

Supporting Information

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, КАК КЛЮЧЕВОЙ ФАКТОР, ВЛИЯЮЩИЙ НА ПРОТЕКАНИЕ РЕАКЦИИ МАКРОЦИКЛИЗАЦИИ

К. В. Белов,^a И.Е. Еремеев,^b В.В. Клочков,^c В. В. Соборнова,^b И. А. Ходов^{a,c,@}

*^aИнститут химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук 153045,
Иваново, Россия*

*^bИвановский государственный химико-технологический университет 153000, Иваново,
Россия*

^cКазанский (Приволжский) федеральный университет 420008, Казань, Россия

@E-mail: iakh@isc-ras.ru

Вспомогательная информация включает спектры ЯМР, на основании которых была получена информация о структуре и конформационных распределениях молекулы стрихнина в различных органических растворителях (рис. 1 - рис.18), а так же сводные таблицы, включающие в себя информацию о химических сдвигах ^1H , ^{13}C и внутримолекулярных взаимодействиях.

- SI 1. ^1H спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 2. ^{13}C спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 3. ^1H спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 4. ^{13}C спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 5. ^1H спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6
- SI 6. ^{13}C спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6
- SI 7. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 8. ^1H - ^1H TOCSY(спин-лок 20мс) спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 9. ^1H - ^1H TOCSY(спин-лок 60мс) спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 10. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в бензоле-д6
- SI 11. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 12. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 20мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 13. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 60мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 14. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 15. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в хлороформе-д1
- SI 16. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 20мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6
- SI 17. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 60мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6
- SI 18. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6
- SI 19. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11a-H11b в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)
- SI 20. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11a-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)
- SI 21. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)
- SI 22. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H15a в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)
- SI 23. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11b-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ-д1)
- SI 24. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H8-H11b в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ-д1)

SI 25. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H8-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ-д1)

SI 26. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H20a-H15b в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

SI 27. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H12-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

SI 28. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H12-H14 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

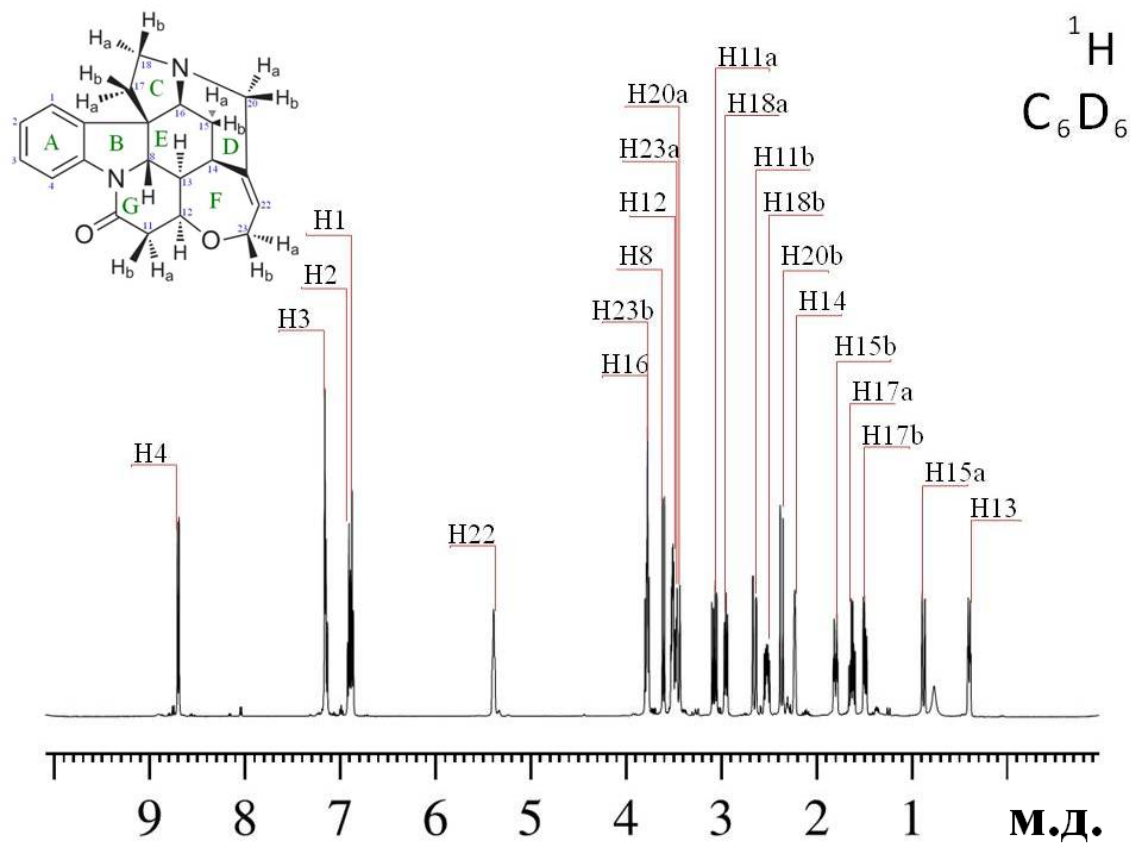
SI 29. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

SI 30. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H15b в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

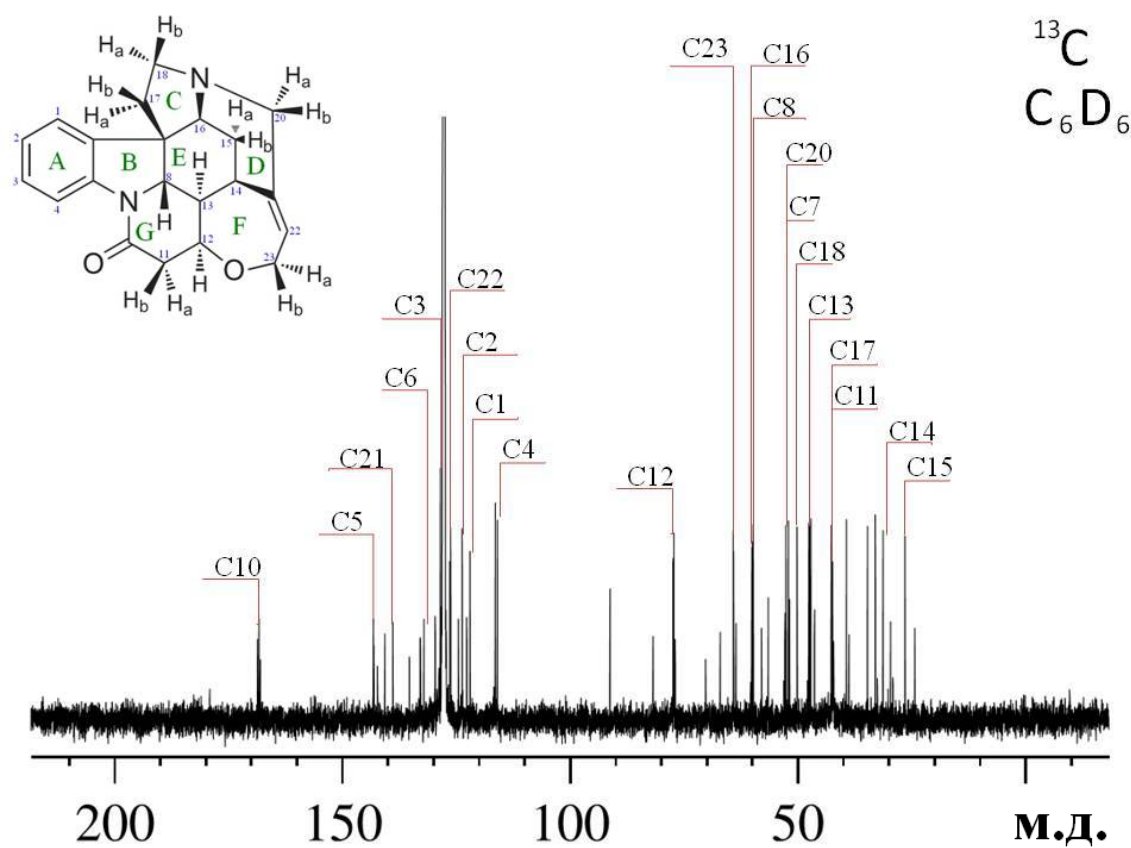
Таблица 1. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в бензоле-д6

Таблица 2. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в хлороформе-д1

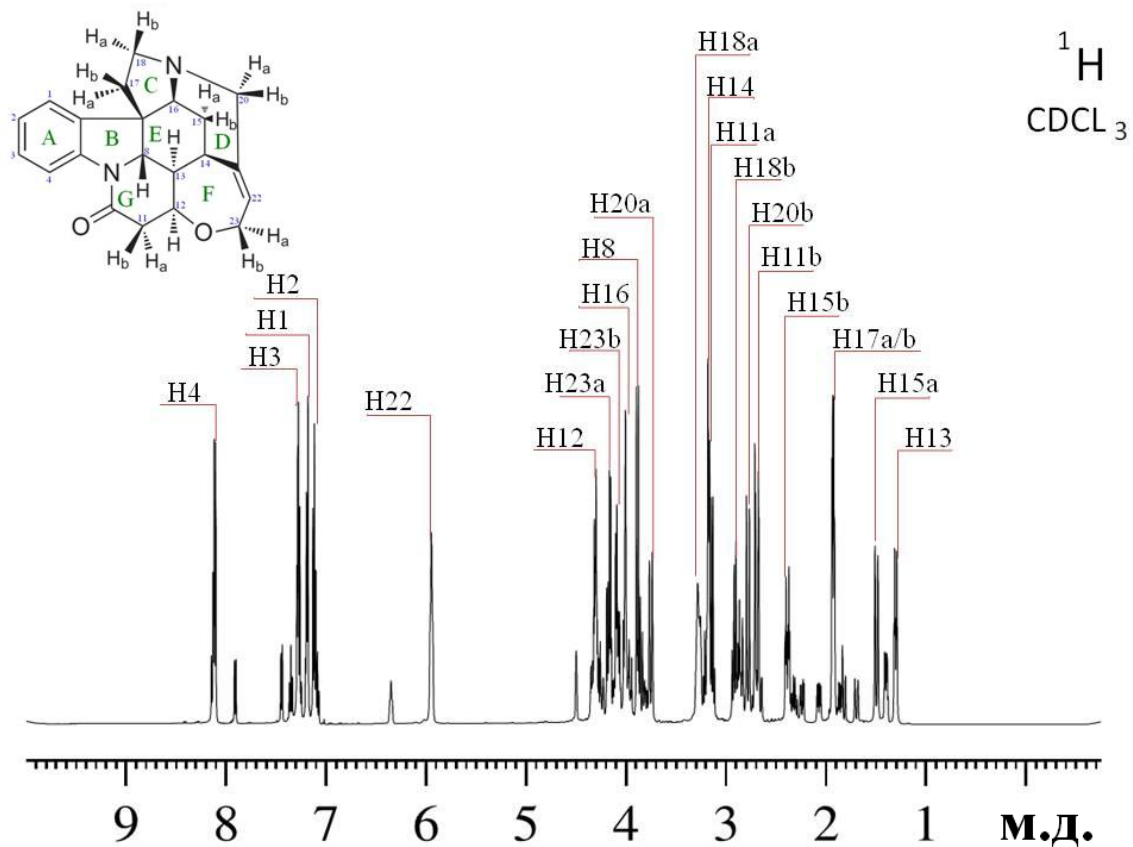
Таблица 3. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в диметилсульфоксиде-д6



