

СТРОЕНИЕ 2-АРИЛ(ГЕТЕРИЛ)-1-АЦИЛ-1-НИТРОЭТЕНОВ

Бахарева С.В., Фельгендлер А.В., Процкий Д.А.,

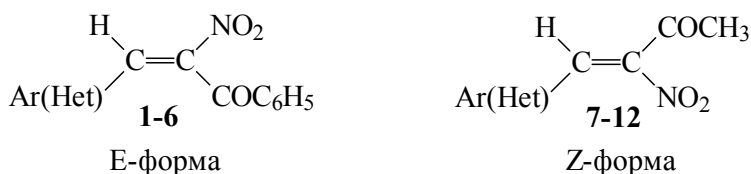
Абоскалова Н.И., Берестовицкая В.М.

Российский Государственный педагогический университет им. А.И.Герцена,
191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, д. 48, chemis@herzen.spb.ru

Геминальные ацилнитроэтенy, содержащие в молекулах при кратной связи одновременно нитро- и карбонильную функции, проявляют высокую реакционную способность по отношению к нуклеофильным реагентам; они являются перспективными синтонами для получения новых потенциально биологически активных веществ.

Нами предложен оригинальный препаративно удобный метод синтеза 1-ацил-1-нитроэтенoв прямым алкенилированием ацетил(бензоил)нитрометанoв ароматическими и гетероциклическими альдегидами в условиях кислотного катализа; их строение изучено спектральными методами с привлечением теоретических расчетов.

Квантово-химические расчеты (полуэмпирический метод на теоретическом уровне AM1 по программе Spartan 5.0), выполненные для *гем*-бензоилнитроэтенoв (**4,5**), показали, что эн-тальпии образования их E- и Z-конфигурационных форм довольно близки; это позволяет предполагать практически равновероятное существование в газовой фазе обоих геометрических изомеров. О высокой поляризации рассматриваемых систем (**4,5**) свидетельствуют высокие значения расчетных величин их дипольных моментов: например, для соединения (**4**) $\mu_{расч.}$ 6.59 Д (E-изомер), 6.16 Д (Z-изомер).



Ar (Het) = C₆H₅ (**1,7**), 4-(H₃C)₂N-C₆H₄ (**2,8**), 3-H₃CO-4-HO-C₆H₃ (**3,9**),
4-H₃CO-C₆H₄ (**4,10**), 2-фурил (**5,11**), 2-тиенил (**6,12**)

Комплексный анализ спектральных характеристик (методы ЯМР ¹H, УФ, ИК спектроскопии) 2-арил(гетерил)-1-ацил-1-нитроэтенoв (**1-12**) привел к заключению: *гем*-бензоилнитроэтенy (**1-6**) имеют E-конфигурацию, а *гем*-ацетилнитроэтенy (**7-12**) существуют преимущественно в Z-форме; гетерилнитроенкетонy (**5,6,11,12**) и арилнитроенкетонy, содержащие электронодонорные заместители в бензольном кольце (**2-4, 8-10**), являются высокополяризованными системами.