

## IDENTIFICATION OF NITROTRIAZONE BY NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$

Drumea Maria<sup>1</sup>, Macaev Fliur<sup>2</sup>, Valica Vladimir<sup>1</sup>

Scientific adviser: Valica Vladimir<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Pharmaceutical and Toxicological Chemistry, Nicolae Testemitanu University,

<sup>2</sup>Laboratory of Organic Synthesis, Institute of Chemistry MEC.

**Background.** Nuclear magnetic resonance (NMR) is a high-performance instrumental analytical method that allows elucidation and confirmation of the steric structure of organic compounds. NMR is based on measuring the absorption of electromagnetic radiation by the method:  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR. **Objective of the study.** Identification and confirmation of the steric structure of Nitrotriazone by the method of nuclear magnetic resonance with the  $^1\text{H}$  proton and  $^{13}\text{C}$  carbon technique. **Material and Methods.**  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR spectra were recorded for 2% d6-DMSO solutions using a „Bruker-Avance III” (400.13 and 100.61 MHz). The chemical changes  $\delta$  were expressed in ppm, referring to the center of the signal, using the solvent peaks as reference: d6-DMSO 2.50 ppm. **Results.** In the  $^1\text{H}$  NMR spectrum of Nitrotriazon the chemical shifts, have values in the range of 8.7-7.1 ppm. The signals at 8.72 and 8.27 ppm belong to the protons of the 1,2,4-triazole group. The bands at 8.13; 7.78; 7.71; 7.59 and 7.21 ppm are decomposed into peaks called doublets. The doublet at 8.13 and 7.21 ppm is attributed to four protons in the *p*-nitrophenyl substituent. Vinyl strips and aromatic ring are in the region of 7.82-7.59 ppm. In the  $^{13}\text{C}$  NMR spectrum, signals at 189.9 ppm belong to the C = O group; 153.2 and 146.7 ppm are attributed to the triazole ring. The peak at 148.7 ppm belongs to the carbon in the nitro group in the aromatic ring. **Conclusion.** The  $^1\text{H}$  proton and  $^{13}\text{C}$  carbon spectra of Nitrotriazone were investigated, highlighting absorption bands, which distinguish Nitrotriazone from other substances and allow their use to identify and confirm the steric structure.

**Keywords:** Nitrotriazone,  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR, DMSO (*Dimethylsulfoxide*).

## IDENTIFICAREA NITROTRIAZONEI PRIN REZONAȚA MAGNETICĂ NUCLEARĂ $^1\text{H}$ , $^{13}\text{C}$

Drumea Maria<sup>1</sup>, Macaev Fliur<sup>2</sup>, Valica Vladimir<sup>1</sup>

Conducător științific: Valica Vladimir<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Catedra de chimie farmaceutică și toxicologică, USMF „Nicolae Testemitanu”,

<sup>2</sup>Laboratorul Sinteză organică, Institutul de chimie MEC.

**Introducere.** Rezonanța magnetică nucleară (RMN) este o metodă analitică instrumentală de înaltă performanță ce permite elucidarea și confirmarea structurii sterice a compușilor organici. RMN se bazează pe măsurarea absorbției radiației electromagnetice prin metoda:  $^1\text{H}$  RMN și  $^{13}\text{C}$  RMN. **Scopul lucrării.** Identificarea și confirmarea structurii sterice a Nitrotriazonului prin metoda de Rezonanță magnetică nucleară cu tehnica  $^1\text{H}$  protonică și  $^{13}\text{C}$  carbonică. **Material și Metode.** Spectrele RMN  $^1\text{H}$  și  $^{13}\text{C}$  au fost înregistrate pentru soluții d6-DMSO 2% cu ajutorul unui „Bruker-Avance III” (400,13 și 100,61 MHz). Schimbările chimice  $\delta$  au fost exprimate în ppm, referindu-se la centrul semnalului, folosind vârfurile solventului ca referință: d6-DMSO 2,50 ppm. **Rezultate.** În spectru  $^1\text{H}$  RMN din Nitrotriazon deplasările chimice au valori în intervalul 8,7-7,1 ppm. Semnalele la 8,72 și 8,27 ppm aparțin protonilor din gruparea 1,2,4-triazolică. Benzile la 8,13; 7,78; 7,71; 7,59 și 7,21 ppm sunt descompuse în peak-uri numite dubleți. Dubletul la 8,13 și 7,21 ppm se atribuie la patru protoni din substituentul *p*-nitrofenil. Benzile pentru vinil și inel aromatic sunt în regiunea 7,82-7,59 ppm. În spectru  $^{13}\text{C}$  RMN, semnalele la 189,9 ppm aparțin grupării C=O; 153,2 și 146,7 ppm se atribuie inelului triazolic. Picul la 148,7 ppm aparține carbonului de la nitro grupa din inelul aromatic. **Concluzii.** A fost cercetat spectrul  $^1\text{H}$  protonic și  $^{13}\text{C}$  carbonic a Nitrotriazonului, evidențiind benzi de absorbție, care deosebesc Nitrotriazonul de alte substanțe și permit folosirea lor pentru identificarea și confirmarea structurii sterice.

**Cuvinte cheie:** Nitrotriazon, RMN $^1\text{H}$ , RMN $^{13}\text{C}$ , DMSO (*Dimethylsulfoxid*).

\* Study conducted with the support of the project 20.80009.8007.14 “Complex researches for the elaboration of new local anti-infectious pharmaceutical products for the optimization of pharmacotherapy of dental, oropharyngeal and auricular diseases”, within the State Program (2020-2023), project leader: Valica Vladimir, PhD, univ. prof., contracting authority: National Agency for Research and Development.

\* Studiu realizat cu suportul proiectului 20.80009.8007.14 „Cercetări complexe de elaborare a noilor produse farmaceutice antiinfecțioase autohtone pentru optimizarea farmacoterapiei afecțiunilor stomatologice, orofaringiene și auriculare”, din cadrul Programului de Stat (2020-2023), conducător de proiect: Valica Vladimir, dr. hab. șt. farm., prof. univ., autoritatea contractantă: Agenția Națională pentru Cercetare și Dezvoltare.