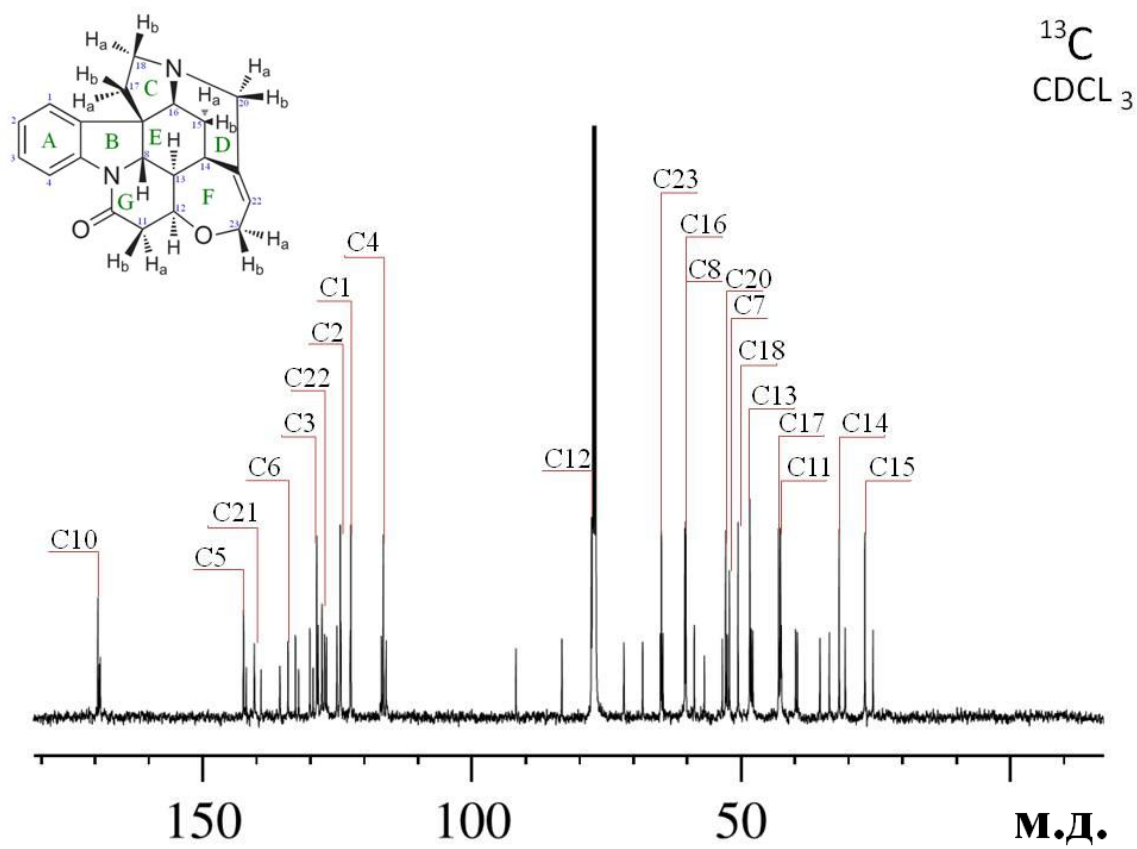
SI 1. ^1H спектр стрихнина в бензоле-д6



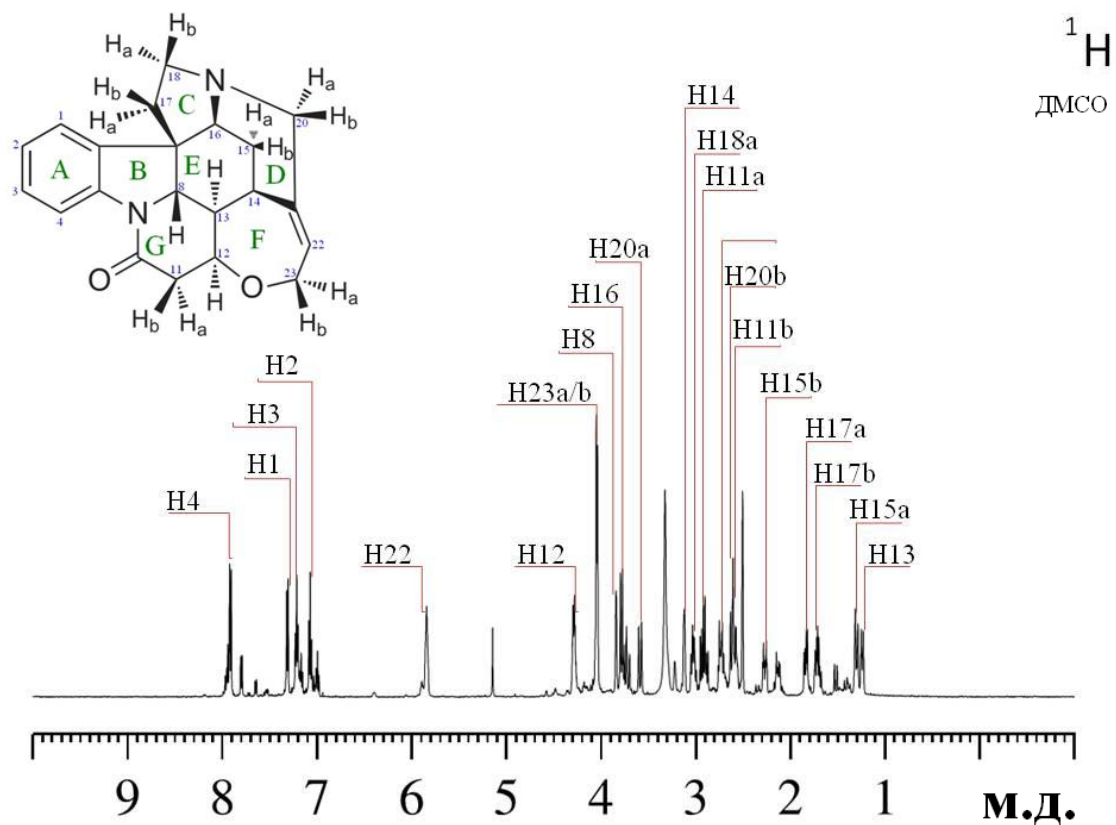
SI 2. ^{13}C спектр стрихнина в бензоле-д6



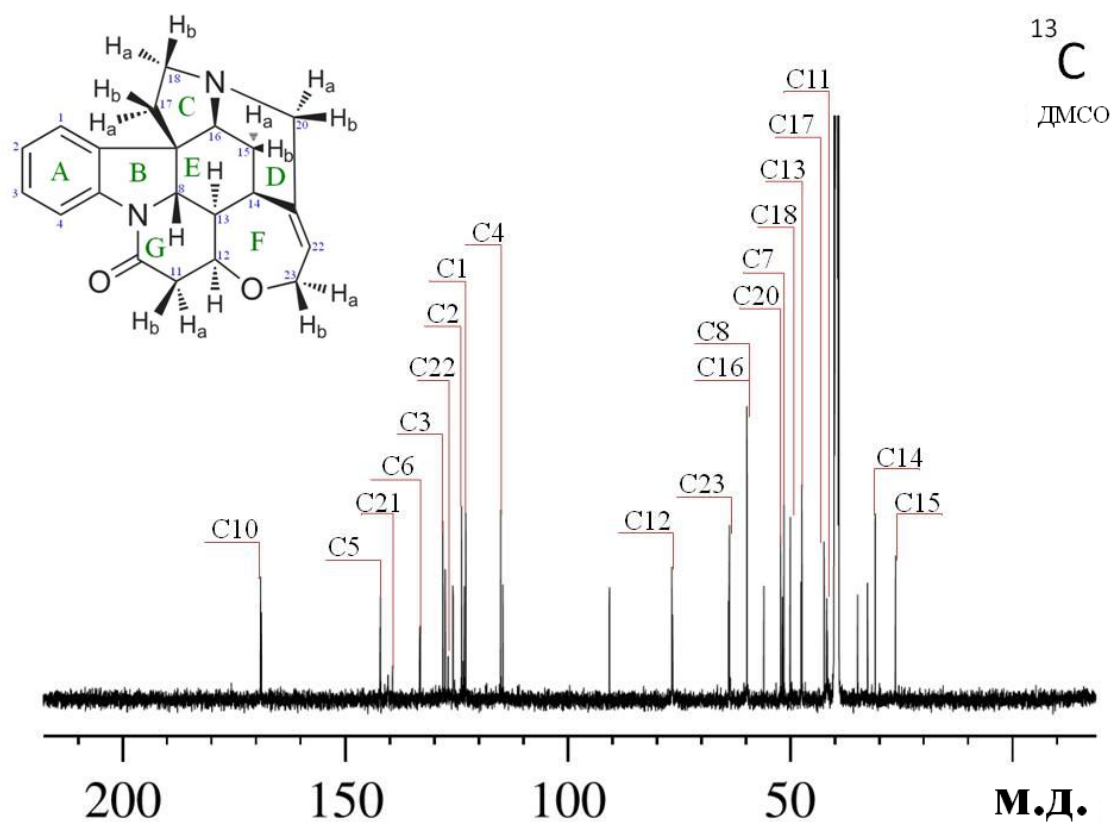
SI 3. ^1H спектр стрихнина в хлороформе-д1



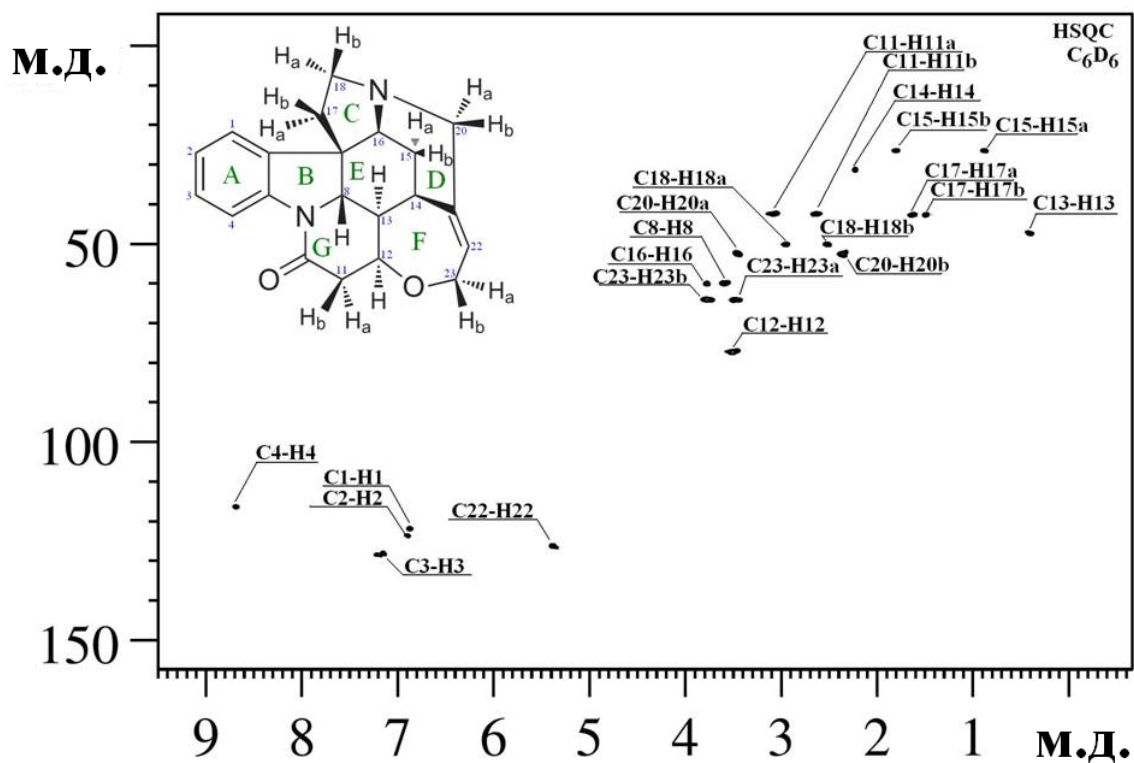
SI 4. ^{13}C спектр стрихнина в хлороформе-д1



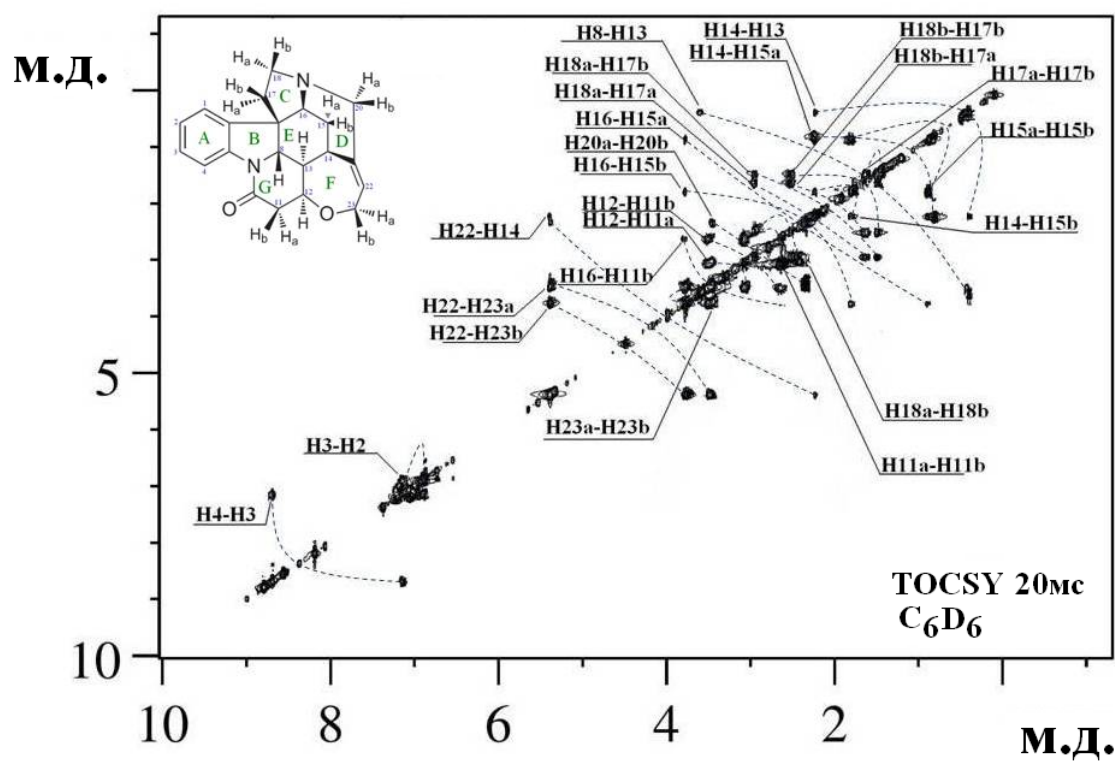
SI 5. ^1H спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6



