

Неэквивалентность химических сдвигов диастереотопных метиленовых протонов в ряду 5-этоксипроизводных 2(5H)-фуранона

© Латыпова Лилия Зиннуровна, Ежова Анна Сергеевна,
Сайгитбаталова Елена Шириповна, Курбангалиева*⁺ Альмира Рафаэловна,
Чмутова Галина Алексеевна

Лаборатория биофункциональной химии. Химический институт им. А.М. Бутлерова.
Казанский (Приволжский) федеральный университет. ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008.
Республика Татарстан. Россия. E-mail: akurbang@kpfu.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: диастереотопные протоны, спектроскопия ЯМР, гетероциклы, 2(5H)-фураноны, ненасыщенные лактоны.

Аннотация

Обнаружение химической неэквивалентности диастереотопных атомов – важная задача, решение которой позволяет правильно интерпретировать сложные спектры ЯМР, а также делать на основании спектральных данных выводы о тонкой структуре молекулы. В данной работе из мукохлорной кислоты и серо-, селен- и азотсодержащих реагентов синтезирована серия различных функциональных производных 5-этокси-2(5H)-фуранона (тиоэфиры, селеноэфиры, сульфоны, азид, иминофосфоран и амин). Все полученные соединения индивидуализированы и охарактеризованы методами ИК, ЯМР ¹H и ¹³C{¹H} спектроскопии. Наличие в молекуле 5-этокси-2(5H)-фуранона асимметрического атома углерода C⁵ и близкое расположение к нему этокси-группы сказывается на расщеплении сигналов оксиметиленовых протонов в спектрах ЯМР ¹H. Протоны этоксильной группы образуют АВX₃ спиновую систему и представлены в спектрах ЯМР ¹H триплетом метильных протонов и мультиплетом, соответствующим диастереотопным метиленовым протонам. Проведен анализ спектров ЯМР ¹H исследуемых гетероциклов, зарегистрированных в дейтерированных хлороформе, ацетоне и бензоле, и оценена величина неэквивалентности химических сдвигов диастереотопных метиленовых протонов ($\Delta\delta_{AB}$). Выявлено, что для большинства соединений величина неэквивалентности химических сдвигов диастереотопных метиленовых протонов обратно пропорциональна величине среднего химического сдвига метиленовых протонов и зависит от растворителя и природы заместителя у атома углерода C⁴ лактонного цикла. Введение заместителей в 3-е и/или 4-ое положения ненасыщенного лактонного цикла приводит к увеличению величины неэквивалентности $\Delta\delta_{AB}$ по сравнению с незамещенным фураноном. В молекулах тиоэфиров с арилсульфанильными заместителями величина $\Delta\delta_{AB}$ больше по сравнению с тиоэфирами, в молекулах которых атом серы связан с насыщенным атомом углерода. 4-Арилсульфонильные производные 5-этокси-2(5H)-фуранона характеризуются меньшей величиной $\Delta\delta_{AB}$, чем соответствующие тиоэфиры.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Латыпова Л.З., Ежова А.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Курбангалиева А.Р., Чмутова Г.А. Неэквивалентность химических сдвигов диастереотопных метиленовых протонов в ряду 5-этоксипроизводных 2(5H)-фуранона. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №9. С.137-148. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-137

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Латыпова Л.З., Ежова А.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Курбангалиева А.Р., Чмутова Г.А. Неэквивалентность химических сдвигов диастереотопных метиленовых протонов в ряду 5-этоксипроизводных 2(5H)-фуранона. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.18. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-137/ROI-jbc-RA/24-8-3-18

The output for citing the English online version of the article:

Lilia Z. Latypova, Anna S. Ezhova, Elena Sh. Saigitbatalova, Almira R. Kurbangalieva, Galina A. Chmutova. Chemical shift non-equivalence of the diastereotopic methylene protons in the series of 5-ethoxy derivatives of 2(5H)-furanone. *Butlerov Communications A*. 2024. Vol.8. No.3. Id.18. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-9-137/ROI-jbc-A/24-8-3-18