

СТРОЕНИЕ 2,3-ДИБРОМ-3-НИТРОАЛКЕНОВ

Верещагина Я.А.,¹ Чачков Д.В.,² Макаренко С.В.,³ Коваленко К.С.,³ Гилязутдинова Р.Р.,¹ Шаймарданова Р.Н.⁴

1 - Казанский государственный технологический университет, Казань, Россия

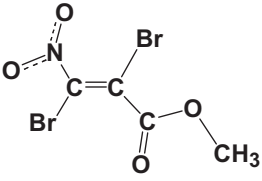
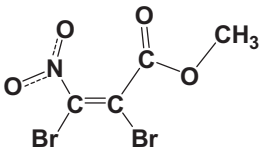
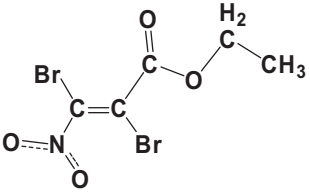
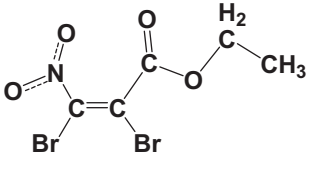
2 - Казанский филиал Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН, Казань, Россия

3 - Российский государственный педагогический университет им. А.И.Герцена, Санкт-Петербург, Россия

*4 - Казанский государственный университет, Казань, Россия
yavereshchagina@yahoo.com*

Сведения о дигалогеннитроалкенах в литературе немногочисленны, а для дибромнитроэтеннов – вообще единичны. В настоящей работе осуществлен экспериментальный и теоретический конформационный анализ алкил-2,3-дибром-3-нитроакрилатов методами дипольных моментов, ИК спектроскопии и квантовой химии [DFT B3LYP/6-31(d)]. В таблице представлены относительные энергии, вычисленные по векторно-аддитивной схеме, теоретические и экспериментальные (бензол, 25°C) дипольные моменты метил- и этил-2,3-дибром-3-нитроакрилатов (1, 2).

Таблица. Относительные энергии, вычисленные по векторно-аддитивной схеме, теоретические и экспериментальные дипольные моменты соединений 1 и 2

Изомеры	ΔE , кДж/моль	$\mu_{\text{выч}}$, Д	$\mu_{\text{теор}}$, Д	$\mu_{\text{эксп}}$, Д
1E 	15.78	3.02	4.16	3.47
1Z 	0.00	3.54	3.15	
2E 	15.58	3.03	4.44	4.00
2Z 	0.00	3.54	3.33	

Как видно из таблицы, имеется хорошее соответствие вычисленных и экспериментальных дипольных моментов для Z-изомеров соединений 1 и 2, именно они энергетически предпочтительны. Таким образом, в результате исследования строения новых представителей полифункциональных бромнитроалкенов – 2,3-дибром-3-нитроакрилатов; установлено, что в растворе они имеют нетривиальную Z-конфигурацию, ранее такое же строение для соединения (2) найдено методом РСА (Макаренко С.В., Коваленко К.С., Криволапов Д.Б., Литвинов И.А., Берестовицкая В.М. *Изв. АН. Сер. хим.*, 2009, № 10, С. 1977).