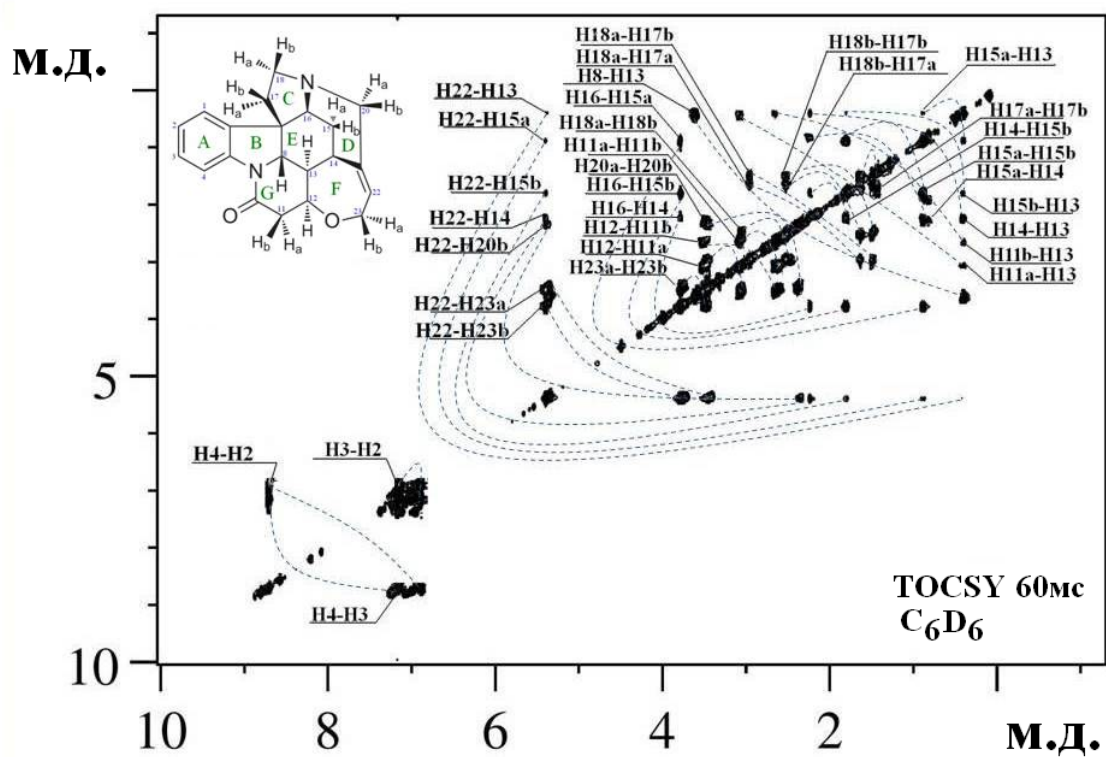
SI 6. ^{13}C спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6



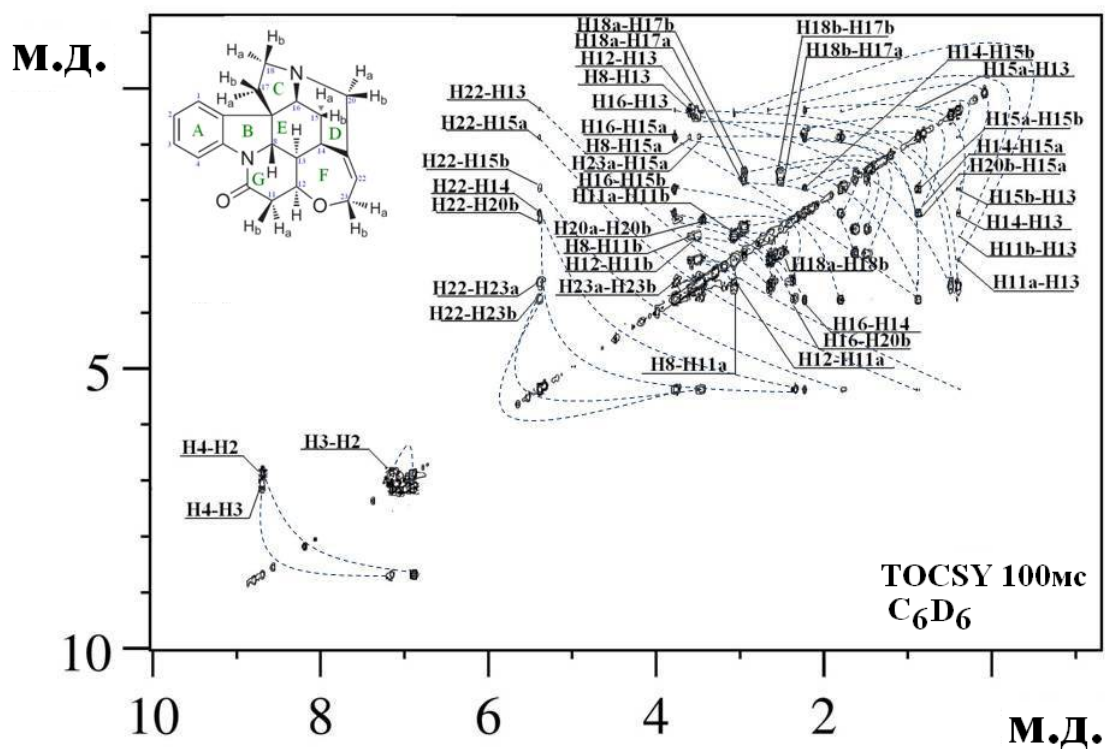
SI 7. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в бензоле-дб



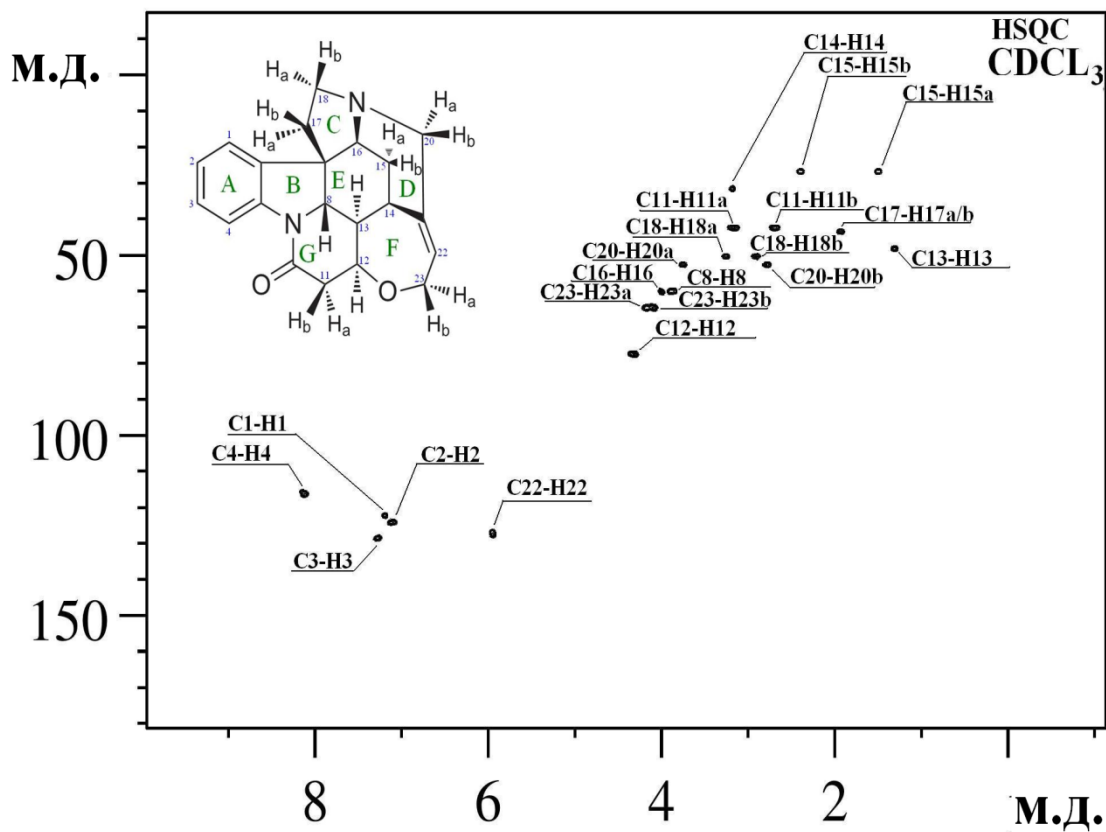
SI 8. ^1H - ^1H TOCSY(спин-лок 20мс) спектр стрихнина в бензоле-дб



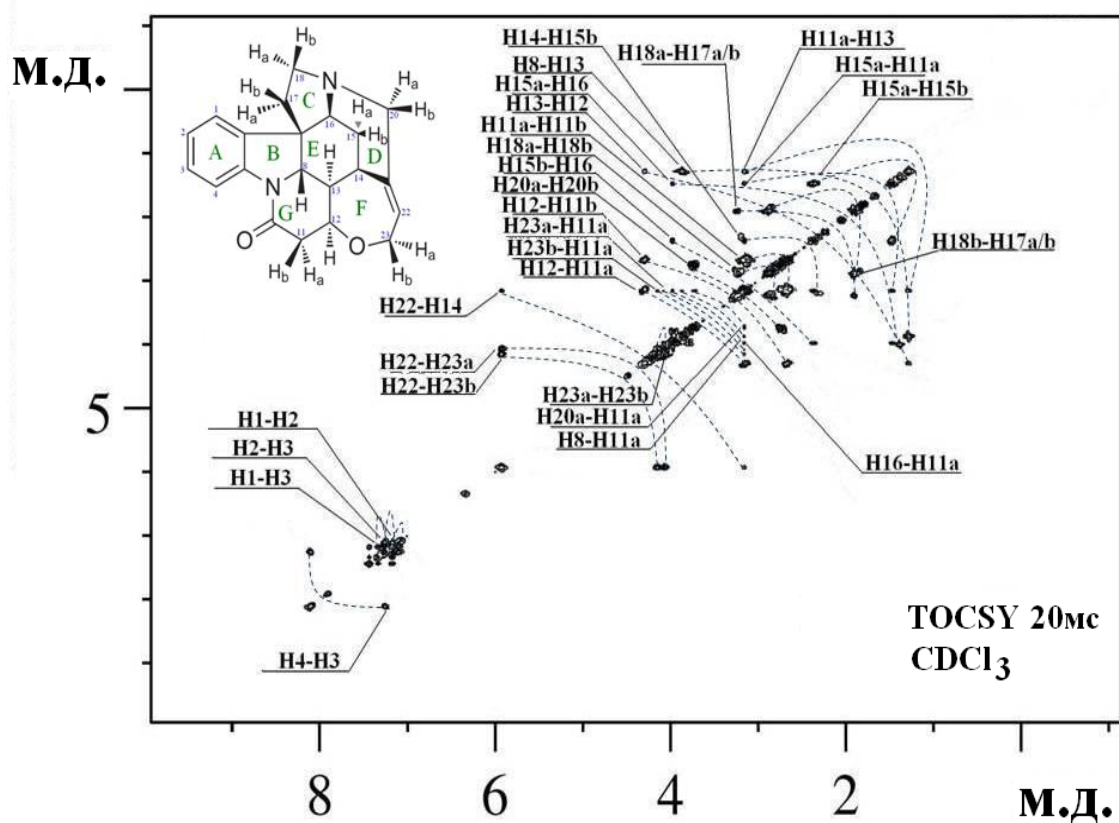
SI 9. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 60мс) спектр стрихнина в бензоле-дб



