

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ СТРОЕНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ 1-ФУРИЛ-2-НИТРОЭТИЛЕНОВ

Я.А. Верещагина,¹ Д.В. Чачков,² А.З. Алимова,¹ Э.А. Ишмаева,¹ В.М. Берестовицкая³

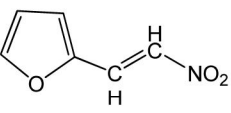
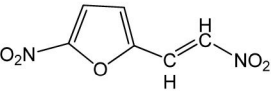
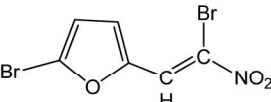
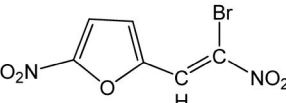
^{1/}Казанский федеральный университет, Химический институт им. А.М. Бутлерова

^{2/}Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН (Казанский филиал)

^{3/}Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

Сопряженные фурилнитроалкены хорошо известны как антимикробные вещества. Структура некоторых фурилнитроэтиленов изучена в ряде работ [1-3]. Мы определили полярность 1-фурил-2-нитроэтена **1**, 1-(5-нитрофурил-2)-2-нитроэтена **2**, 1-(5-бромфурил-2)-2-бром-2-нитроэтена **3** и 1-(5-нитрофурил-2)-2-бром-2-нитроэтена **4** в бензоле и диоксане (25 °С, второй метод Дебая). Строение соединений **1-4** изучено методами дипольных моментов и квантовой химии (расчеты DFT ВЗРW91/6-311++G(df,p)). Полученные результаты представлены в табл.

Таблица. Относительные энергии, теоретические дипольные моменты изомеров и экспериментальные дипольные моменты соединений 1-4

Соединение	Изомер	ΔE , ккал/моль	$\mu_{\text{теор}}$, Д	$\mu_{\text{эксп}}$, Д
 1	<i>Z-s-транс</i>	32.40	5.65	5.07 (бензол) 5.10 (диоксан)
	<i>E-s-транс</i>	0.00	6.74	
	<i>Z-s-цис</i>	15.83	5.21	
	<i>E-s-цис</i>	6.31	6.62	
 2	<i>Z-s-транс</i>	14.80	1.05	4.51 (бензол) 4.57 (диоксан)
	<i>E-s-транс</i>	0.00	5.09	
	<i>Z-s-цис</i>	33.31	8.04	
	<i>E-s-цис</i>	6.65	4.52	
 3	<i>Z-s-транс</i>	0.00	5.67	5.14 (бензол) 4.33 (диоксан)
	<i>E-s-транс</i>	13.41	4.32	
	<i>Z-s-цис</i>	27.88	5.03	
	<i>E-s-цис</i>	3.19	5.90	
 4	<i>Z-s-транс</i>	0.00	4.50	4.93 (бензол) 4.18 (диоксан)
	<i>E-s-транс</i>	14.12	0.96	
	<i>Z-s-цис</i>	2.41	4.27	
	<i>E-s-цис</i>	25.50	7.55	

По данным квантово-химических расчетов молекулы фурилнитроалкенов **1** и **2** являются *E-s-транс*-изомерами, фурилнитроалкенов **3** и **4** – *Z-s-транс*-изомерами, в которых фурильный гетероцикл и нитрогруппа расположены *транс* по отношению к кратной связи С=C. Молекулы предпочтительных изомеров соединений **1-4** (рисунок) имеют плоское строение, в них реализуется неклассический водородный контакт. Теоретические результаты согласуются с экспериментальными данными.

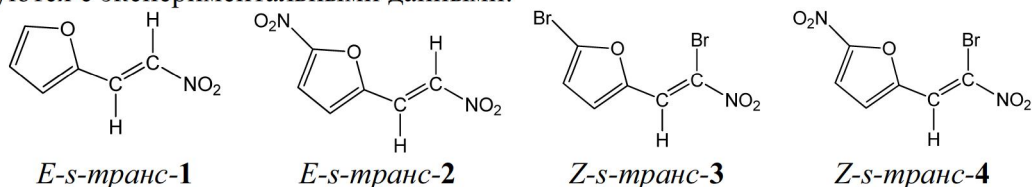


Рис. Предпочтительные изомеры соединений 1-4.

1. Грунтфест М.Г., Колодяжный Ю.В., Потемкин Г.Ф., Назарова З.Н., Осипов О.А. Дипольные моменты и реакционная способность ряда фурилнитроолефинов // ЖОрХ. 1971. 7. 5. 1057-1061.
2. Грунтфест М.Г., Потемкин Г.Ф., Колодяжный Ю.В., Зверев В.В., Назарова З.Н., Осипов О.А. Физико-химические свойства и реакционная способность фурилнитроолефинов // ЖОрХ. 1972. 8. 2. 404-411.
3. Estrada E., Gomez M., Castanedo N., Perez C. Theoretical and experimental study on the structure of 1-(5-X-fur-2-yl)-2-nitro-2-Y-ethylenes // J.Mol.Str. (Theochem). 1999. 468. 193-200.