

# **<sup>15</sup>N-NMR PARAMÉTERFEJLESZTÉS TRICIKLÁNÓK ÉS SZÁRMAZÉKAIK SZERKEZET-MEGHATÁROZÁSÁHOZ**

## **DEVELOPMENT OF <sup>15</sup>N-NMR PARAMETERS FOR STRUCTURAL ELUCIDATION OF TRICYCLANES AND THEIR DERIVATIVES**

BARTA Roland Albert,<sup>1</sup> SCHAFF Gabriella,<sup>1</sup> RIMÓCZI Aliz,<sup>1</sup> KICSÁK Máté,<sup>1,2</sup> BEGE Miklós,<sup>2</sup> HERCZEG Mihály,<sup>2</sup> BORBÁS Anikó,<sup>2</sup> MÁNDI Attila,<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék, Debrecen

<sup>2</sup>Debreceni Egyetem, Gyógyszerészi Kémiai Tanszék, Debrecen

tel.: +3652512900/22470, fax: +3652512744, [orgchem@science.unideb.hu](mailto:orgchem@science.unideb.hu),

[vaszily.maria@pharm.unideb.hu](mailto:vaszily.maria@pharm.unideb.hu), <https://kemia.unideb.hu/>

### **ÖSSZEFOGLALÓ**

A triciklánóknak nevezett új típusú heterociklusos vegyületcsaládot a Debreceni Egyetem Gyógyszerészi Kémiai tanszékén állították elő, melyek szerkezet-meghatározásában tanszékünk is részt vett [*Org. Biomol. Chem.*, 16 (2017) 393-401]. A reakcióban három új kiralitáscentrum keletkezik a 2', 3' és 5' pozíciókban. A nyolc lehetséges diasztereomer megkülönböztetése komoly akadályba ütközött, melyet végül új típusú NMR mérésekkel, valamint <sup>13</sup>C és <sup>1</sup>H-NMR eltolódások számításával sikerült megoldani. Később triaza-triciklánók [*Org. Biomol. Chem.*, 21 (2023) 2213–2219], valamint triciklozidok előállítása is megtörtént, utóbbi esetben a B-vel jelölt bázis helyett Me-glikozid található a molekulákban. Jelentősen csökkent a reakció szelektivitása, ráadásul több esetben egynél több termék is keletkezett. A <sup>13</sup>C és <sup>1</sup>H-NMR eltolódás értékeket további <sup>15</sup>N-NMR mérésekkel és számításokkal szeretnénk kiegészíteni.

**Kulcsszavak:** Triciklánók, triciklozidok, triaza-triciklánók, <sup>15</sup>N-NMR, paraméterfejlesztés

### **ABSTRACT**

A new type of heterocyclic compound family called tricyclanes were synthesized at the Department of Pharmaceutical Chemistry of University of Debrecen, with our department also contributing to the structural determination [*Org. Biomol. Chem.*, 16 (2017) 393-401]. In the reaction, three new chirality centers are formed at the 2', 3', and 5' positions. Distinguishing the eight possible diastereomers posed a significant challenge, which was eventually resolved using new types of NMR measurements, as well as calculations of <sup>13</sup>C and <sup>1</sup>H-NMR shifts. Later, triaza-tricyclanes [*Org. Biomol. Chem.*, 21 (2023) 2213–2219] and tricycloglycosides were also synthesized, with the latter case featuring a Me-glycoside instead of the base labeled B in the molecules. The selectivity of the reaction significantly decreased, in several cases more than one product was formed. We aim to complement the <sup>13</sup>C and <sup>1</sup>H-NMR shift values with additional <sup>15</sup>N-NMR measurements and calculations.

**Keywords:** Tricyclanes, tricycloglycosides, triaza-tricyclanes, <sup>15</sup>N-NMR, parameter development