SI 10. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в бензоле-дб

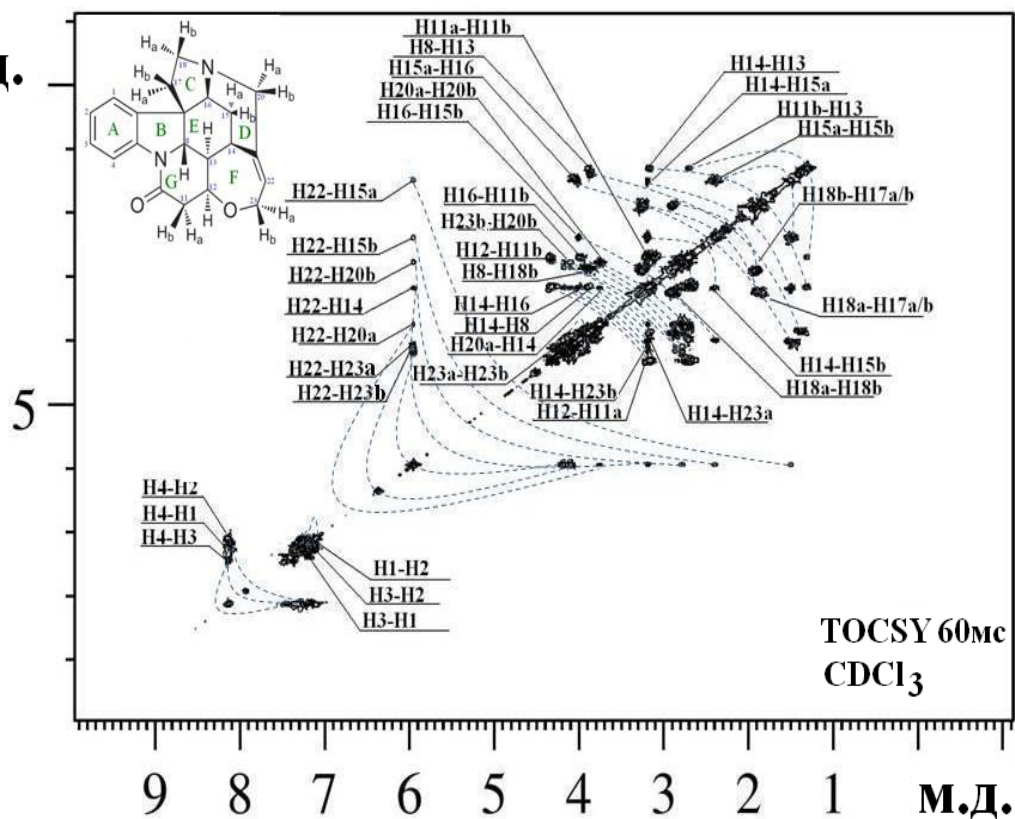


SI 11. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в хлороформе-д1



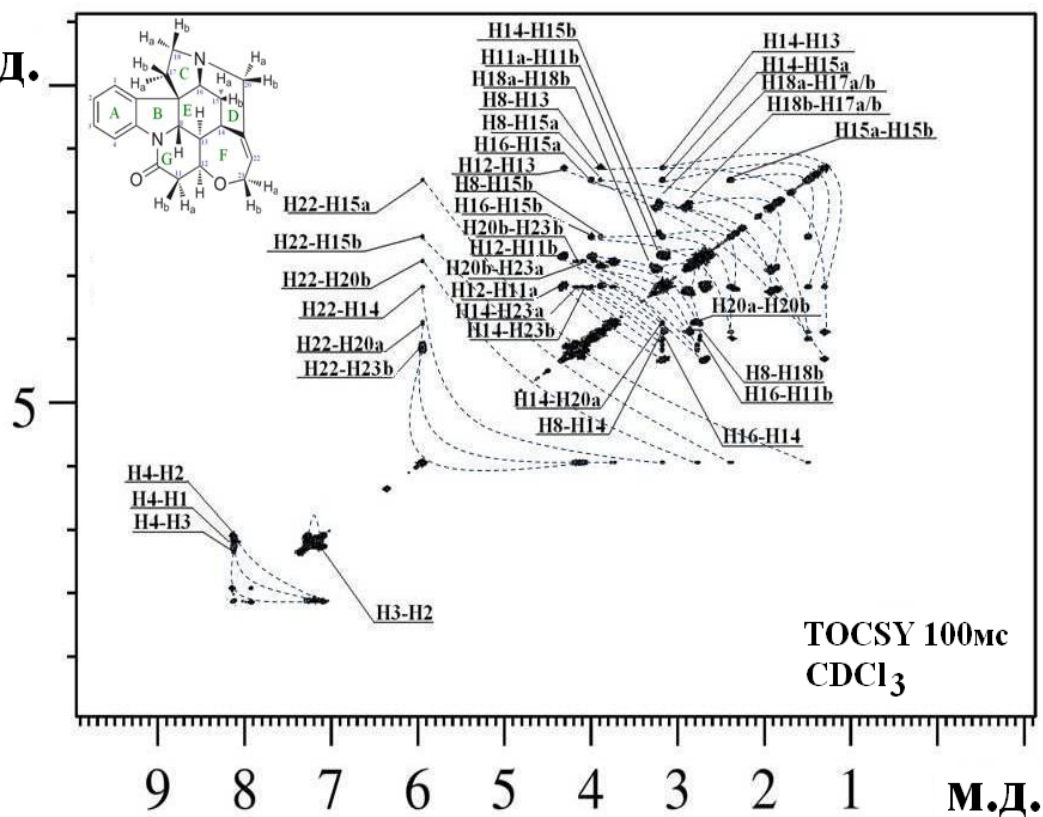
SI 12. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 20мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1

М.Д.

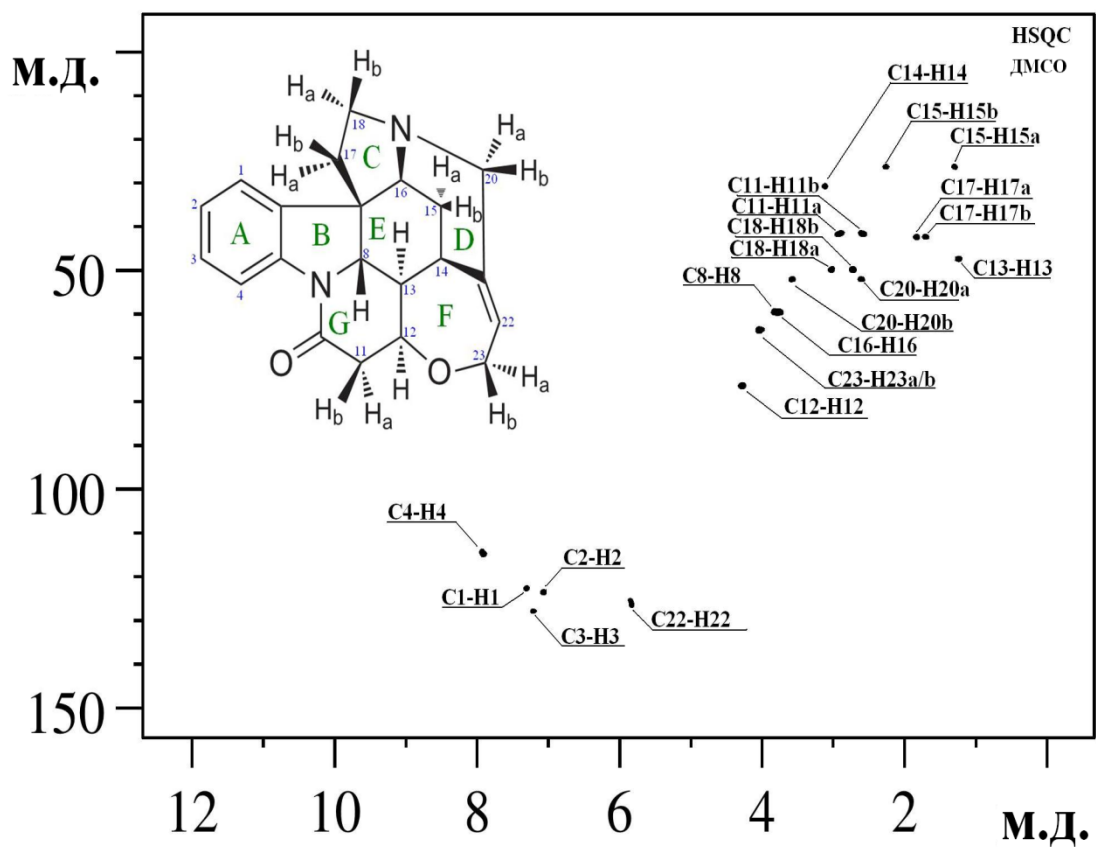


SI 13. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 60мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1

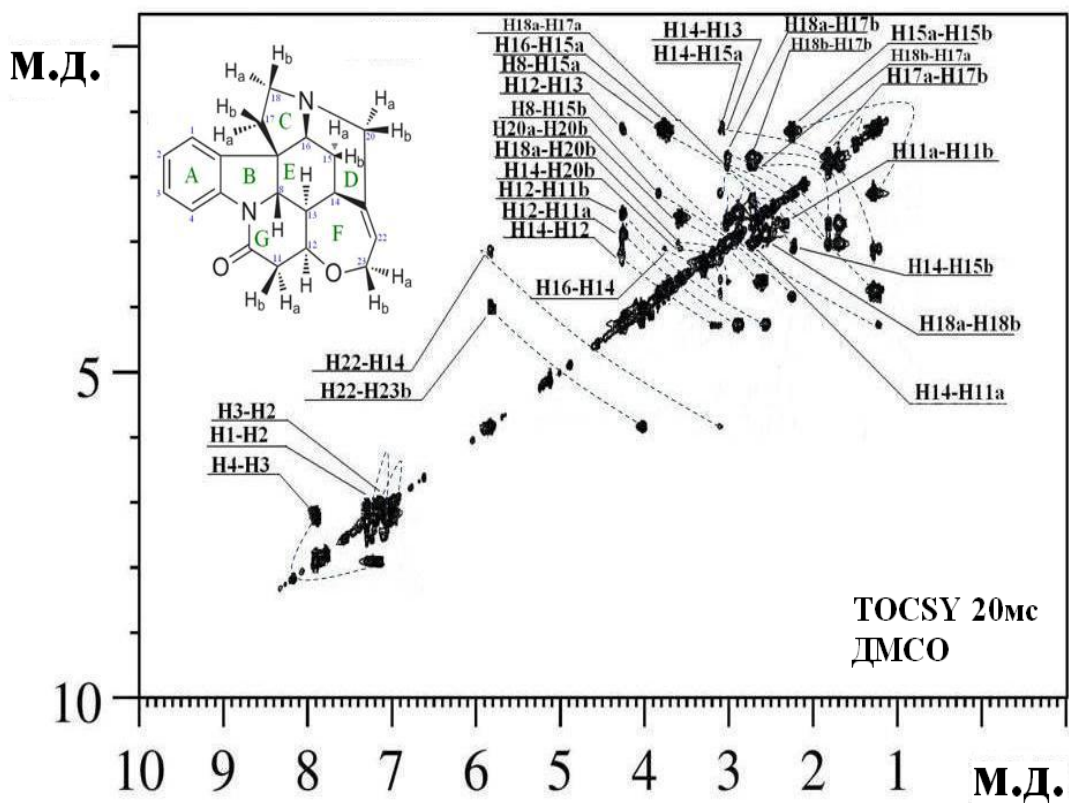
М.Д.



