

¹H ЯМР СПЕКТРОСКОПІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ БУДОВИ ОСНОВ ШИФФА ГОСИПОЛУ З НАТРІЄВИМИ СОЛЯМИ ГЛІЦИНУ І ЦИСТЕЇНУ

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

Госипол – це поліфенол і природний токсин, що переважно міститься в насінні бавовни і є частиною системи захисту рослини від патогенних впливів грибків і комах. Інтерес наукової спільноти до цього класу сполук обумовлено широким спектром «корисних» біологічних властивостей (антиоксидантних, протипухлинних, гепатопротекторних, протипухлинних). Водночас певна токсичність госиполу і погана розчинність у воді спонукають до пошуку його похідних, які б зберігали біологічну активність і були б позбавлені вказаних вад. Одним зі шляхів вирішення цієї проблеми є модифікація госиполу шляхом утворення основ Шиффа або гідразонів. Синтез α-амінокислотних імінопохідних госиполу – дуже перспективний напрям отримання потенційних лікарських засобів, адже ці сполуки характеризуються меншою токсичністю ніж вихідний госипол і підвищеною водорозчинністю, що сприяє покращенню біодоступності.

Нами синтезовано основи Шиффа госиполу з натрієвими солями гліцину і цистеїну (рис. 1). Відомо, що імінопохідні госиполу можуть існувати у двох таутомерних формах: дієнамінній і діімінній. За допомогою методів ¹H ЯМР спектроскопії встановлено будову і таутомерні форми одержаних сполук у DMSO-d₆.

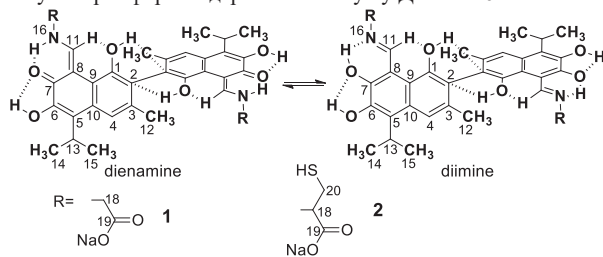


Рис. 1. Будова таутомерів і нумерація атомів основ Шиффа госиполу з натрієвими солями гліцину (1) і цистеїну (2)

Дані ¹H ЯМР спектрів свідчать, що

сполуки **1** і **2** в розчині DMSO-d₆ існують у дієнамінній формі. Це підтверджується наявністю в спектрах досліджуваних сполук сигналів протонів N(16)-H груп в області δ=13,0–13,5 м.ч. Положення сигналів цих протонів у слабкому полі обумовлено утворенням внутрішньомолекулярних водневих зв'язків N(16)-H...O=C(7). У ¹H ЯМР спектрах досліджуваних імінопохідних госиполу в області δ=1,40–1,50 м.ч. присутні два дублета, що частково перекриваються, від протонів C(14)-H і C(15)-H груп (³J_{HC,CH}≈6,5 Гц). Таке положення сигналів цих протонів обумовлене діастереотопністю груп C(14)-H і C(15)-H. При δ≈2,0 м.ч. наявні сигнали протонів C(12)-H груп, а в області δ=3,6–3,9 м.ч. – сигнали протонів C(13)-H. Слід зауважити, що наявність центра хіральності в молекулі цистеїну (асиметричний атом карбону C(18)) і вісі хіральності у госиполу (C(2)-C(2')), приводить до появи декількох діастереомерів отриманого імінопохідного. І тому в ¹H ЯМР спектрі сполуки **2** спостерігаються розширення і розщеплення деяких сигналів. Синглети протонів C(4)-H груп досліджуваних сполук знаходяться в області δ=7,3–7,6 м.ч., а сигнали метиленових протонів імінних фрагментів в області δ=3,9–4,7 м.ч.

Таким чином, одержано основи Шиффа госиполу з натрієвими солями гліцину і цистеїну і досліджено їхню будову. Встановлено, що ці сполуки існують у розчині DMSO-d₆ у дієнамінній таутомерній формі.