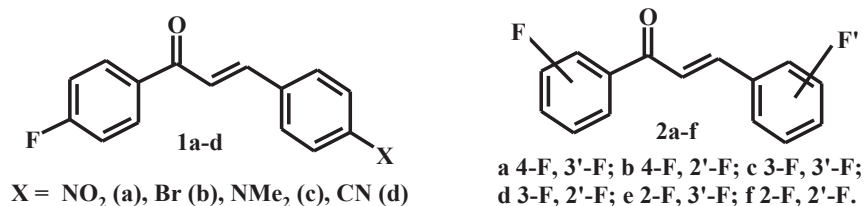


ОСОБЕННОСТИ ИК И ЯМР СПЕКТРОВ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ 1,3-ДИАРИЛПРОП-2-ЕН-1-ОНОВ

Замещенные 1,3-диарилпроп-2-ен-1-оны (халконы) находят широкое практическое применение [1, 2]. Для веществ данного ряда обнаружены различные виды биологической активности. Известны также технически значимые материалы на основе замещенных халконов [1, 2].

Фторсодержащие халконы известны достаточно давно. Интерес к веществам данной группы обусловлен наличием различных типов биологической активности [1, 2]. Так, для фторсодержащих халконов обнаружены противобактериальные свойства, антимикробактериальная активность, фунгицидная активность, цитотоксичность. Также среди веществ данной группы обнаружены ингибиторы ферментов.



Интерес к замещенным халконам обусловлен не только разнообразием типов биологической активности или возможностями их технического применения. Вещества данного ряда обладают существенным синтетическим потенциалом. В первую очередь этот потенциал связан с трансформацией еноновой 1,3-дифункциональной группы. На основе халконов могут быть получены соединения, содержащие различные типы пяти- и шестичленных гетероциклов [1, 2].

В рамках работ по синтезу и изучению свойств замещенных 2-изоксазолинов нашей исследовательской группой получен ряд фторсодержащих 1,3-диарилпроп-2-ен-1-онов **1a-d** и **2a-f**. Соединения **1a-d** относятся к ряду монофторсодержащих халконов, в которых атом фтора содержится только в 4 положении цикла А халконовой системы. В свою очередь еноны **2a-f** относятся к ряду дифторхалконов, в структуре которых содержится по одному атому фтора в циклах А и В халконовой системы.

Строение синтезированных соединений **1a-d** и **2a-f** подтверждено по данным ИК, ЯМР ¹H и ЯМР ¹³C спектров. ИК спектры кристаллических образцов в области 400–4000 см⁻¹ записаны в таблетках бромида калия на ИК-Фурье спектрометре Nexus. Для маслообразного

соединения **2f** ИК спектр зарегистрирован между пластинами бромида калия. Спектры ЯМР записаны на приборе BrukerAvance 500 (рабочая частота 500,13 МГц для ^1H и 125,75 МГц для ^{13}C) в растворах в дейтероацетоне.

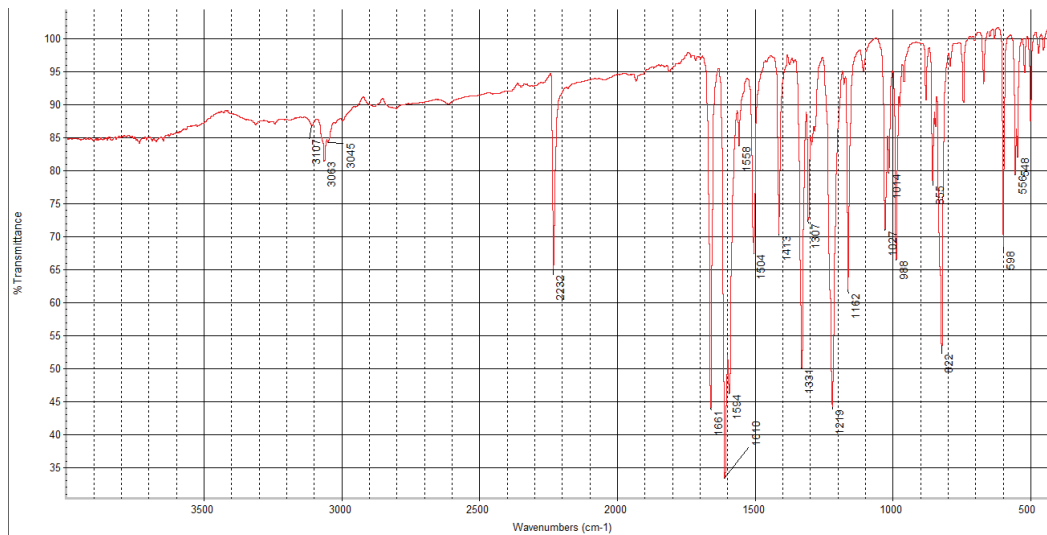


Рисунок 1

В связи с наличием достаточно большого числа спектральных данных для образцов 1,3-диарилпроп-2-ен-1-онов, содержащих атомы фтора в различных положениях, нами отмечен целый ряд особенностей в указанных типах спектров для синтезированных соединений.