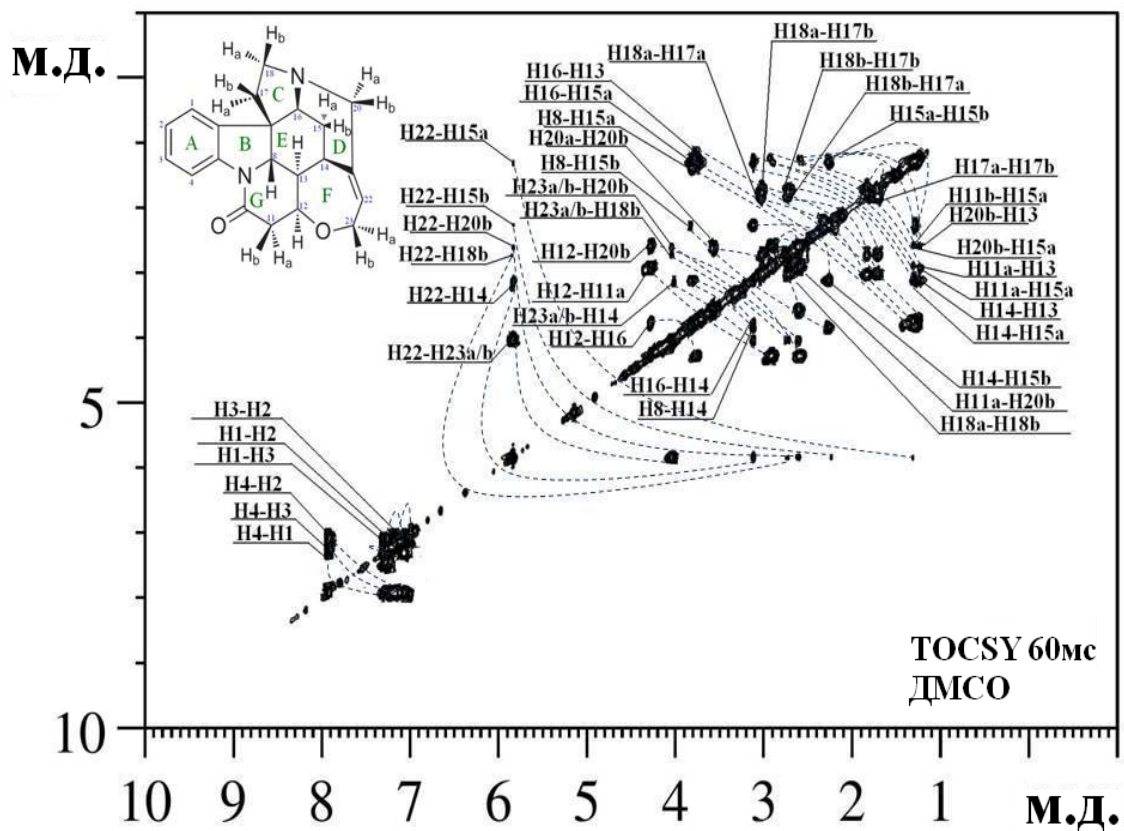
SI 14. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в хлороформе-д1



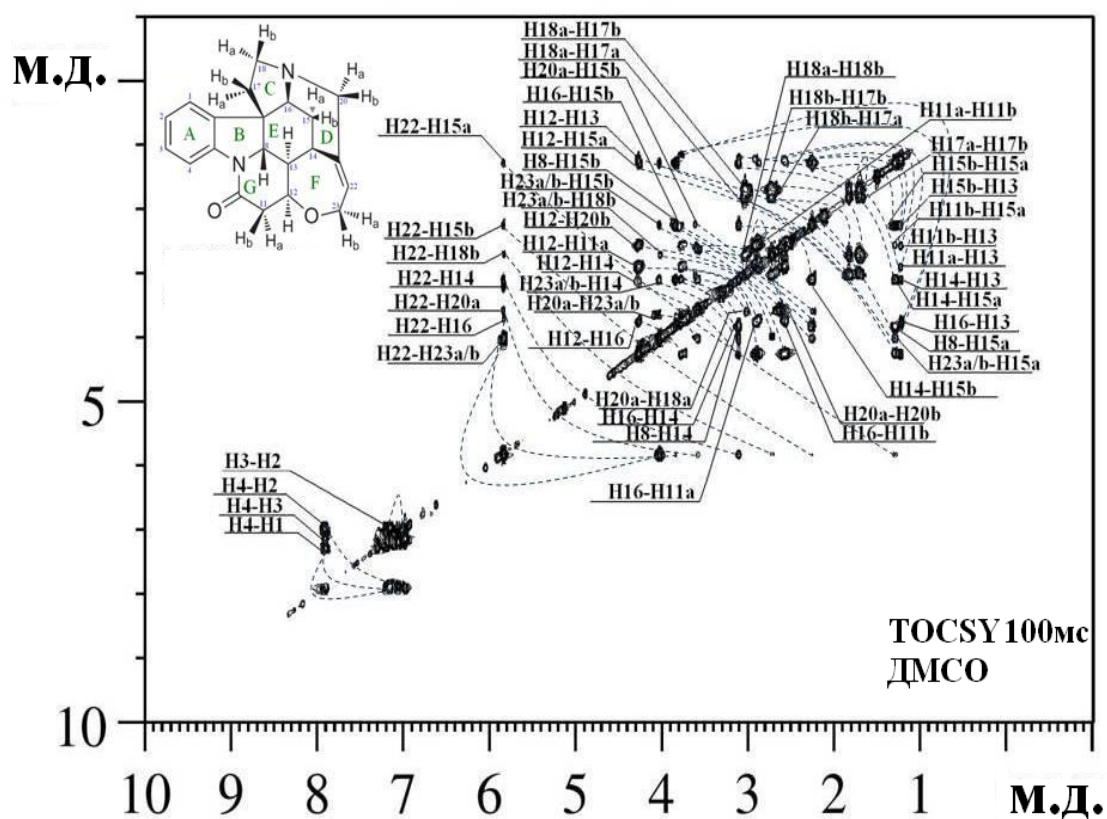
SI 15. ^1H - ^{13}C HSQC спектр стрихнина в хлороформе-д1



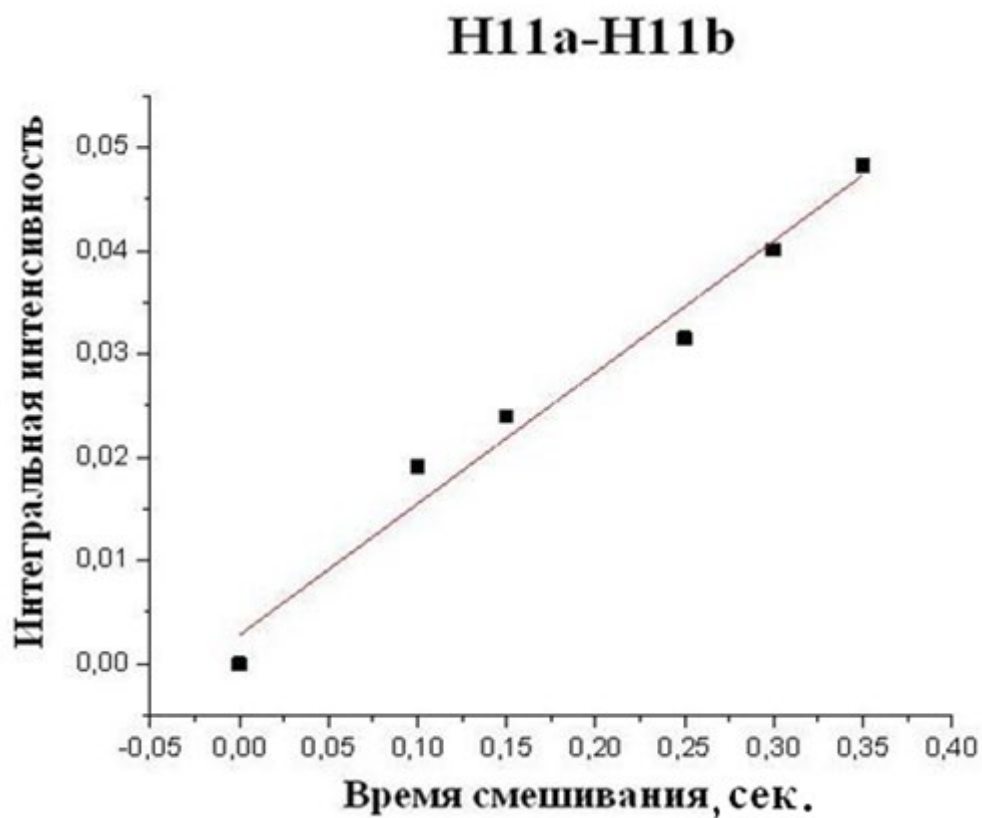
SI 16. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 20мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-д6



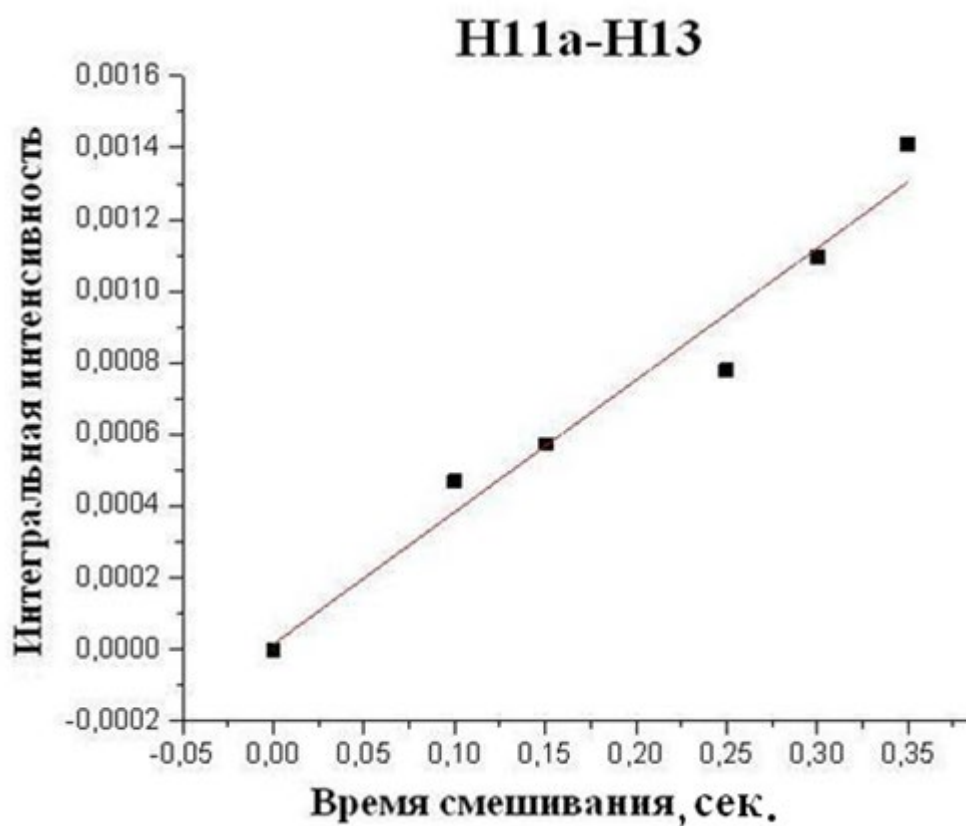
SI 17. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 60мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-дб



SI 18. ^1H - ^1H TOCSY (спин-лок 100мс) спектр стрихнина в диметилсульфоксиде-дб

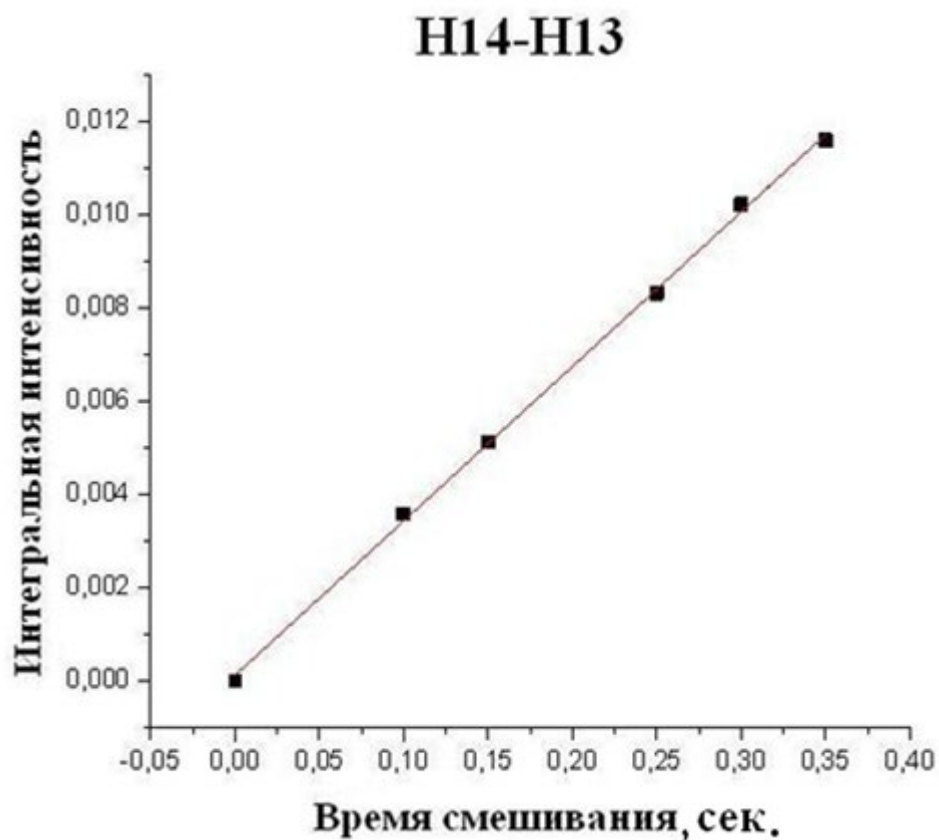


SI 19. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11a-H11b в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-

