ВСТАНОВЛЕННЯ ТАУТОМЕРНОЇ ФОРМИ ОСНОВИ ШИФФА ГОСИПОЛУ З 3-АМІНО-5-МЕТИЛІЗОКСАЗОЛОМ В ТВЕРДОМУ СТАНІ

Дикун О. М., Редько А. М., Аніщенко В. М., Рибаченко В. І.
Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України, Київ, Україна
amdykun@gmail.com

Імінопохідні госиполу – це сполуки на основі природного поліфенолу, госиполу, що мають виражену біологічну активність. Різноманіття біологічних властивостей імінопохідних госиполу значною мірою обумовлене їхнім існуванням у різних таутомерних формах (дієнамінній і діімінній). Для визначення таутомерної форми основи Шиффа госиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом в твердому стані, було проведено реєстрацію ІЧ спектра в таблетці KBr і квантово-хімічні розрахунки ІЧ спектрів дієнамінної і діімінної таутомерних форм цієї сполуки.

Експериментальний ІЧ спектр основи Шиффа госиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом і розрахований ІЧ спектр дієнамінної таутомерної форми добре узгоджуються між собою. Так, практично співпадають смуги поглинання, що відповідають $\nu(O_{1,1'}\text{-}H)$ і $\nu(O_{6,6'}\text{-}H)$. В експериментальному спектрі при 1605 $см^{-1}$ спостерігається інтенсивна смуга поглинання, якій в розрахованому спектрі (дієнамінна форма) відповідає смуга при 1604 $см^{-1}$, обумовлена коливанням $\delta(N_{13,13'}\text{-}H)+\nu(C_{15,15'}=C_{16,16'})+\nu(C_{7,7'}=O)$. Однак, розрахункові дані свідчать, що внесок потенційної енергії коливання $\nu(C_{7,7'}=O)$ для смуги при 1604 $см^{-1}$ складає всього 2,7 %. А найбільший внесок потенційної енергії $\nu(C_{7,7'}=O)$ спостерігається для смуги, що має середню інтенсивність і знаходиться при 1576 $см^{-1}$ (39,0 %). Таке нехарактерне для карбонільної групи положення смуги поглинання в спектрі може бути обумовлене утворенням внутрішньомолекулярних водневих зв'язків O–H•••O=C і N–H•••O=C. В розрахованому ІЧ спектрі діімінної таутомерної форми, окрім смуг поглинання, що відповідають $\nu(O_{1,1'}\text{-}H)$ і $\nu(O_{6,6'}\text{-}H)$, з'являється додаткова інтенсивна смуга поглинання в області 3000 $см^{-1}$, що відповідає $\nu(O_{7,7'}\text{-}H)$. Інтенсивна смуга при 1604 $см^{-1}$ (що є характерною для імінопохідних госиполу в дієнамінній формі) зникає, а замість неї з'являється інтенсивна смуга поглинання при 1564 $см^{-1}$, що відповідає $\nu(C=N)+\nu(C=C)$. Отже, зіставлення експериментального і розрахованих ІЧ спектрів основи Шиффа госиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом свідчить, що в твердому стані ця сполука існує в дієнамінній таутомерій формі.

Таким чином, сумісне використання ІЧ спектроскопії і квантово-хімічних розрахунків дозволяє встановити таутомерні форми імінопохідних госиполу.

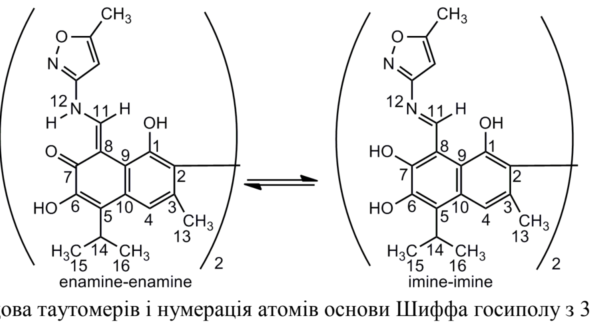

Рис. 1. Будова таутомерів і нумерація атомів основи Шиффа госиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом