

Andrii Pyrih

"Tautomeria protonowa i stereoizomeria pochodnych 1,3-tiazolidinonu"

STRESZCZENIE

W ramach pracy doktorskiej przeprowadzono syntezę oraz badania strukturalne i spektroskopowe serii nowych pochodnych C5-ylidenowych 4-fenyloamino-1,3-tiazol-2(5*H*)-onu o dużym znaczeniu farmakologicznym, zawierających podstawniki ylidenowe o odmiennych właściwościach elektronowych, to jest podstawnik dimetyloaminometylidenowy o właściwościach elektrono-donorowych i podstawnik metoksykarbonylo-metylidenowy o właściwościach elektrono-akceptorowych, a także pochodnych 5-dimetylo-aminometyliden-4-fenyloamino-1,3-tiazol-2-onu z pierścieniem fenylovym podstawionym grupami -OH, -OCH₃ względnie -CF₃. Osobną podgrupę pochodnych 5-ylideno-4-fenylo-amino-1,3-tiazol-2(5*H*)-onu stanowiły 5-ylideno-4-(*p*-R-fenylo)amino-1,3-tiazol-2(5*H*)-ony otrzymane na drodze syntezy, której celem było wprowadzenie do cząsteczek wraz z podstawnikiem ylidenowym innych heterocykli. Badania zostały podjęte głównie w celu lepszego zrozumienia wpływu zmian strukturalnych i elektronowych na zjawisko tautomerii protonowej oraz stereoizomerii pochodnych 5-ylideno-4-fenyloamino-1,3-tiazol-2(5*H*)-onu. Struktury analizowanych związków zostały określone za pomocą spektroskopii ¹H i ¹³C NMR i FT-IR oraz analizy rentgenograficznej. Przeprowadzono również obliczenia teoretyczne potwierdzające obserwacje eksperymentalne. Uzyskane wyniki badań odnoszących się do zjawiska tautomerii protonowej aminowo-iminowej w grupie pochodnych 5-ylideno-4-fenyloamino-1,3-tiazol-2(5*H*)-onu wyjawiały wyjątkowo dużą trwałość formy tautomerycznej aminowej oraz brak wpływu na zjawisko tautomerii protonowej aminowo-iminowej obecnych w pierścieniu fenylovym podstawników zarówno o charakterze elektrono-donorowym (-OH, -OCH₃), jak i o charakterze silnie elektrono-akceptorowym (CF₃). Wykazano pojawienie się znaczących efektów rezonansowych w obrębie grupy amidynowej i podstawnika ylidylnowego o charakterze elektrono-donorowym, wywierających wpływ na kształt i właściwości cząsteczek. Jednocześnie stwierdzono, że reszta fenyloaminowa ustawia się w cząsteczkach badanych związków synperiplanarnie zarówno w cieple stałym, jak i w roztworze (DMSO), zaś podstawnik ylidenowy przyjmuje konfigurację *Z*.