

## РОЛЬ N-БЕНЗИЛЬНЫХ ПРОТОНОВ В ИДЕНТИФИКАЦИИ АБСОЛЮТНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ОПТИЧЕСКИХ ИЗОМЕРОВ

Григорьева Т.А., Новикова Д.С., Трибулович В.Г.

*НИИ «Молекулярная фармакология», Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет), 190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26,  
e-mail: rozentatiana@gmail.com*

Биологическая активность низкомолекулярных соединений напрямую определяется расположением активных центров молекулы и их пространственной доступностью для связывания с белками-мишенями. Установление абсолютной конфигурации и оптической чистоты соединений является необходимым этапом создания лекарственных препаратов. В настоящее время такая задача предполагает трудоемкое получение кристаллов, либо использование специфических приборов (хироптические методы) и реактивов (кислоты Мошера и аналогичные дериватизирующие агенты).

Нами было показано, что в случае диастереомерных смесей *N*-бензил замещенных изоиндолинонов метиленовым протоном отдельных изомеров соответствует характерное расщепление (dd) с различающимися константами спин-спинового взаимодействия<sup>1,2</sup>.

В данной работе нами была синтезирована серия производных *N*-бензил замещенного *L*-пролина и проанализированы экспериментальные и расчетные спектры ЯМР полученных соединений. В результате показано, что этот фрагмент может быть использован для дериватизации и идентификации оптических изомеров.

Доступность данного фрагмента позволит использовать аналогичный подход для определения пространственной структуры широкого спектра биологически активных веществ.

### Литература

1. Григорьева Т.А., Гарабаджю А.В., Трибулович В.Г. Журнал общей химии, 2016, 11, 1811.
2. Grigoreva T.A., Novikova D.S., Gureev M.A., Garabadzhiu A.V., Tribulovich V.G. Chirality, 2018, 30, 785.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 16-13-10358.*