

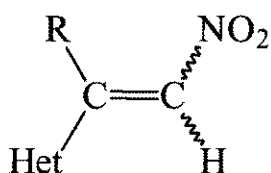
СТРОЕНИЕ 2-ГЕТЕРИЛ-1-НИТРОЭТЕНОВ – ПЕРСПЕКТИВНЫХ СИНТОНОВ ДЛЯ СИНТЕЗА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Э.А. Ишмаева¹, Я.А. Верещагина^{1,2}, И.А. Литвинов³, Г.Р. Фаттахова², Э.Г. Яркова¹,
А.Т. Губайдуллин³, В.М. Берестовицкая⁴, О.С. Васильева⁴, Е.С. Остроглядов⁴,
З.М. Саркисян⁴, С.М. Александрова⁴

¹Казанский государственный университет, ул. Кремлевская, 18; Казань, 420008;

²Казанский государственный технологический университет; ³Институт органической и физической химии КНЦ РАН; ⁴Российский государственный педагогический университет, Санкт-Петербург; Россия; Eleonora.Ishmaeva@ksu.ru

Гетерилнитроэтенy являются удобными исходными соединениями для синтеза биологически активных веществ. Методами дипольных моментов (ДМ), ИК спектроскопии и рентгеноструктурного анализа (РСА) изучено строение 2-гетерил-1-нитроэтенy (I-IV), а также первых представителей индолинитро-этенилфосфонатов (V-VII).



- I R = H, Het = пиридин-3-ил (3.75 D)
- II R = H, Het = индол-3-ил (6.52 D)
- III R = H, Het = 1,2-диметилиндол-3-ил (7.19 D; 7.58 D)
- IV R = H, Het = 1-метилбензимидазол-2-ил (5.36 D)
- V R = (ClCH₂CH₂O)₂P(O), Het = индол-3-ил (15.14 D)
- VI R = (ClCH₂CH₂O)₂P(O), Het = 1-метилиндол-3-ил (4.70 D)
- VII R = (ClCH₂CH₂O)₂P(O), Het = 1-этилиндол-3-ил (5.06 D)

Соединения (II, III) – это высокополяризованные системы с существенным вкладом биполярной структуры в основное состояние молекулы. Для вещества (II) (ИК спектр в твердой фазе) характерны слабые межмолекулярные водородные связи (МВС), однако в растворах бензола и дихлорметана такие взаимодействия отсутствуют. По данным РСА (IV), ИК спектров и ДМ (I-IV) [растворы в бензоле (I-III), диоксане (III, IV)] соединения (I-IV) существуют в виде E-изомеров с транс-расположением нитрогруппы и азотсодержащего гетероцикла. Соединения (V-VII) [ДМ определены в бензоле] имеют E-конфигурацию с s-цис-ориентацией углерод-углеродных кратных связей и групп P=O. Молекулы вещества (V) существуют в кристалле в виде энантиомерных пар, объединенных в бесконечные цепочки с МВС.

Авторы^{1,2,4} благодарят за финансовую помощь, программу УРФИ (грант N УР.05.01.016), программу по поддержке ведущих научных школ Российской Федерации и Министерство образования РФ (грант E02-5.0-102).