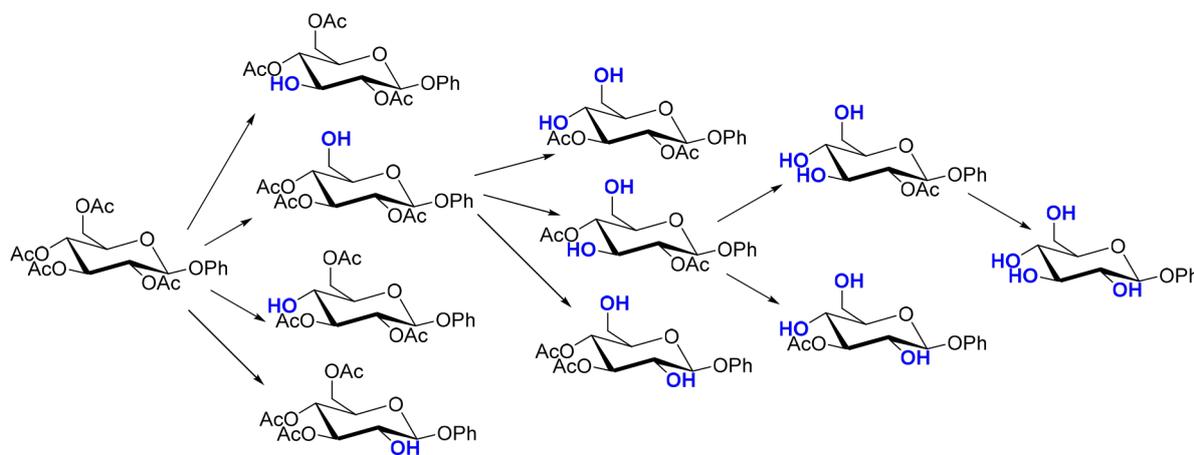


Схема 1. Этаноллиз пер-ацетилированного фенил гликозида

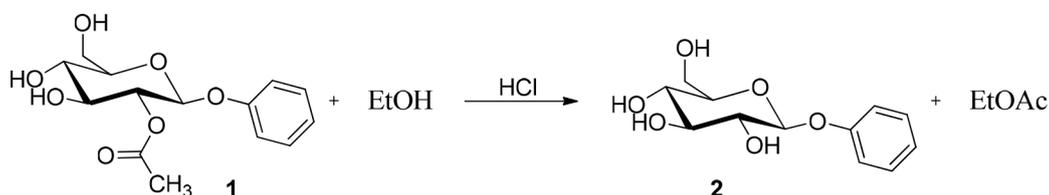


Схема 2. Реакция этанолиза 2-О-ацетильной группы фенил 2-О-ацетилгликопиранозида

Таблица 1. Энергия активации реакции этанолиза в различных растворителях

		$E_a$ , ккал/моль			
		Газовая фаза	Ксилол	Этанол	ДМСО
1	Расчет	25,30	27,00	29,80	33,80
2	Эксперимент	–	15,8±1,7	20,1±1,8	29,8±0,5
3	$\epsilon$ растворителей	–	2,374	24,852	46,826

зисным набором 6-31G (d,p) при расчете энергии активации лимитирующей стадии реакции. Результаты представлены в табл. 1.

Исходя из экспериментальных данных и теоретических расчетов, можно сделать вывод, что полярность растворителя оказывает прямое

влияние на скорость реакции. Наибольшая скорость реакции наблюдается в неполярных растворителях. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований №: 18-33-00365\18 мол\_a.

### Список литературы

1. *Wuts P.G.M., Greene T.W. Protective groups in organic synthesis. John Wiley & Sons, 2006. – 1400p.*
2. *Wang Z. Zemplén deacetylation. Comprehensive Organic Name Reactions and Reagents, 2010. – 3123–3128p.*
3. *Stepanova E.V., Nagornaya M.O., Filimonov V.D., Valiev R.R., Belyanin M.L., Drozdova A.K., Cherepanov V.N. // Carbohydr. Res., 2018. – Vol.458. – P.60–66.*
4. *Nasibullin R., Valiev R.R., Faiskanova K.M., Stepanova E.V., Cherepanov V.N., Filimonov V.D., Sundholm D. (unpublished).*

## ИЗУЧЕНИЕ ФРАКЦИЙ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

А.В. Цупко<sup>1</sup>, К.А. Братишко<sup>1,2</sup>, Д.А. Михалев<sup>1</sup>, М.В. Зыкова<sup>1</sup>  
Научный руководитель – д.фарм.н. М.В. Белоусов

<sup>1</sup>Сибирский государственный медицинский университет  
634050, Россия, г. Томск, Московский тракт 2 стр. 18

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, frikins@my.com

Гуминовые кислоты (ГК) — это природные азотсодержащие полифункциональные высокомолекулярные органические соединения арилгликопротеидной природы с выраженными амфифильными и амфотерными свойствами, а также с отсутствием строгого постоянства химического состава и молекулярных масс (Попов А.И. Гуминовые вещества: свойства, строение, образование. – Санкт-Петербург, 2004. – 248с.). Наиболее перспективным источником ГК для получения на их основе лекарственных средств является торф (Бамбалов, Н.Н. Использование торфа в качестве органического сырья для химической переработки // Химия твердого топлива. – 2012. – №5. – С.6–12.).

Природные объекты с высоким содержанием ГК (торф, сапрпель, мумие) уже более 3000 лет используются в народной медицине и ветеринарии как биогенные стимуляторы, ранозаживляющие, противомикробные и противовирусные, противовоспалительные и противоопухолевые препараты, антиоксиданты, иммуномодуляторы и кардиопротекторы, гепатопротекторы, адаптогены и стресс-протекторы, энтеросорбенты. При этом, многопрофильность фармакологической активности ГК обусловле-

на их уникальными химическими свойствами и сложностью структуры.

Однако, не смотря на огромную биологическую ценность ГК, применение их в медицине ограничено использованием в качестве БАД, и, на сегодняшний день нет ни одного зарегистрированного на территории РФ лекарственного средства на их основе. Причина этого – сложное полиморфное строение макромолекулы ГК, которое не позволяет провести корректную стандартизацию гуминовых препаратов, применяя классические подходы.

В связи с чем, целью работы является, изучение фракций ГК, выделенных различными растворителями, методами электронной и ИК-спектроскопии, как этап в поиске фармакологических дескрипторов строения молекул ГК, для дальнейшей разработки методов стандартизации препаратов на их основе.

Материалом исследования являлись фракции ГК, полученные с использованием ряда растворителей: метанола, 95% этанола, воды, диметилформамида, ацетона. Гуминовые кислоты выделяли 0,1 М раствором NaOH из низинного древесно-травяного вида торфа торфяного месторождения «Таган» Томской области. Выбор