

## ЯМР СПЕКТРОСКОПІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ОСНОВ ШИФФА ГОСИПОЛУ З 3,4-ДИГІДРОКСИБЕНЗИЛАМІНОМ І 3-ЙОДБЕНЗИЛАМІНОМ

*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

Серед поліфенольних сполук рослинного походження особливу увагу привертає госипол – пігмент жовтого кольору, що знаходиться у різних частинах бавовнику і має виражену біологічну активність, зокрема протигрибкову, протівірусну та протипухлинну. Але широкому застосуванню госиполу в фармації заважає його токсичність, яку зазвичай пов'язують з наявністю альдегідних груп у молекулі. Тому перспективним підходом для вирішення цієї проблеми є отримання імінопохідних госиполу (основ Шиффа і гідразонів). Така структурна модифікація сприяє зниженню токсичної дії вихідної сполуки з одночасним збереженням, а в окремих випадках – підсиленням та урізноманітненням її корисних біологічних властивостей.

Відомо, що імінопохідні госиполу існують в розчинах у двох таутомерних формах: діенамінній і діімінній. За допомогою  $^1\text{H}$  і  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектроскопії нами досліджено будову і встановлено таутомерні форми основ Шиффа госиполу з 3,4-дигідроксисбензиламіном і 3-йодбензиламіном в розчинах ДМСО- $d_6$  (рис. 1).

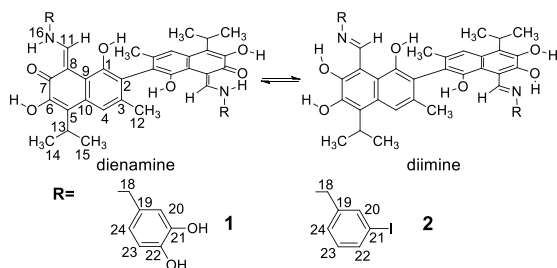


Рис. 1. Будова таутомерів і нумерація атомів основ Шиффа госиполу з 3,4-дигідроксисбензиламіном (1) і 3-йодбензиламіном (2)

В  $^1\text{H}$  ЯМР спектрах досліджуваних сполук присутні сигнали протонів N(16)-H груп в області  $\delta = 13,4\text{--}13,5$  м.ч. Положення сигналів цих протонів у слабкому полі може бути обумовлено утворенням внутрішньомолекулярних водневих зв'язків N(16)-H $\cdots$ O=C(7). Сигнали протонів C(11)-H знаходяться в області  $\delta = 9,5\text{--}10,0$  м.ч. і проявляються як дублети внаслідок спин-спінової взаємодії з протонами N(16)-H груп ( $^3J_{\text{HN,CH}} = 11,85$  Гц і  $^3J_{\text{HN,CH}} = 12,65$  Гц, для **1** і **2** відповідно), що вказує на реалізацію діенамінної таутомерної форми для досліджуваних сполук в розчинах ДМСО- $d_6$ . Достатньо високі значення констант  $^3J_{\text{HN,CH}}$  свідчать про антиперипланарну конформацію C(11)-H і N(16)-H груп. Синглети протонів C(1)O-H груп знаходяться в області  $\delta \approx 7,8$  м.ч., протонів C(6)O-H груп – при  $\delta = 8,39$  м.ч., а протонів O-H груп імінного фрагменту сполуки **1** знаходяться при  $\delta = 8,98$  м.ч.

У  $^{13}\text{C}$  ЯМР спектрах сигнали ядер C(7) сполук **1** і **2** зсунуті в слабе поле ( $\delta = 171\text{--}172$  м.ч.), що свідчить про наявність карбонільних груп C(7)=O в структурі молекул (діенамінна форма). Адже у випадку реалізації діімінної таутомерної форми, сигнали цих ядер мали б хімічний зсув  $\delta \approx 150$  м.ч., що є характерним для фенольних гідроксильних груп.

Таким чином, було досліджено будову основ Шиффа госиполу з 3,4-дигідроксисбензиламіном і 3-йодбензиламіном, і встановлено, що ці сполуки існують у розчині ДМСО- $d_6$  у діенамінній таутомерній формі.