

## <sup>1</sup>H ЯМР СПЕКТРОСКОПІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ БУДОВИ ОСНОВИ ШИФФА ГОСИПОЛУ З 4-НІТРОАНІЛІНОМ

*Дикун О. М., Аніщенко В. М., Редько А. М., Рибаченко В. І.*

Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України,  
Київ, Україна  
amdykun@gmail.com

Інтерес до імінопохідних госиполу (основ Шиффа і гідразонів) обумовлено наявністю різноманітних «корисних» біологічних властивостей (антиоксидантних, противірусних, гепатопротекторних, протипухлинних) і водночас їхньою меншою токсичністю ніж вихідний госипол. Імінопохідним притаманна дієнамінно-діємінна таутомерія, причому стан таутомерної рівноваги у значній мірі впливає на їхні біологічні властивості, що спонукає досліджувати як будову імінопохідних так і їхні таутомерні перетворення.

В даній роботі методом <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії проведено дослідження будови і таутомерії основи Шиффа госиполу з 4-нітроаніліном (GDNA) (рис. 1) в розчині CDCl<sub>3</sub>.

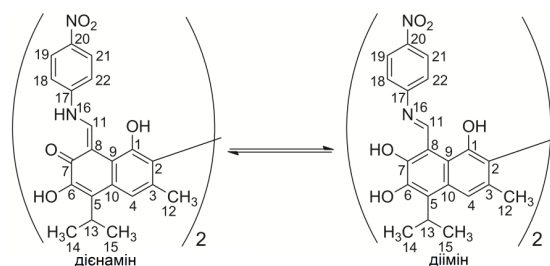


Рис. 1. Будова таутомерів і нумерація атомів GDNA

Згідно даних <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії GDNA в розчині CDCl<sub>3</sub> існує у дієнамінній таутомерній формі. Про це свідчить наявність в спектрі дублету з константою спин-спінової взаємодії <sup>3</sup>J<sub>HN,CH</sub> = 11,6 Гц при δ = 14,83 м.ч. від протона N(16)-H групи і відповідного дублету від протона C(11)-H групи при δ = 10,11 м.ч. Достатньо високе значення константи спин-спінової взаємодії <sup>3</sup>J<sub>HN,CH</sub> свідчить про антиперипланарне розташування протонів C(11)-H і N(16)-H груп. Значний зсув сигналу протона N(16)-H групи в слабе поле можна пояснити утворенням внутрішньомолекулярного водневого зв'язку N(16)-H...O=C(7). У <sup>1</sup>H ЯМР спектрі GDNA також присутні два дублети, що частково перекриваються, від протонів C(14)-H<sub>3</sub> і C(15)-H<sub>3</sub> груп при δ = 1,54 м.ч. і δ = 1,56 м.ч. (<sup>3</sup>J<sub>HC,CH</sub> = 6,5 Гц). Магнітна нееквівалентність C(14)-H<sub>3</sub> і C(15)-H<sub>3</sub> груп обумовлена їхньою діастереотопністю. Синглет метильної групи C(12)-H<sub>3</sub> знаходиться при δ = 2,17 м.ч., а мультиплет протона C(13)-H при δ = 3,71 м.ч. Гідроксильний протон C(1)O-H дає синглет при δ = 5,82 м.ч., а протон C(6)O-H – синглет при δ = 7,69 м.ч., що характерно для імінопохідних госиполу в дієнамінній таутомерній формі. Зсув у слабе поле сигналу цього протона порівняно з протоном C(1)O-H групи, обумовлено утворенням внутрішньомолекулярного водневого зв'язку C(6)O-H...O=C(7). Ароматичний протон C(4)-H дає синглет при δ = 7,64 м.ч., а протони C(18)-H, C(22)-H і C(19)-H, C(21)-H дублети при δ = 7,36 м.ч. і δ = 8,23 м.ч., відповідно з константою спин-спінової взаємодії <sup>3</sup>J<sub>HN,CH</sub> = 8,7 Гц.

Таким чином, на основі даних <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопії підтверджено будову основи Шиффа госиполу з 4-нітроаніліном і знайдено, що в розчині CDCl<sub>3</sub> вона існує в дієнамінній таутомерній формі, що є характерним для цього класу сполук. Встановлено утворення внутрішньомолекулярних водневих зв'язків N(16)-H...O=C(7) і C(6)O-H...O=C(7), які вочевидь мають вирішальне значення для стабілізації дієнамінної таутомерної форми.