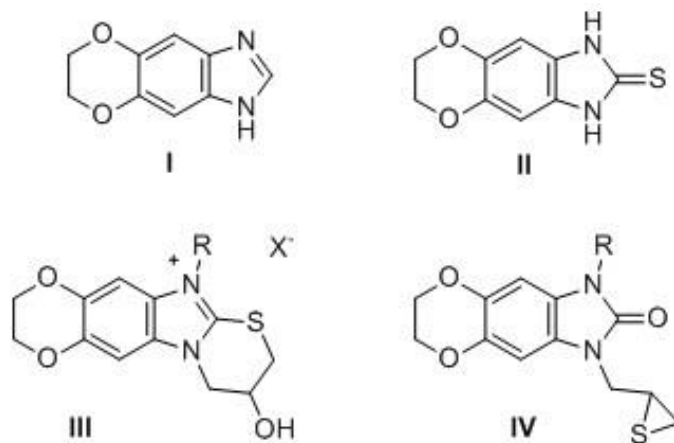


ОСОБЕННОСТИ ^1H ЯМР СПЕКТРОВ СЕРИИ ПРОИЗВОДНЫХ [1,4]ДИОКСАНО[2,3-*f*]БЕНЗИМИДАЗОЛА

Орлов М. А.

Институт физико-органической химии и углехимии им. Л. М. Литвиненко НАНУ
orlovinfou@yandex.ru

В ^1H ЯМР спектрах производных [1,4]диоксано[2,3-*f*]бензимидазола (I–IV) имеется ряд характерных особенностей, знание которых существенно облегчает их идентификацию и позволяет легко установить чистоту.



III, IV: **a** R = 4-ClC₆H₄COCH₂, **b** R = 4-BrC₆H₄COCH₂, **c** R = 4-MeC₆H₄COCH₂,
d R = 4-MeOC₆H₄COCH₂, **e** R = 4-MeC₆H₄CH₂, **f** R = 4-FC₆H₄CH₂, **g** R = PhCH₂;
III: **a, b, e–g** X[–] = Cl[–], **c, d** X = Br[–]

Так, для соединений I, II наблюдаются характерные сигналы метиленовых групп диоксанового фрагмента (4.21–4.23 м. д.), *мезо*-протона имидазола I (8.03 м. д.) и NH-протонов имидазолтиона II (12.20 м. д.). В ^1H ЯМР спектрах солей III а–г фрагмент 1,4-бензодиоксана ОСН₂СН₂О проявляется в виде синглета при 4.32–4.33 м. д. Для тиранов IV а–г он смещается в сильное поле (4.17–4.19 м. д.), что является закономерным следствием изменения заряда молекулы.

Характеристичными для солей III а–г являются сигналы протонов НО-группы в области 6.05–6.26 м. д., сигналы тиазинового цикла (3.48–3.66 м. д. для группы СН₂С, 4.25–4.46 м. д. для группы NCH₂ и 4.64–4.74 м. д. для протона СНОН) и метиленовой группы заместителей (5.50–5.57 м. д. для бензильных и 6.10–6.19 м. д. для фенацильных производных).

Для 2,3-эпитиопропильного фрагмента соединений IV а–г характерны мультиплет (2.46–2.54 м. д.) и дублет (2.57–2.59 м. д.) тиранового цикла, обусловленные геминальным и вицинальным расщеплениями протонов, а также два дублета дублетов протонов фрагмента NCH₂ (3.93–4.11 м. д.) и мультиплет протона СНС (3.19–3.29 м. д.).