**Извод**

**Одређивање енолних облика асиметричних 1,3-дикарбонилних једињења:**

**2D HMBC NMR подаци и DFT прорачуни**

Meltem Tan\*, İshak Bildirici и Nurettin Mengeş

*Faculty of Pharmacy, Van Yüzüncü Yıl University, 65080, Van, Turkey*

*meltemtan@yyu.edu.tr*

*Извод:* У овом раду описана је синтеза серије асиметричних 1,3-дикарбонилних једињења, и испитивани су њихови енолни облици експерименталним методама и теоријским прорачунима. На основу 1H и 13C NMR спектара, утврђено је да се сва испитивана једињења налазе у једном енолном облику у CDCl3 раствору. Такође, на основу HMBC спектара и уочених корелација између одређених протонских у угљеникових језгара идентификовани су енолни облици. Израчунати су диедарски углови код асиметричних једињења која садрже ароматичне делове на обе стране, применом DFT методе, са циљем да се објасне фактори који одређују уочени енолни облик. Мали диедарски углови омогућавају дуже коњугације и настајање стабилнијег облика. Уочено је да се енолни облици формирају са мањим диедарским угловима, односно да је резонанциони фактор доминантан у формирању енолног облика. Осим тога, једињења која садрже арил- и алкил-групе доминантно формирају енолни облик усмерен према ароматичном прстену како би била образована дужа коњугација.