

## ЯМР СПЕКТРОСКОПІЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ТАУТОМЕРНИХ РІВНОВАГ ОСНОВИ ШИФФА ГОССИПОЛУ З 3-АМІНО-5-МЕТИЛІЗОКСАЗОЛОМ

Дикун О. М.<sup>1</sup>, Редько А. М.<sup>1</sup>, Рибаченко В. І.<sup>1</sup>, Чотій К. Ю.<sup>1</sup>, Ількевич Н. С.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

<sup>2</sup>Житомирський державний університет ім. Івана Франка

amdykun@gmail.com

Методами <sup>1</sup>H і <sup>13</sup>C ЯМР спектроскопії було досліджено таутомерні рівноваги основи Шиффа госсиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом. На відміну від вивчених раніше імінопохідних госсиполу, ця сполука існує в розчині одночасно у двох таутомерних формах: діенамінній і діімінній (рис. 1).

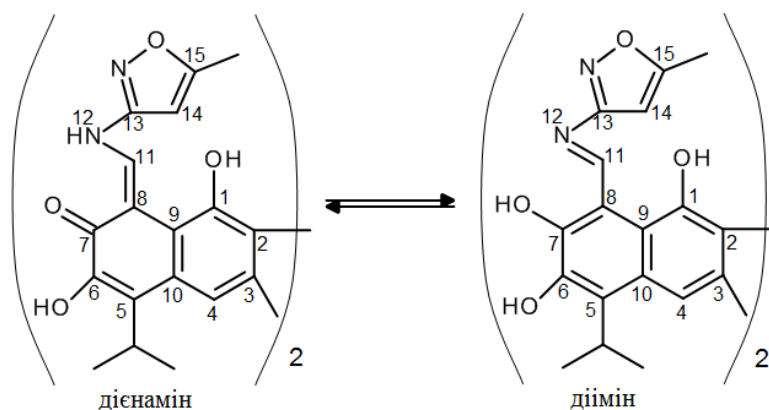


Рис. 1. Будова таутомерів і нумерація атомів основи Шиффа госсиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом

Аналіз <sup>1</sup>H ЯМР спектрів основи Шиффа госсиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом свідчить, що вміст діенамінної таутомерної форми при 293 К в CDCl<sub>3</sub> складає 100 %, в ДМФА d7 ~60 %, а в ДМСО d6 ~10 %. Вміст таутомерних форм визначали зі співвідношення інтенсивностей сигналів протонів C(11)–H діенамінної форми (в CDCl<sub>3</sub>  $\delta$  = 10,02 м. ч.; в ДМФА d7  $\delta$  = 10,51 м. ч.; в ДМСО d6  $\delta$  = 10,19 м. ч.) і C(14)–H (в CDCl<sub>3</sub>  $\delta$  = 5,97 м. ч.; в ДМФА d7  $\delta$  = 5,96 м. ч.; в ДМСО d6  $\delta$  = 5,70 м. ч.) груп. В <sup>1</sup>H ЯМР спектрі в ДМСО d6 присутній синглет протона C(7)–OH групи ( $\delta$  = 9,85 м. ч.). Сигнали при  $\delta$  = 14,42 м. ч. і  $\delta$  = 10,19 м. ч. віднесені до протонів N(12)–H і C(11)–H груп діенамінної таутомерної форми, відповідно (<sup>3</sup>J(HC, NH) = 10,9 Гц). Сигнал протона C(11)–H групи діімінної таутомерної форми значно зміщений в сильне поле ( $\delta$  = 7,20 м. ч.) у порівнянні з аналогічним сигналом діенамінної таутомерної форми ( $\delta$  = 10,19 м. ч.). При зміні температури в інтервалі 293–353 К в ДМСО d6 вміст діенамінної форми збільшується від ~10 % до ~80 %.

В <sup>13</sup>C ЯМР спектрі при 293 К в ДМСО d6 присутні сигнали атомів C(1), C(6), C(7) і C(11) діімінної таутомерної форми ( $\delta$  = 146,5 м. ч.;  $\delta$  = 139,1 м. ч.;  $\delta$  = 155,3 м. ч. і  $\delta$  = 167,7 м. ч., відповідно). Сигнали цих атомів діенамінної таутомерної форми реєструються з меншою інтенсивністю ( $\delta$  = 154,1 м. ч.;  $\delta$  = 146,3 м. ч.;  $\delta$  = 175,8 м. ч. і  $\delta$  = 150,7 м. ч., відповідно). Віднесення сигналів <sup>13</sup>C ЯМР спектра виконане за допомогою двомірних методик HMBSC і HSQC.

Таким чином, встановлено, що основа Шиффа госсиполу з 3-аміно-5-метилізоксазолом в CDCl<sub>3</sub> існує як діенамін, а в ДМСО d6 та ДМФА d7 у вигляді суміші двох таутомерних форм.