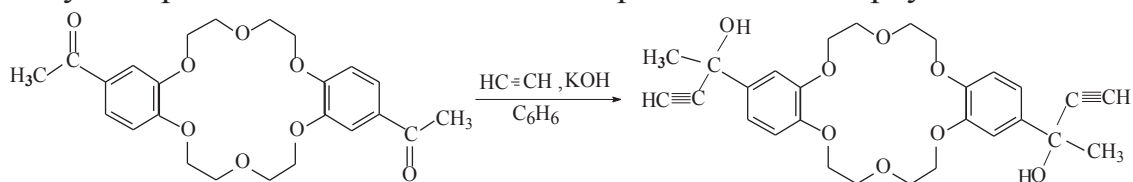


Козинкая Л.К., Мирхамитова Д.Х.  
(Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан)

## СРАВНЕНИЕ РАСЧЕТНЫХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ЯМР-СПЕКТРОВ 4',4''-ДИ-(1-МЕТИЛ-1-ГИДРОКСИЭТИНИЛ)-ДИБЕНЗО-18-КРАУН-6

Спектры больших молекул с небольшой разницей в положении или длиной заместителя часто имеют множество схожих сигналов. В вопросе идентификации структуры нового вещества или ряда новых соединений часто используют генерирование спектров в компьютерных программах, а также метод сравнения сгенерированных и экспериментальных спектров [1].

По методу Фаворского при взаимодействии 4',4''-диацетилдibenзо-18-краун-6 с ацетиленом в присутствии щелочи получен третичный ацетиленовый спирт дибензо-18-краун-6.



Для идентификации структуры 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтинил)-дibenзо-18-краун-6 использовано сравнение  $^1\text{H}$ - и  $^{13}\text{C}$ - ЯМР- спектров.

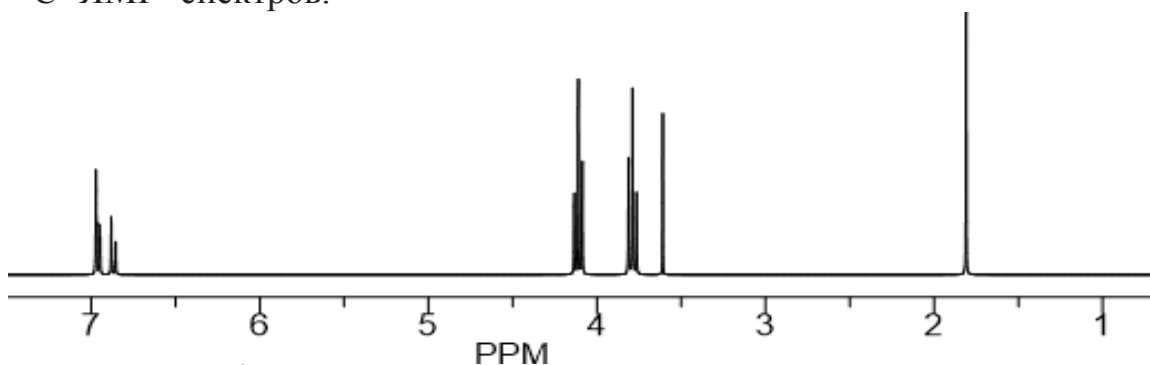


Рис.1 Расчет  $^1\text{H}$ -ЯМР-спектра 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтинил)-дibenзо-18-краун-6

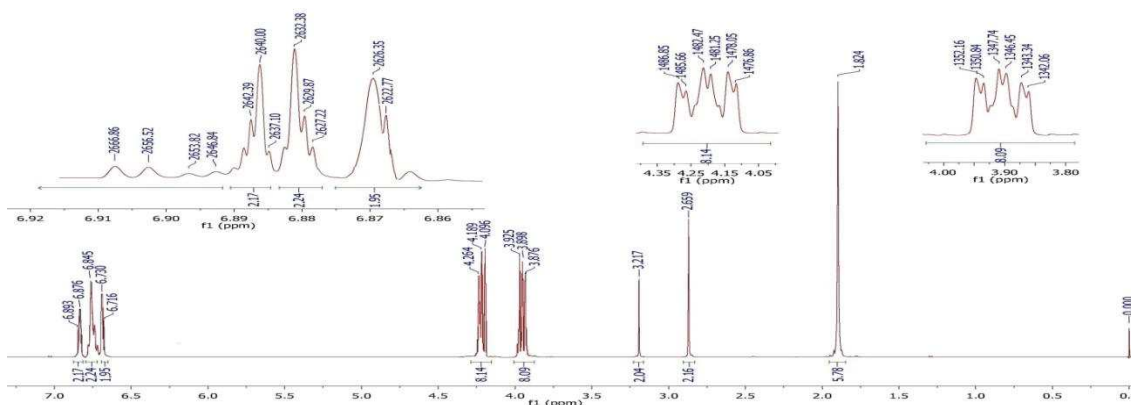


Рис.2  $^1\text{H}$ -ЯМР-спектр 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтил)-дibenзо-18-краун-6

Таблица 1 – Сравнение экспериментальных и расчетных данных  $^1\text{H}$ -ЯМР-спектров 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтил)-дibenзо-18-краун-6

	$\alpha\text{-CH}_3$	ОН	$\equiv\text{CH}$	$\beta\text{-O-CH}_2$ $\alpha\text{-O-CH}_2$	Ar-CH 6',6''	Ar-CH 3',3''	Ar-CH 5',5''
Эксперимент	1.82	2.65	3.21	3.87-3.92 4.09-4.26	6.71- 6.73	6.84	6.87- 6.89
Расчет	1.81	8.19	3.61	3.79, 4.11	6.87	6.97	6.96

Сигналы протонов гидроксильной группы под влиянием заместителя проявляются при 2.65 м.д., сигналы протонов бензольных колец смещены в сильную область, а макроциклического фрагмента ( $\text{O-CH}_2$ ) – в слабую область. Но в целом, расчетный и снятый ЯМР-спектры имеют идентичное построение. Можно сделать заключение о наличии всех функциональных групп и идентификации структуры.

