

ПОЛЯРНОСТЬ И СТРОЕНИЕ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НИТРОАЛКЕНОВ

Фаттахова Г.Р.¹, Верещагина Я.А.^{1,2}, Макаренко С.В.³, Фельгендлер А.В.³,
Бахарева С.В.³, Трухин Е.В.³, Ишмаева Э.А.², Берестовицкая В.М.³

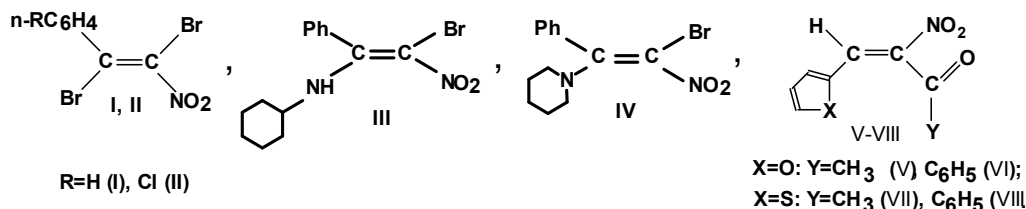
¹Казанский государственный технологич. университет, 420015, Казань, К.Маркса, 68

²Казанский государственный университет, 420008, Казань, Кремлевская, 18

³Российский государственный педагогич. университет, С.-Петербург, наб.Мойки, 48

E-mail: Eleonora.Ishmaeva@ksu.ru

До настоящего времени тонкие особенности строения полифункциональных нитроолефинов практически не были известны. Методами дипольных моментов (ДМ) и ИК спектров (в разных агрегатных состояниях) изучены полярность и осуществлен конформационный анализ полифункциональных нитроалкенов (I-VIII).



Определены ДМ соединений (I) и (II) в CCl₄ [3.77 (I), 2.76Д (II)] и C₆H₆ [3.97 (I), 2.47Д (II)] при 25⁰С и проведен расчет их теоретических ДМ для E- [3.22 (I), 2.42Д (II)] и Z-изомеров [2.20 (I), 2.07Д (II)]. Сопоставление экспериментальных и вычисленных ДМ свидетельствует о том, что соединения (I, II) существуют в растворах неполярных растворителей в виде E-изомера.

Изучено строение 2-циклогексиламино(III)-, 2-пиперидино(IV)-1-бром-1-нитро-2-фенилэтенон и 1-ацил-1-нитро-2-фурил(тиенил)этенон (V-VIII). Молекулы (III, IV) имеют E-конфигурацию (Ph и NO₂). Так, для (III) $\mu_{\text{эксп.}}$ 7.04 (в C₆H₆), 7.70 (в диоксане), $\mu_{\text{выч.}}$ 4.51Д (E-изомер); для (IV) $\mu_{\text{эксп.}}$ 6.60 (в C₆H₆), 7.09 (в диоксане), $\mu_{\text{выч.}}$ 2.70Д (E-изомер). Установлено, что гем-ацетилнитроэтенны [V $\mu_{\text{эксп.}}$ 5.02 (в C₆H₆), VII $\mu_{\text{эксп.}}$ 4.69Д (в C₆H₆)] имеют Z- (гетерил и группа NO₂), а гем-бензоилнитроэтенны [VI $\mu_{\text{эксп.}}$ 5.28 (в C₆H₆), VIII $\mu_{\text{эксп.}}$ 6.40 Д (в C₆H₆)] - E-конфигурацию. Анализ ДМ и ИК спектров позволил заключить, что в (V, VII) в растворах осуществляется конформационное равновесие s-цис- и s-транс-форм (связи C=C и C=O). В соединениях (VI, VIII) s-транс-форма является единственной (ананкомерное конформационное равновесие). Большие величины ДМ соединений (III-VIII) свидетельствуют о высокой полярности этих молекул, связанной со значительным вкладом в их строение биполярных форм.

Благодарим за помощь программу по поддержке ведущих научных школ (грант N 00-15-97424), НОЦ КГУ (молодежный грант BRHE REC 007) и программу УРФИ.