

2000

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ МОНО- И ДИБРОМАРИЛНИТРОЭТЕНОВ В РАСТВОРЕ

Ишмаева Э.А., Верещагина Я.А., Яркова Э.Г., Берестовицкая В.М.,
Фаттахова Г.Р., Макаренко С.В., Трухин Е.В., Павлова И.В.

Казанский государственный университет, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

РГПУ им. А.И.Герцена, г. Санкт-Петербург, ул. наб. р. Мойки, 48

КГТУ (технологический), г. Казань, ул. Карла Маркса, 68

Определены дипольные моменты (ДМ) 2-фенил-(I) и 2-(п-хлорфенил)-(II)-1,2-дибром-1-нитро-этенон в CCl_4 и C_6H_6 и проведен расчет теоретических ДМ для E- и Z-изомеров (I-II). Сопоставление экспериментальных и вычисленных ДМ дибромэтенон [I: 3.97 (C_6H_6), 3.77 (CCl_4); II: 2.47 (C_6H_6), 2.76 Д (CCl_4)] свидетельствует о существовании их в растворах в виде E-изомеров. Наличие некоторой $\Delta\mu$ (0.35-0.75Д) связано с электронными взаимодействиями в (I-II) с участием Ph, связи C=C и нитрогруппы.

Методами ПМР, ИК спектроскопии и ДМ изучено пространственное строение 2-циклогексиламино(III)- и 2-пиперидино(IV)-1-бром-1-нитро-2-фенилэтенон. Обе молекулы имеют E-конфигурацию (Ph и NO_2 расположены транс). Большие экспериментальные ДМ исследованных соединений (III) 7.04Д (C_6H_6), 7.70Д (диоксан), (IV) 6.60Д (C_6H_6), 7.09Д (диоксан), высокая экзальтация экспериментальных и вычисленных значений [для (III) $\mu_{выч}$ 4.51 Д (E-изомер), $\Delta\mu=2.5-3.2$ Д; для (IV) $\mu_{выч}$ 2.70 Д (E-изомер), $\Delta\mu=3.9-4.3$ Д] и данные ИК спектров свидетельствуют о высокой полярности этих молекул, связанной с определенным вкладом в их строение таутомерных биполярных форм. Отметим, что ИК спектры пиперидинового производного (IV) в твердой фазе и в растворе $CHCl_3$ и C_6H_6 идентичны, велик вклад формы с практически плоским расположением Ph, двойной связи и группы NO_2 , что способствует сопряжению между ними.

Группа авторов из КГУ благодарит за финансовую поддержку С.-Петербургский конкурсный центр (грант N 97-0-9.3-181) и программу по поддержке ведущих научных школ (грант N 00-15-97424).