

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНФИГУРАЦИИ МОЛЕКУЛЫ ЦИАНБЕНЗАЛЬДЕГИДА
МЕТОДОМ КВАНТОВОХИМИЧЕСКОГО РАСЧЕТА ДИПОЛЬНОГО МО-
МЕНТА

Куренкова Е.В., Шульжик В.И.

Научный руководитель - асс. В.Н. Мещерякова

В данной работе мы воспользовались полуэмпирическим методом, основанным на предположении отсутствия взаимодействия между σ и π -электронами. Его называют комбинированным или методом расчёта в σ - π приближении [1]. Согласно этому приближению

$$\vec{M}_z = M_\sigma + M_\pi \quad (1)$$

где M_σ и M_π , σ и π - составляющие полного дипольного момента молекулы M_z , рассчитанные по формуле:

$$\vec{M} = -4,8 \sum_j Q_j \vec{r}_j$$

Здесь: Q_j - эффективный заряд на атоме j , \vec{r}_j - радиус-вектор этого атома. Комбинированный метод применялся в ряде работ, например [2-3]. Q_σ рассчитывались по методу Дель Ре, а Q_π - по методу Хюккеля на ЭВМ "Минск-32" и "Наир-К". Расчет дипольных моментов σ - цис- и π - транс-форм молекулы цианбензальдегида был произведен нами на ЭВМ "Проминь".

Среди объектов для расчета дипольных моментов нитрилы обычно встречаются реже других соединений. Мы рассчитывали поэтому дипольные моменты орто-, пара-, мета- σ - транс и π - цис-изомеров цианбензальдегида для решения вопроса о конфигурации.

Применение метода дипольных моментов к решению структурных проблем органической химии позволяет установить геометрическую конфигурацию σ - цис-транс-изомеров.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Микин В.И., Осипов О.А., Мданов Ю.А. "Дипольные моменты в органической химии" Л., "Химия", 1968.
2. Mehlhorn J, Mauee R, Z. Chem, 8, 9, 321, 1968.
3. Гранжан В.А., Свенко Л.М. К. "структурная химия", т.13, 1972.