

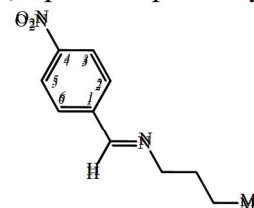
АНАЛИЗ ТОНКОГО СТРОЕНИЯ 4-НИТРОБЕНЗИЛИДЕН-*n*-БУТИЛАМИНА

Байчурин Р.И., Берестов И.В.

Российский государственный педагогический университет
им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург
e-mail: kohrgpu@yandex.ru

Азометины (основания Шиффа) являются легкодоступными веществами и удобными синтонами для получения различных классов органических соединений. Известно также, что многие из них проявляют антибактериальную, противогрибковую и противовирусную активность [1, 2].

В настоящей работе проведен анализ тонкого строения 4-нитробензилиден-*n*-бутиламина, который синтезирован по литературной методике [3] конденсацией 4-нитробензальдегида с *n*-бутиламином путем их кипячения в бензоле в колбе с насадкой Дина-Старка (выход 76%).



Исследование проводилось методом ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопии с применением двумерных (^1H - ^1H dqf-COSY, ^1H - ^{13}C HMQC, ^1H - ^{13}C HMBC, ^1H - ^1H NOESY) экспериментов.

Так, в спектре ЯМР ^1H (CDCl_3) протоны *para*-замещенного ароматического кольца проявляются в виде двух дублетов при 7.84 и 8.21 м.д. ($^3J_{\text{AB}} = 8.85$ Гц), азометиновый протон фиксируется в виде синглета при 8.30 м.д., фрагменту $\text{N-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ отвечают триплет при 3.63 м.д., квинтет при 1.67 м.д., секстет при 1.37 м.д. и триплет при 0.93 м.д., соответственно. Судя по спектру ^1H - ^1H dqf-COSY азометиновый протон имеет спин-спиновое взаимодействие с *ortho*-протоном при 8.21 м.д. и протоном метиленовой группы при 3.63 м.д. Ценную информацию о расположении заместителей относительно кратной $\text{C}=\text{N}$ связи дали результаты ^1H - ^1H NOESY эксперимента, в котором наблюдается кросс-пик, обусловленный ядерным эффектом Оверхаузера, между азометиновым протоном и протоном метиленовой группы при атоме азота (3.63 м.д.), что однозначно свидетельствует о *E*(*анти*)-конфигурации изучаемого азометина.

В спектре ЯМР $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ наблюдаются сигналы всех атомов углерода. Так, атомы углерода фрагмента $\text{N-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ проявляются при 61.69, 32.88, 20.56 и 14.00 м.д., соответственно; сигнал атома углерода при кратной $\text{C}=\text{N}$ связи является самым слабopольным и фиксируется при 158.08 м.д. Атомы углерода бензольного кольца регистрируются при 123.82 (C^2), 128.68 (C^3), 141.82 (C^1) и 148.99 м.д. (C^4).

Полученные в результате выполнения работы спектры являются наглядным примером, иллюстрирующим широкие возможности метода ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопии при анализе строения органических веществ, и могут быть рекомендованы для использования на занятиях со студентами при изучении курса «Физико-химические методы исследования».

Литература:

1. Qin W., Long S., Panunzio M., Biondi S. *Molecules*. 2013. Vol. 18. N. 10. P. 12264-12289.
2. da Silva C.M., da Silva D.L., Modolo L.V., Alves R.B., de Resende M.A., Martins C.V.B., de Fátima Â. J. *Adv. Res.* 2001. Vol. 2. N 1. P. 1-8.
3. Benhaoua H., Piet J.C., Danion-Bougot R.D., Toupet L., Carrie R. *Bull. Soc. Chim. Fr.* 1987. N 2. P. 325-338.