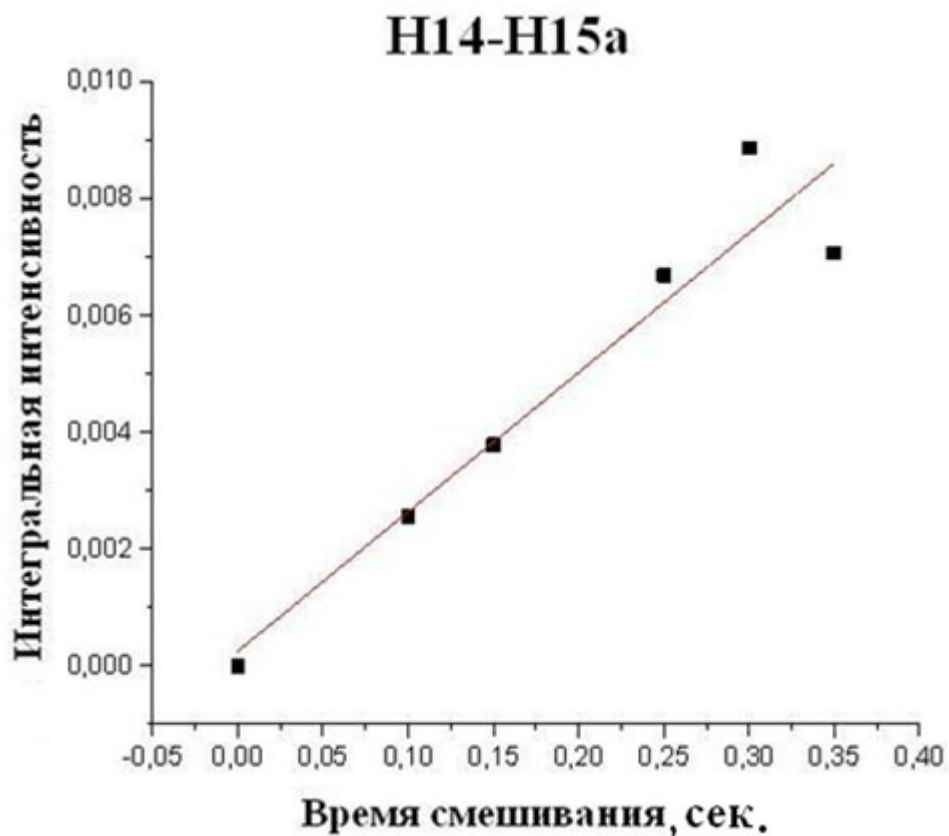


дб)

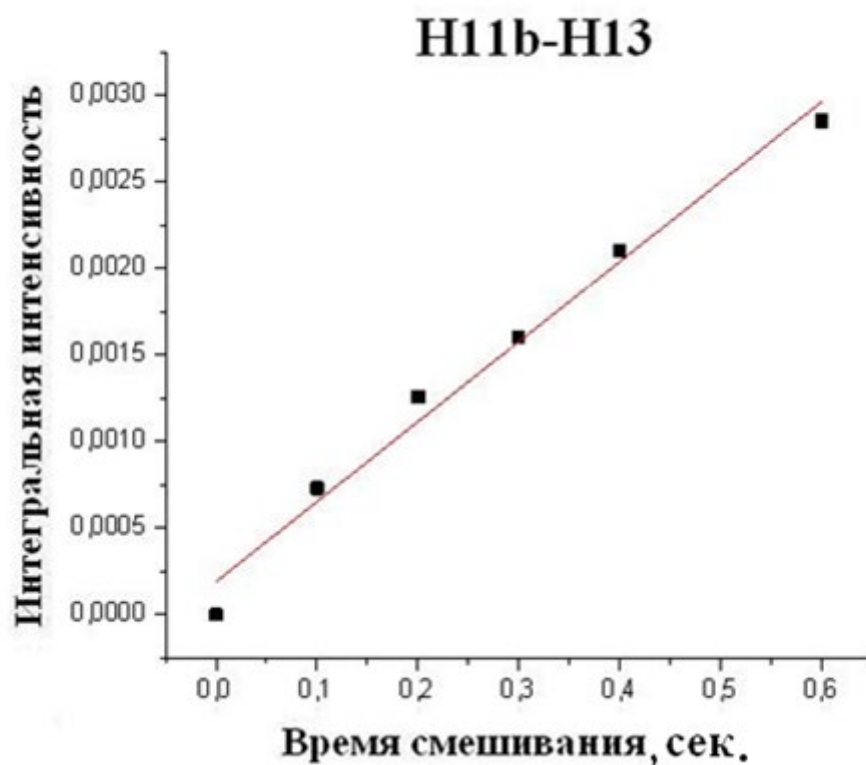
SI 20. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11a-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-дб)



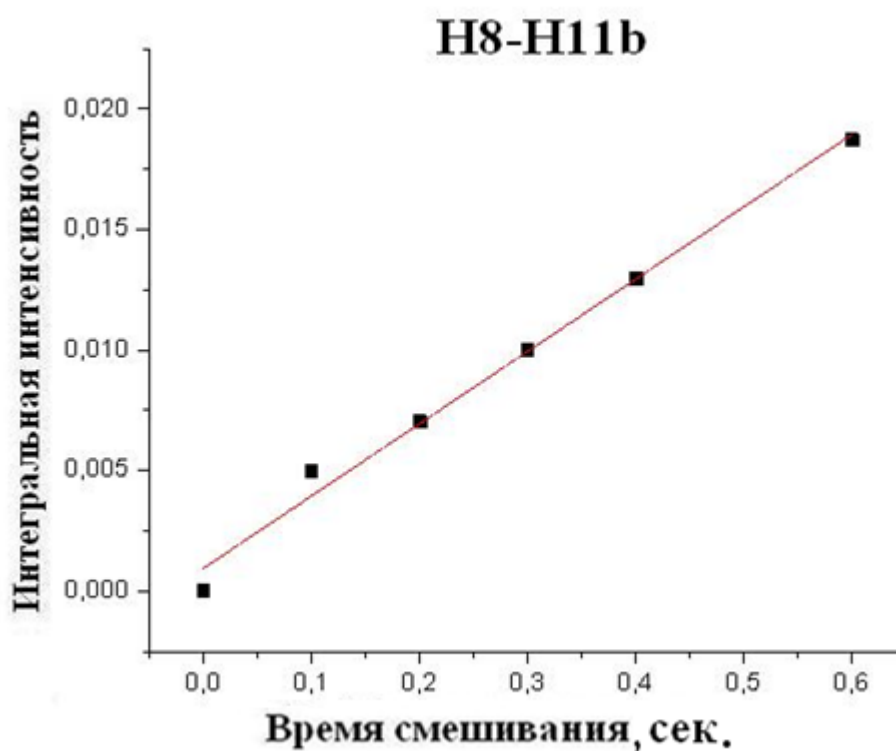
SI 21. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)



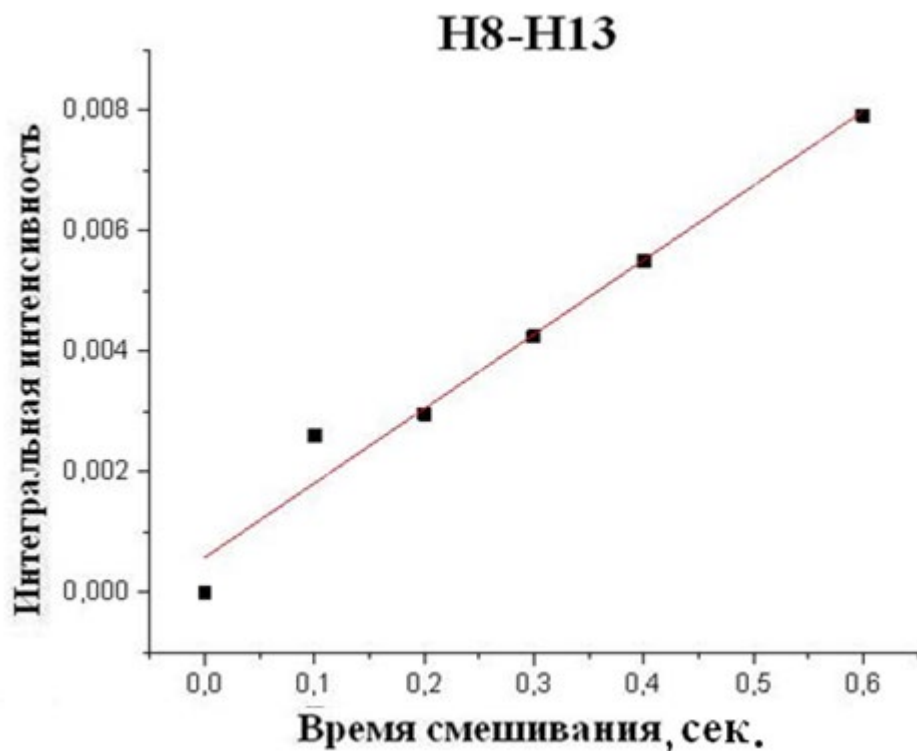
SI 22. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H15a в спектрах NOESY от времени смешивания (бензол-д6)



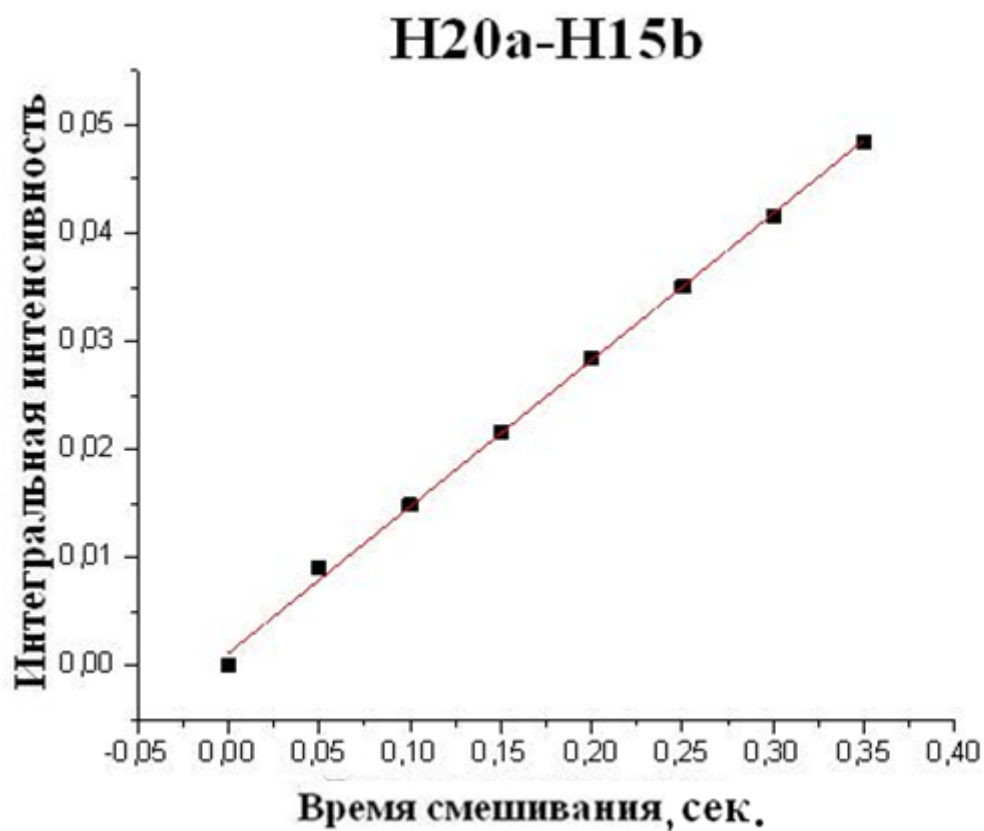
SI 23. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H11b-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ- d_1)



