

## ОТ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ К ИЗОТОПНЫМ СДВИГАМ

(К 50-летию метода ЯМР)

За 50 лет метод ядерного магнитного резонанса прочно вошел в арсенал средств установления строения органических соединений. Сегодня уже немислима статья по синтезу новых органических соединений, строение которых не подтверждалось бы данными ЯМР. Более того, метод успешно используется для установления пространственной структуры синтезированных соединений, изучения таутомерного равновесия, электронных эффектов и влияния заместителей. Этому способствуют усовершенствование приборов ЯМР и разработка новых методик исследования.

Я хорошо помню свой первый спектр ПМР продуктов гидросилилирования 2-винилфурана, снятый в пятидесятых годах на приборе с рабочей частотой 19,7 МГц. Насколько прост и как малоинформативен! Через три года, работая уже при 60 МГц, мы не только определяли строение полученных изомеров, но и устанавливали акцепторный характер сильных, гермильных и станильных заместителей, связанных с фурановым кольцом. Менялась рабочая частота прибора — 90 МГц, затем 360 МГц, расширялся круг ядер. Еще через пять лет мы приступили к изучению внутримолекулярных эффектов в циклических кремнеорганических аминспиртах с привлечением ЯМР  $^{13}\text{C}$  и  $^{29}\text{Si}$ . Позднее разработка новых импульсных методик позволила определить константы спин-спинового взаимодействия кремний—азот в би- и трициклических соединениях с внутримолекулярной связью Si—N в спектрах ЯМР как  $^{15}\text{N}$ , так и  $^{29}\text{Si}$  при естественном содержании изотопов. Впервые были получены спектры ЯМР  $^{73}\text{Ge}$  несимметричных соединений и гетероциклических соединений шестикоординационного германия.

Разработка метода ЯМР  $^{29}\text{Si}$  ультравысокого разрешения (Э. Купче) позволила нам не только измерить дальние константы спин-спинового взаимодействия кремний—азот, но и получить изотопные сдвиги от всех изотопов всех элементов молекул хлорметилсилоксанов.

С введением новых методов исследования ЯМР соответственно менялся и характер статей в журнале «Химия гетероциклических соединений». Отмечая 50-летие метода ЯМР, мы решили посвятить специальный выпуск этого журнала изучению гетероциклических соединений методом ядерного магнитного резонанса. Многие коллеги в разных странах положительно отозвались на наше предложение. В результате мы составили номер журнала, в котором вслед за кратким историческим очерком Р. Фримена представлены обзоры и регулярные статьи по изучению методом ЯМР таутомерии мезоионных соединений и производных дигидропиридино[3,4-*b*]хиноксалинов, изомеризации спиро(1,3-оксазолидино-4,2'-[2Н]хроменов), конфигурации и конформации производных азиридина

и 1,3,2-диоксаборинов, хелатов гетарилформазапов и природных стероидов витанолидов, ориентации бензофурана в магнитном поле, а также по электронным эффектам заместителей в производных фурана, тиофена, индазола и индолизина. В представленных статьях описывается применение ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{29}\text{Si}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{77}\text{Se}$ ,  $^{113,111}\text{Cd}$ ,  $^{199}\text{Hg}$  с использованием методик COSY, HMBC, HMQC, HONANA, INEPT, INVGATE, INADEQVATE, NOE, а также лантаноидных сдвигающих реагентов.

Редакция журнала благодарит всех авторов, приславших статьи для этого юбилейного номера, и надеется, что его выпуск будет способствовать дальнейшему применению метода ЯМР для исследования гетероциклических соединений.

Главный редактор журнала



Э. Лукевиц