

## ИНФОРМАЦИЯ

### V ВСЕРОССИЙСКИЙ СЕМИНАР ПО СПЕКТРОСКОПИИ ЯМР

9 и 10 декабря 1997 г. в Москве состоялся V Всероссийский семинар по спектроскопии ЯМР, посвященный памяти члена-корреспондента АН СССР Владимира Федоровича Быстрова. Семинар был организован Институтом биоорганической химии им. М.М.Шемякина и Ю.А.Овчинникова РАН и химическим факультетом МГУ им. М.В.Ломоносова. Хотя семинар был назван Всероссийским, фактически он оказался международным. Помимо участников из СНГ (Армения, Беларусь, Узбекистан), с докладами выступили и представители Германии и Великобритании. В программу семинара были включены 26 докладов и 73 стендовых сообщения, которые по сути разделились на три основных направления: физика, химия и биомедицина. Работ, посвященных чисто физико-химическим аспектам ЯМР, было немного, но они заслуживали внимания. Доклад А.Е.Мефёда из Института радиотехники и электроники РАН (Фрязино, Московская обл.) был посвящен ЯМР твердого тела. Из анализа многоспиновых диполь-дипольных взаимодействий во вращающейся системе координат получается информация о спиновой динамике, кристаллическом и молекулярном строении вещества в твердой фазе. Обширный доклад Э.Купче, представителя фирмы Вариан из Оксфорда (Великобритания), был посвящен развитию технических методов ЯМР спектроскопии, большим возможностям доступного на сегодняшний день с наибольшим магнитным полем ЯМР-спектрометра (900 МГц), достижению соотношения сигнал/шум до 2000! Современным проблемам физической, неорганической и органической химии была посвящена основная часть докладов. В частности, в докладе В.И.Бахмутова (ИНЭОС РАН, Москва) спин-решеточная

релаксация водорода и дейтерия представляется как структурно-аналитический метод для анализа гидридных молекул в растворе. Полученные константы квадрупольного взаимодействия дейтерия предлагаются в качестве меры ионности связи металл-дейтерий.

Актуальность исследований процессов сольватации, межмолекулярных взаимодействий была отражена во многих работах. Метод ЯМР-релаксации был применен для исследования строения сольватных оболочек ионов в растворах электролитов (В.И.Чижик из СПГУ, Санкт-Петербург)

И.М.Сергеев (МГУ, Москва) в своем докладе подробно представил ЯМР воды в сольватирующих средах. Используемый ЯМР спектрометр (750 МГц) дал возможность обнаружить изотопный сдвиг протонов, вызванный  $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$  замещением, а также наблюдать сигналы  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HDO}$ . Проявлению дальних изотопных эффектов в спектрах ЯМР ряда комплексов, содержащих несколько взаимодействующих водородных связей, был посвящен доклад Н.С.Гоубева (СПГУ, Санкт-Петербург). Доклады по органической химии охватывали как структурные, так и динамические исследования. Р.Г.Костяновский (ИХФ РАН, Москва) в своем докладе говорил о развитии нового направления – пространственно-затрудненной инверсии азота. Найдено необычное повышение инверсионного барьера азота в N-замещенных азиридинах, обусловленное стереоэлектронными эффектами. Доклад А.И.Кольцова (СПГУ, Санкт-Петербург) был посвящен исследованию таутомерного равновесия в кристаллических кето-енолах. В докладе Вад.В.Негребецкого (Гос. медицинский университет, Москва) была представлена исследованная с помощью мультядерной и двумерной спектроскопии ЯМР динамическая стереохимия органических производных пентакоординированных кремния и германия. Ф.Х.Каратаева (КГУ, Казань) докладывала о динамических свойствах тиофосфорил(тиокарбонил)амидов, изученных с помощью ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и  $^{31}\text{P}$ . Интерес представляли также доклады, посвященные исследованию механизмов органических реакций с помощью ЯМР и химически индуцированной динамической поляризации ядер (ХИДПЯ, ХПЯ). Доклады А.В.Ильсова (Институт органической и физической химии им. А.Е.Арбузова, Казань) и А.И.Круппы (ИХКиГ СО РАН, Новосибирск) были посвящены исследованию механизмов радикальных реакций в растворах. Ш.А.Маркрян (ЕГУ, Ереван) докладывал о фотохимических и фотофизических особенностях реакций кетонов, о возможностях микросекундной времяразрешенной ХИДПЯ в изучении элементарных стадий этих реакций. Особо следует отметить доклады, посвященные биомедицинским объектам и

задачам. Расширенный доклад Х.Рутерьянца из Университета Франкфурта/М (Германия) и доклад В.Д.Федотова из Института биологии (Казань) были посвящены структурной динамике белков. Доклад И.В.Масенникова (ИБХ РАН, Москва) относился к детальному анализу пространственной структуры  $\alpha$ -конотасина G<sub>1</sub> в растворе. Большой интерес вызвал доклад В.И.Польшакова "Спектроскопия ЯМР в молекулярной фармакологии". Было рассмотрено применение современных методов ЯМР для изучения взаимодействия антифолатных препаратов с мишенью их действия – дигидрофолатредуктазой (ДГФР). Выявлена структура комплекса ДГФР с противоопухолевыми препаратами метотрексат и триметрексат. На основании измерения параметров релаксации ядер <sup>15</sup>N получены данные о динамике белка. Следует отметить, что биомедицинская тема составляла определенную часть и в стендовых сообщениях, в которых были представлены и работы ученых Армении: А.С.Галстян, Ш.А.Маркарян "ЯМР-исследование сольватационных процессов в водно-диметилсульфоксидных растворах солей", и с участием А.Г.Шахатуни (информационный центр по спектроскопии ЯМР, ИОХ РАН) была представлена информация о системе использования консультаций по ЯМР, которая будет размещена в Internet и доступ к ней будет свободным.

**Ш. А. Маркарян**