Также для подтверждения предполагаемой структуры был получен и сгенерирован  $^{13}\text{C}$ -ЯМР-спектр 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтил)-дibenзо-18-краун-6

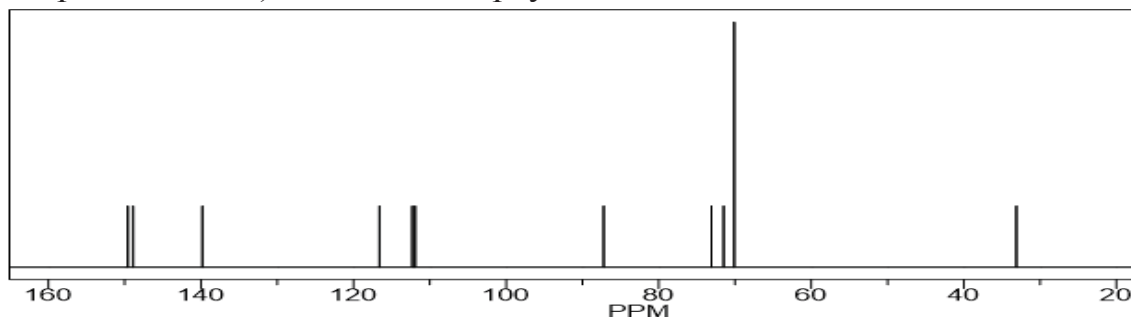


Рис.3 Расчет  $^{13}\text{C}$ -ЯМР-спектра 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтил)-дibenзо-18-краун-6

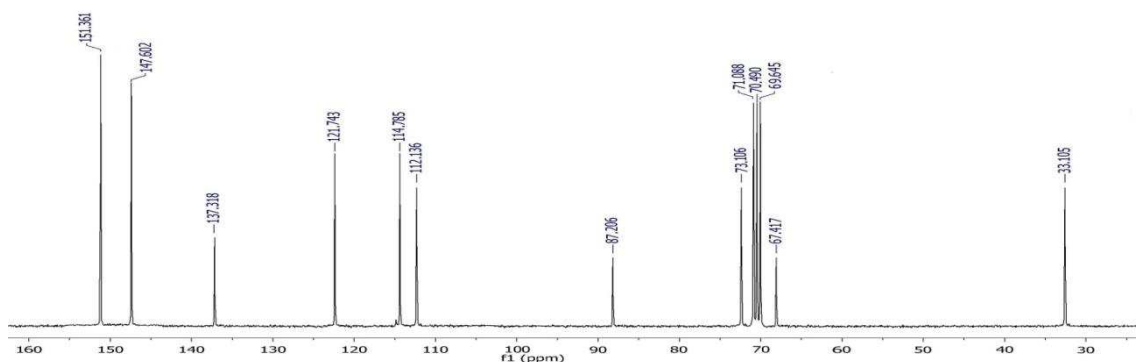


Рис.4  $^{13}\text{C}$ -ЯМР-спектр 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтинил)-дibenзо-18-краун-6

Таблица 2 – Сравнение экспериментальных и расчетных данных  $^{13}\text{C}$ -ЯМР-спектров 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтинил)-дibenзо-18-краун-6

	-CH <sub>3</sub>	$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}- \\   \end{array}$	$\begin{array}{c} \beta\text{-O-CH}_2 \\ \alpha\text{-O-CH}_2 \end{array}$	$\begin{array}{c} -\text{C}\equiv\text{C} \\ -\text{C}\equiv\text{C} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{Ar-} \\ \text{CH} \\ 3',3'' \\ 6',6'' \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{Ar-} \\ \text{CH} \\ 5',5'' \\ 4',4'' \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{Ar-CH} \\ 1',1'' \\ 2',2'' \end{array}$
Эксперимент	33.10	67.41	69.64 70.49- 71.08	73.10 87.20	112.13 114.78	121.74 137.31	147.60 - 151.36
Расчет	33.1	71.5	70.1	73.1 87.2	111.9 112.3	116.6 139.8	148.9 149.6

При анализе сгенерированного и полученного экспериментальным путем  $^{13}\text{C}$ -ЯМР-спектров 4',4''-ди-(1-метил-1-гидроксиэтинил)-дibenзо-18-краун-6 можно сделать вывод о совместимости расчета с экспериментальными данными.

Небольшие отклонения в сигналах протонов в  $^1\text{H}$ -ЯМР, а также четвертичных углеводородов и ароматического кольца  $^{13}\text{C}$ -ЯМР спектрах можно объяснить пространственным расположением молекулы, взаимодействием с растворителем или взаимным влиянием групп атомов.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Arkhipov V.P, Arkhipov R.V, Kuzina N.A. Study of the premicellar state in aqueous solutions of sodium dodecyl sulfate by nuclear magnetic resonance diffusion//Magnetic Resonance in Chemistry. – 2021. – 59, 11. P. 1126-1133.