

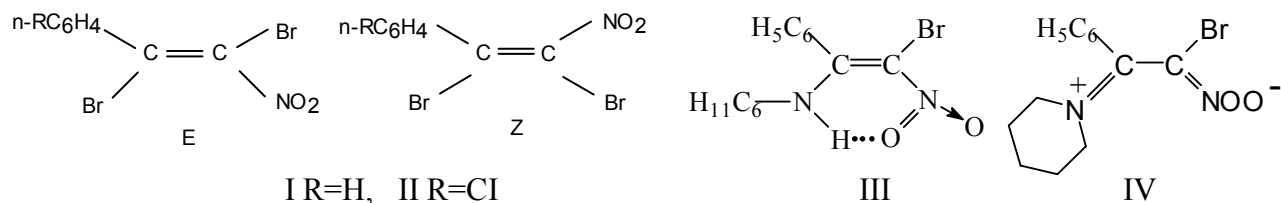
## КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ГАЛОГЕННИТРОЭТЕНОВ И ГАЛОГЕННИТРОЭТЕНФОСФОНАТОВ В РАСТВОРЕ

Верещагина Я.А., Фаттахова Г.Р., Ишмаева Э.А., Берестовицкая В.М., Дейко Л.И.,  
Беркова Г.А., Макаренко С.В., Трухин Е.В.

*Казанский государственный университет,  
420008, г. Казань, Кремлевская, 18. E-mail: Eleonora.Ishmaeva@ksu.ru  
Казанский государственный технологический университет,  
420015, г. Казань, Карла Маркса, 68*

Пространственное строение в растворах недавно описанных 1,2-дибром-1-нитростиролов и их полярность не изучены. ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ , ИК и УФ спектры использованы фактически для подтверждения состава соединений. Нами определены дипольные моменты (ДМ) 1,2-дибром-1-нитро-2-фенил-(I) и 1,2-дибром-1-нитро-2-(п-хлорфенил)(II)-этен в  $\text{CCl}_4$  и  $\text{C}_6\text{H}_6$  при  $25^\circ\text{C}$  и проведен расчет теоретических ДМ для E- и Z-изомеров этих соединений. Сопоставление экспериментальных и вычисленных ДМ свидетельствует о том, что соединения (I-II) существуют в растворах неполярных растворителей (точно так же, как и в твердом состоянии) в виде E-изомера. Наличие некоторой экзальтации ДМ ( $\Delta\mu$  0.35 - 0.75 Д), по-видимому, можно связать с наличием внутримолекулярных электронных взаимодействий в (I-II) с участием фенильного кольца, кратной связи и нитрогруппы, причем в соединении (II) это взаимодействие меньше.

Методами РСА, ИК спектроскопии и ДМ изучено строение 2-циклогексиламино(III)- и 2-пиперидино(IV)-1-бром-1-нитро-2-фенилэтен, обе молекулы имеют E-конфигурацию (Ph и  $\text{NO}_2$  - транс). Большие экспериментальные ДМ соединений (III) 7.04 Д ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ), 7.70 Д (диоксан), (IV) 6.60 Д ( $\text{C}_6\text{H}_6$ ), 7.09 Д (диоксан) и данные ИК спектров свидетельствуют о высокой полярности этих молекул, связанной с определенным вкладом в их строение биполярных форм.



Изучена тонкая структура галогеннитроэтенфосфонатов  $(\text{RO})_2\text{P}(\text{O})\text{CH}=\text{C}(\text{X})\text{NO}_2$  (X=H, Cl, Br), позволяющая прогнозировать их реакционную способность. Установлено, что эти соединения существуют в растворе в виде совокупности s-транс конформаций геометрического изомера, имеющего транс-ориентацию нитро- и фосфорильной групп.

Авторы благодарят программу по поддержке ведущих научных школ (грант N 00-15-97424) и программу "Университеты России - фундаментальные исследования" (грант N 015.05.01.17) за финансовую помощь.