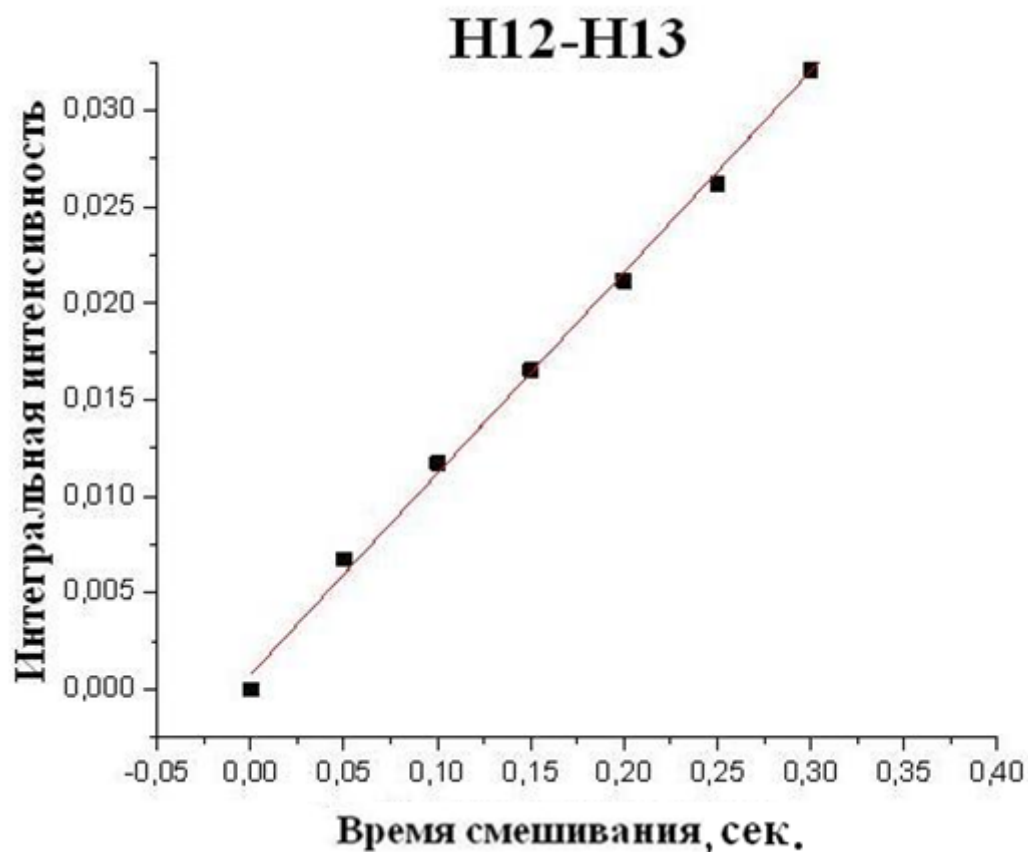
SI 24. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H8-H11b в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ- d_1)



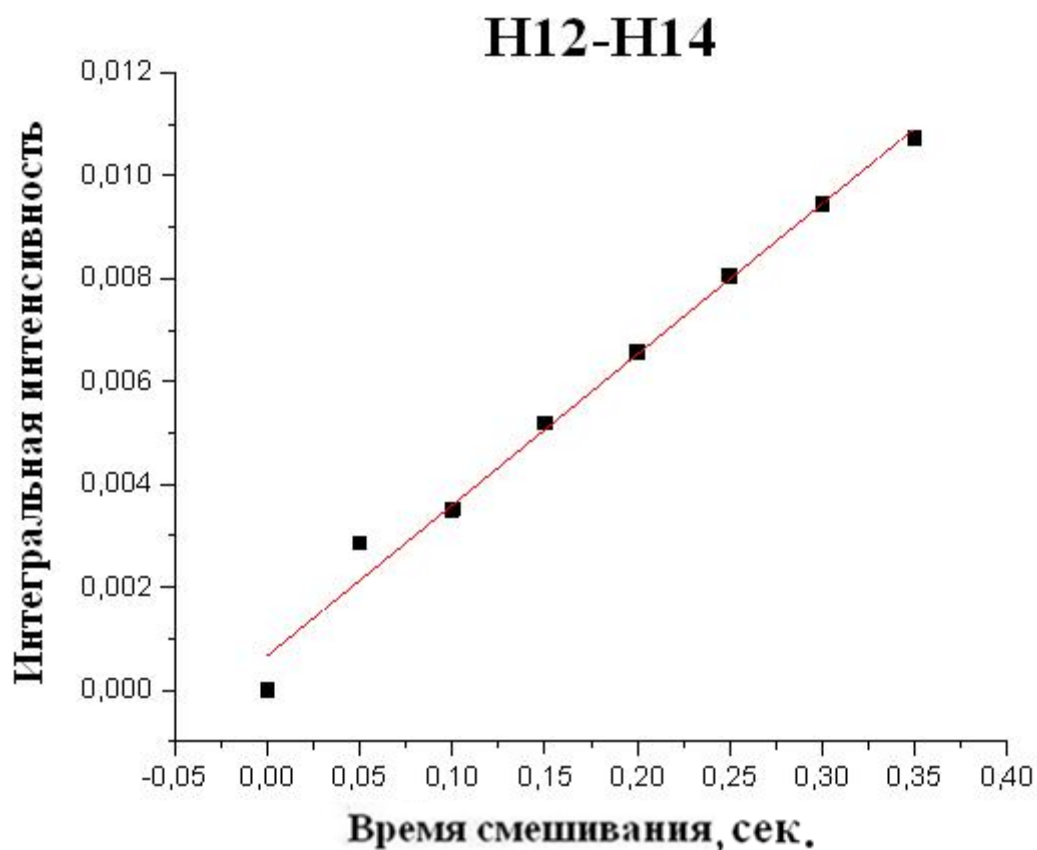
SI 25. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H8-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (хлороформ-д1)



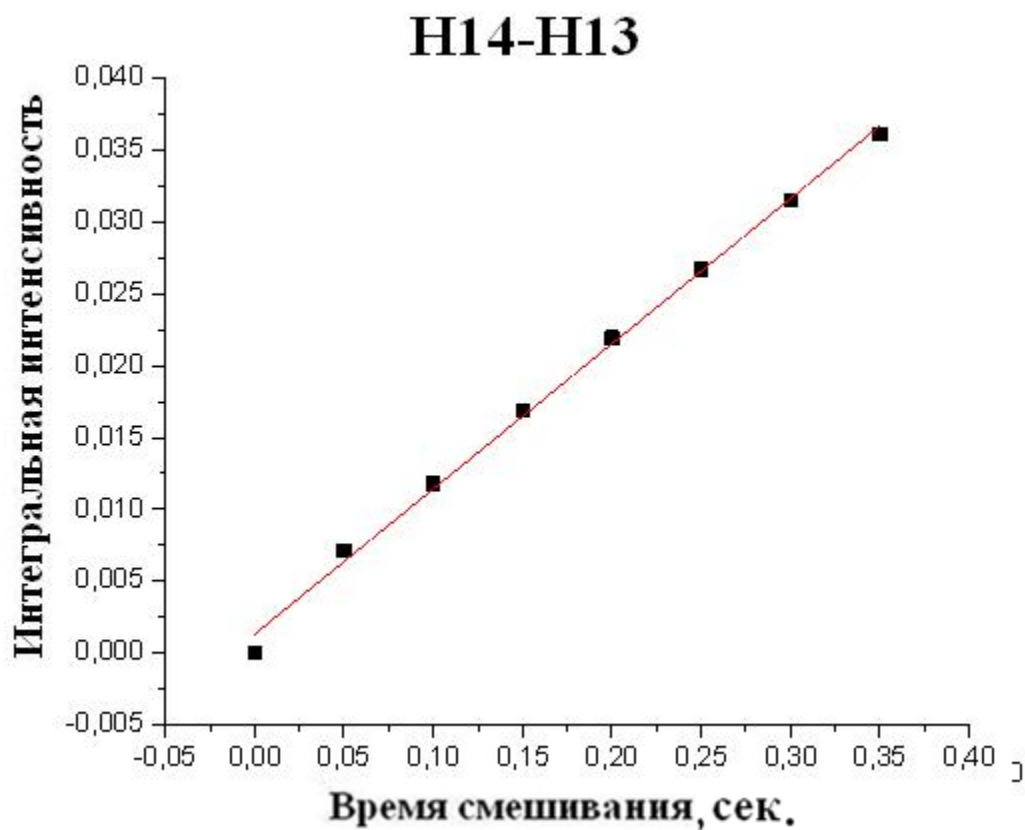
SI 26. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H20a-H15b в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)



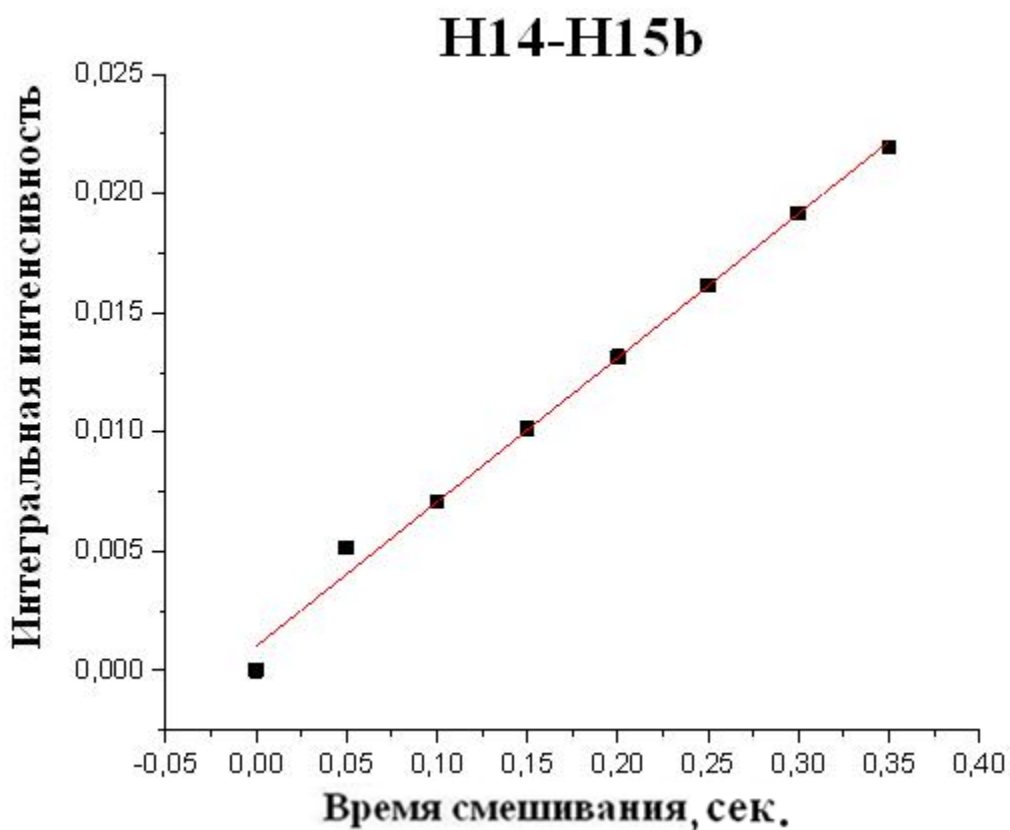
SI 27. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H12-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)



SI 28. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H12-H14 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)



SI 29. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H13 в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)



SI 30. Зависимость интегральной интенсивности сигнала H14-H15b в спектрах NOESY от времени смешивания (диметилсульфоксид-д6)

Таблица 1. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в бензоле- d_6

$\delta^{13}\text{C}$	обозначение ^1H	$\delta^{1\text{H}}$	HSQC	TOCSY			обозначение ^{13}C
				20мс	60мс	100мс	
26.44	H15a	0.87	C15-H15a	H15a-H14 H15a-H15b H15a-H16	H15a-H22 H15a-H16 H15a-H13 H15a-H14 H15a-H15b	H15a-H22 H15a-H16 H15a-H8 H15a-H23a H15a-H20b H15a-H14 H15a-H15b H15a-H13	C15
	H15b	1.79	C15-H15b	H15b-H16 H15b-H14 H15b-H15a	H15b-H22 H15b-H16 H15b-H13 H15b-H15a H15b-H14	H15b-H22 H15b-H16 H15b-H14 H15b-H15a H15b-H13 H15b-H18a	
31.28	H14	2.22	C14-H14	H14-H15b H14-H15a H14-H13	H14-H22 H14-H16 H14-H13 H14-H15a H14-H15b	H14-H22 H14-H16 H14-H15b H14-H15a H14-H13	C14
42.44	H11a	3.07	C11-H11a	H11a-H12 H11a-H11b	H11a-H12 H11a-H11b H11a-H13	H11a-H12 H11a-H8 H11a-H11b H11a-H13	C11
	H11b	2.65	C11-H11b	H11b-H12 H11b-H11a H11b-H16	H11b-H12 H11b-H11a H11b-H13	H11b-H12 H11b-H11a H11b-H8 H11b-H13	
42.62	H17a	1.62	C17-H17a	H17a-H18a H17a-H18b H17a-H17b	H17a-H18b H17a-H17b H17a-H18a	H17a-H18a H17a-H18b	C17
	H17b	1.49	C17-H17b	H17b-H18b H17b-H18a H17b-H17b-	H17b-H18a H17b-H18b H17b-	H17b-H18a H17b-H18b	

