

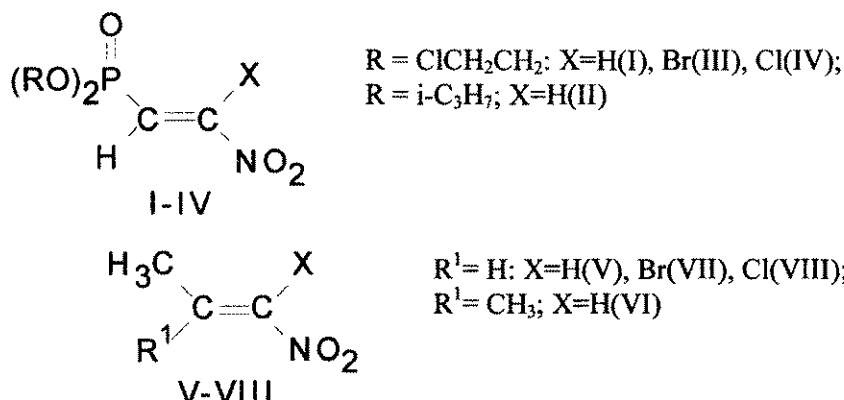
ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ ГАЛОГЕННИТРОЭТЕНФОСФОНАТОВ

Ж.Р.Гуляева, Г.А.Беркова, Э.А.Ишмаева, И.И.Пацановский,
Л.И.Дейко, В.М.Берестовицкая

Российский государственный педагогический университет им.А.И.Герцена, г.С.-Петербург;
Казанский государственный университет, г.Казань

Галогеннитроэтенфосфонаты можно рассматривать как перспективные синтоны для получения различных классов фосфорилированных органических веществ (I, II).

Методами ЯМР (^1H , ^{31}P), УФ, ИК спектроскопии и методом дипольных моментов комплексно впервые исследовано пространственное строение нитроэтенфосфонатов (I-IV) в сравнении с модельными нитро- и галоген-нитроэтенами (V-VIII).



На основании анализа литературных и собственных данных в качестве удобного теста для определения конфигурационной принадлежности галоген-нитроэтенфосфонатов была использована величина химсдвига олефинового протона, испытывающего сильное *цис*-влияние нитрогруппы – различие численных значений (δ , м.д.) этого параметра при *цис*- и *транс*-ориентации нитрогруппы достигает 1 м.д.

Установлено, что нитро- и галогеннитроэтенфосфонаты (I-IV) существуют в растворе в виде равновесия изомерных форм с *транс*-расположением нитро- и фосфорильной групп.

В конформационных переходах, обусловленных внутренним вращением вокруг связей $\text{P}-\text{C}_{\text{sp}^2}$ и $\text{C}_{\text{sp}^3}-\text{C}_{\text{sp}^3}$, преобладают формы с *гош*-ориентацией связей $\text{C}-\text{Cl}$ и $\text{C}-\text{O}$.

1. Perekalin V.V., Lipina E.S., Berestovitskaya V.M., Efremov D.A. Nitroalkenes. Conjugated Nitro Compounds. N.Y.: John Wiley and Sons. 1994. P.169-182.

2. Berestovitskaya V.M., Deiko L.I., Botata J.E., Perekalin V.V. // Phosphorus, Sulfur and Silicon. 1996. V.111. №1-4. P.754/122.