Например, в ИК спектре халкона **1d** присутствуют полосы валентных колебаний связей C–H при 3107, 3063 и 3045 cm^{-1} . Также присутствуют полосы колебаний группы C=O при 1661 cm^{-1} . Колебаниям связей C=C халконовой группы и C=C ароматических колец соответствуют интенсивные полосы при 1610, 1594 и 1504 cm^{-1} . В ИК спектре соединения **1d** обращает на себя внимание полоса группы C≡N при 2232 cm^{-1} .

В ЯМР ^1H спектре соединения **1d** винильным протонам отвечают два дублета при δ 7,82 и 8,05 м.д. с константой спин-спинового взаимодействия J 16 Гц. Величина константы указывает на *транс*-конфигурацию заместителей возле двойной связи. Протонам ароматического цикла В соответствуют дублеты при δ 7,87 и 8,06 м.д. с характерной для 1,4-дизамещенного бензольного цикла константой спин-спинового взаимодействия J 8 Гц.

Протонам ароматического цикла А, содержащего атом фтора, соответствуют триплет при δ 7,34 (J 9 Гц) и дублет дублетов при δ 8,27 (J₁ 5,5 Гц, J₂ 9 Гц). Такая мультиплетность сигналов соответствует спин-спиновому взаимодействию указанных протонов друг с другом и атомом фтора.

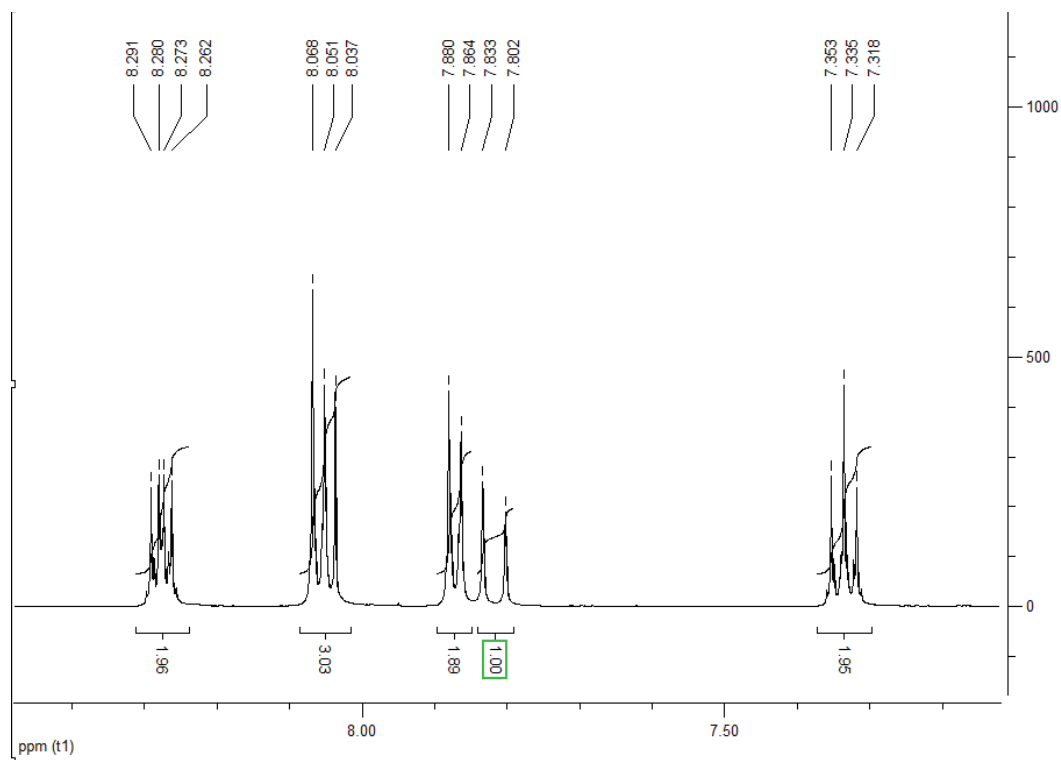


Рисунок 2

В свою очередь в ЯМР ^{13}C спектре халкона **1d** фиксируются сигналы всех атомов углерода этого вещества.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биооргхимия» (подпрограмма «Синтез и направленное модифицирование регуляторов биопроцессов» (Биорегуляторы), задание 2.1 (НИР 8).

ЛИТЕРАТУРА

1. Zhuang C., Zhang W., Sheng C., Zhang W., Xing C., Miao Z. Chalcone: A Privileged Structure in Medicinal Chemistry // *Chem. Rev.* – 2017. – Vol. 117, № 12. – P. 7762–7810.

2. Dan W., Dai J. Recent developments of chalcones as potential antibacterial agents in medicinal chemistry // *Eur. J. Med. Chem.* – 2020. – Vol. 187. – Article 111980. – 36 P.