				H17a	H17a		
47.56	H13	0.39	C13-H13	H13-H8 H13-H14	H13-H22 H13-H8 H13-H11a H13-H11b H13-H14 H13-H15a H13-H15b	H13-H22 H13-H16 H13-H8 H13-H11a H13-H11b H13-H14 H13-H15b H13-H15a H13-H12	C13
50.13	H18a	2.95	C18-H18a	H18a-H18b H18a-H17a H18a-H17b	H18a-H18b H18a-H17b H18a-H17a	H18a-H18b H18a-H17b H18a-H17a H18a-H15b	C18
	H18b	2.51	C18-H18b	H18b-H18a H18b-H17b H18b-H17a	H18b-H18a H18b-H17b H18b-H17a	H18b-H18a H18b-H17b H18a-H15b H18b-17a	
52.05	-						C7
52.58	H20a	3.44	C20-H20a	H20a-H20b	H20a-H20b	H20a-H20b	C20
	H20b	2.36	C20-H20b	H20b-H20a	H20b-H20a H20b-H22	H20b-H20a H20b-H22 H20b-H16 H20b-H15a	
59.93	H8	3.60	C8-H8	H8-H13	H8-H13	H8-H11a H8-H11b H8-H15a H8-H13	C8
60.04	H16	3.77	C16-H16	H16-H15a H16-H11b H16-H15b	H16-H14 H16-H15a H16-H15b	H16-H14 H16-H20b H16-H15b H16-H15a H16-H13	C16
64.15	H23a	3.47	C23-H23a	H23a-H22 H23a-H23b	H23a-H22 H23a-H23b	H23a-H22 H23a-H23b H23a-H15a	C23
	H23b	3.76	C23-H23b	H23b-H22 H23b-H23a	H23b-H22 H23b-H23a	H23b-H22 H23b-H23a	
77.37	H12	3.50	C12-H12	H12-H11a H12-H11b	H12-H11a H12-H11b	H12-H11a H12-H11b H12-H13	C12
116.39	H4	8.69	C4-H4	H4-H3	H4-H3	H4-H3	C4

					H4-H2	H4-H2	
121.95	H1	6.87	C1-H1				C1
123.65	H2	6.89	C2-H2	H2-H3	H2-H4 H2-H3	H2-H4 H2-H3	C2
126.21	H22	5.38	C22- H22	H22-H23b H22-H23a	H22-H23b H22-H23a H22-H20b H22-H14 H22-H15b H22-H15a H22-H13	H22-H23b H22-H23a H22-H20b H22-H14 H22-H15b H22-H15a H22-H13	C22
128.44	H3	7.16	C3-H3	H3-H4 H3-H2	H3-H4 H3-H2	H3-H4 H3-H2	C3
132.09	-	-					C6
138.88	-	-					C21
143.18	-	-					C5
168.28	-	-					C10

Таблица 2. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в хлороформе- d_1

$\delta^{13}\text{C}$	обозначение ^1H	$\delta^{1\text{H}}$	HSQC	TOCSY			обозначение ^{13}C
				20мс	60мс	100мс	
26.95	H15a	2.38	C15- H15a	H15a-H16 H15a-H14 H15a- H15b	H15a-H22 H15a-H16 H15a-H14 H15a- H15b	H15a-H22 H15a-H16 H15a-H8 H15a-H14 H15a- H15b	C15
	H15b	1.49	C15- H15b	H15b- H15a H15b- H11a H15b-H16	H15b-H22 H15b-H16 H15b- H15a H15b-H14	H15b-H22 H15b-H8 H15b-H16 H15b-H14 H15b- H15a	
31.73	H14	3.18	C14- H14	H14-H15a H14-H22	H14-H22 H14-H16 H14-H8 H14-H23b H14-H23a H14-H15a H14-H15b H14-H13	H14-H22 H14-H16 H14-H8 H14-H23a H14-H23b H14-H20a H14-H15a H14-H15b H14-H13	C14
42.64	H11a	3.16	C11- H11a	H11a-H12 H11a-H13 H11a- H15b H11a-	H11a-H12 H11a- H11b	H11a-H12 H11a- H11b	C11

				H11b			
	H11b	2.69	C11-H11b	H11b-H12 H11b-H11a	H11b-H12 H11b-H16 H11b-H11a H11b-H13	H11b-H12 H11b-H16 H11b-H11a	
42.95	H17a/b	1.92	C17-H17a/b	H17a/b-H18b H17a/b-H18a	H17a/b-H18a H17a/b-H18b	H17a/b-H18a H17a/b-H18b	C17
48.35	H13	1.30	C13-H13	H13-H8 H13-H11a H13-H12	H13-H8 H13-H14 H13-H11b	H13-H12 H13-H8 H13-H14	C13
50.52	H18a	3.26	C18-H18a	H18a-H18b H18a-H17a/b	H18a-H18b H18a-H17a/b	H18a-H18b H18a-H17a/b	C18
	H18b	2.89	C18-H18b	H18b-H18a H18b-H17a/b	H18b-H8 H18b-H18a H18b-H17a/b	H18b-H8 H18b-H18a H18b-H17a/b	
52.12	-						C7
52.81	H20a	3.75	C20-H20a	H20a-H20b	H20a-H22 H20a-H20b	H20a-H22 H20a-H20b H20a-H14	C20
	H20b	2.78	C20-H20b	H20b-H20a	H20b-H22 H20b-H20a H20b-H23a	H20b-H22 H20b-H20a H20b-H23b H20b-H23a	
60.23	H8	3.88	C8-H8	H8-H13	H8-H14 H8-H18b H8-H13	H8-H14 H8-H18b H8-H15a H8-H13 H8-H15b	C8
60.40	H16	4.00	C16-H16	H16-H15a H16-H15b	H16-H14 H16-H15a H16-H11b H16-H15b	H16-H14 H16-H11b H16-H15a H16-H15b	C16
64.75	H23a	4.16	C23-H23a	H23a-H22 H23a-H23b	H23a-H22 H23a-H23b H23a-H14 H23a-H20b	H23a-H22 H23a-H14 H23a-H20b	C23
	H23b	4.09	C23-H23b	H23b-H22 H23b-H23a	H23b-H22 H23b-H23a H23b-H14	H23b-H14 H23b-H20b	

77.76	H12	4.30	C12-H12	H12-H11a H12-H11b H12-H13	H12-H11a H12-H11b	H12-H11a H12-H11b H12-H13	C12
116.41	H4	8.12	C4-H4	H4-H3	H4-H3 H4-H1 H4-H2	H4-H1 H4-H3 H4-H2	C4
122.45	H1	7.18	C1-H1	H1-H2 H1-H3	H1-H4 H1-H3 H1-H2	H1-H4	C1
124.42	H2	7.11	C2-H2	H2-H3 H2-H1	H2-H4 H2-H3 H2-H1	H2-H3 H2-H4	C2
127.80	H22	5.94	C22-H22	H22-H23b H22-H23a H22-H14	H22-H23b H22-H23a H22-H20a H22-H14 H22-H20b H22-H15a H22-H15b	H22-H23a H22-H20a H22-H14 H22-H20b H22-H15a H22-H15b	C22
128.80	H3	7.27	C3-H3	H3-H4 H3-H2 H3-H1	H3-H4 H3-H1 H3-H2	H3-H2 H3-H4	C3
134.12	-	-					C6
140.36	-	-					C21
142.37	-	-					C5
169.45	-	-					C10

Таблица 3. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C , а так же внутримолекулярные взаимодействия молекулы стрихнина в диметилсульфоксиде- d_6

$\delta^{13}\text{C}$	обозначение ^1H	$\delta^1\text{H}$	HSQC	TOCSY			обозначение ^{13}C
				20мс	60мс	100мс	
26.23	H15a	1.29	C15-H15a	H15a-H16 H15a-H8 H15a-H14 H15a-H15b	H15a-H22 H15a-H8 H15a-H16 H15a-H14 H15a-H11a H15a-H15b H15a-H20b H15a-H11b	H15a-H22 H15a-H12 H15a-H23a/b H15a-H8 H15a-H14 H15a-H11b H15a-H15b	C15
	H15b	2.26	C15-H15b	H15b-H8 H15b-H15a H15b-H14	H15b-H8 H15b-H22 H15b-H15a H15b-H14	H15b-H22 H15b-H23a/b H15b-H8 H15b-H16 H15b-H20a H15b-H15a	

						H15b-H13 H15b-H14	
30.78	H14	3.11	C14- H14	H14-H22 H14-H11a H14-H13 H14-H15a H14-H12 H14-H20a H14-H16 H14-H15b	H14-H22 H14- H23a/b H14-H8 H14-H16 H14-H15a H14-H13 H14-H15b	H14-H22 H14-H12 H14- H23a/b H14-H8 H14-H16 H14-H15a H14-H13 H14-H15b	C14
41.68	H11a	2.90	C11- H11a	H11a-H12 H11a -H14 H11a- H11b	H11a-H12 H11a-H13 H11a-H15a H11a- H20b	H11a-H12 H11a-H16 H11a-H13 H11a- H11b	C11
	H11b	2.58	C11- H11b	H11b-H12 H11b- H11a	H11b- H15a	H11b-H16 H11b-H13 H11b- H15a H11b- H11a	
42.28	H17a	1.83	C17- H17a	H17a-H18a H17a- H18b H17a- H17b	H17a- H17b H17a-H18a H17a- H18b	H17a- H17b H17a-H18a H17a- H18b	C17
	H17b	1.70	C17- H17b	H17b- H18a H17b- H18b H17b- H17a	H17b- H17a H17b- H18a H17b- H18b	H17b- H18a H17b- H18b	
47.29	H13	1.23	C13- H13	H13-H12 H13-H14	H13-H16 H13-H14 H13-H11a H13-H20b	H13-H12 H13-H16 H13-H14 H13-H11a H13-H11b H13-H15b	C13
49.91	H18a	3.01	C18- H18a	H18a- H18b H18a-H20a H18a- H17b H18a-H17a	H18a- H18b H18a- H17b H18a-H17a	H18a-H20a H18a- H17b H18a-H17a H18a- H18b	C18
	H18b	2.73	C18- H18b	H18b- H18a H18b- H17b H18b- H17a	H18b- H18a H18b-H22 H18b- H23a/b H18b-	H18b-H22 H18b- H23a/b H18b- H17b H18b-	

					H17b H18b- H17a	H17a H18b- H18a	
51.31	-						C7
52.05	H20b	2.60	C20- H20b	H20b- H20a	H20b- H20a H20b-H22 H20b-H12 H20b- H23a/b H20b-H13 H20b- H15a H20b- H11a	H20b-H12 H20b- H20a	C20
	H20a	3.58	C20- H20a	H20a- H20b H20a-H14 H20a-H18a	H20a- H20b	H20a-H22 H20a- H23a/b H20a- H15b H20a-H18a H20a- H20b	
59.61	H8	3.83	C8-H8	H8-H15b H8-H15a	H8-H15b H8-H15a H8-H14	H8-H14 H8-H15b H8-H15a	C8
69.64	H16	3.78	C16- H16	H16-H15a H16-H14	H16-H12 H16-H14 H16-H13 H16-H15a	H16-H22 H16-H12 H16-H13 H16-H11a H16-H11b H16-H15b H16-H14	C16
63.60	H23a/b	4.04	C23- H23a/b	H23a/b- H22	H23a/b- H22 H23a/b- H14 H23a/b- H20b H23a/b- H18b	H23a/b- H22 H23a/b- H20a H23a/b- H14 H23a/b- H18b H23a/b- H15b H23a/b- H15a	C23
76.52	H12	4.28	C12- H12	H12-H11a H12-H11b H12-H13 H12-H14	H12-H16 H12-H11a H12-H20b	H12-H16 H12-H11a H12-H20b H12-H15a H12-H13 H12-H14	C12

114.98	H4	7.92	C4-H4	H4-H3	H4-H3 H4-H1 H4-H2	H4-H1 H4-H2 H4-H3	C4
122.81	H1	7.31	C1-H1	H1-H2	H1-H2 H1-H4 H1-H3	H1-H4	C1
123.64	H2	7.07	C2-H2	H2-H1 H2-H3	H2-H4 H2-H1 H2-H3	H2-H4 H2-H3	C2
126.81	H22	5.83	C22- H22	H22- H23a/b H22-H14	H22- H23a/b H22-H14 H22-H20b H22-H18b H22-H15b H22-H15a	H22- H23a/b H22-H20a H22-H16 H22-H14 H22-H18b H22-H15b H22-H15a	C22
128.00	H3	7.21	C3-H3	H3-H4 H3-H2	H3-H4 H3-H1 H3-H2	H3-H4 H3-H2	C3
133.17	-	-					C6
139.28	-	-					C21
141.99	-	-					C5
168.97	-	-					C10