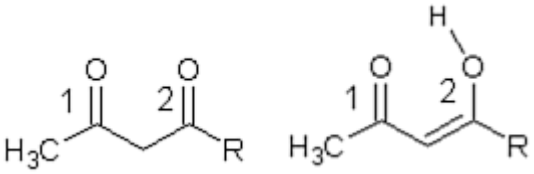
РАСЧЕТЫ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ КАРБОНИЛЬНЫХ ГРУП β-ДИКЕТОНОВ И ИХ ГАЛОГЕНЗАМЕЩЕННЫХ

Ю. В. Иванов, А. А. Костенко

Дальневосточный государственный технический рыбохозяйственный университет (ДВГТРУ)

Полуэмпирическим квантовохимическим методом PM3 и неэмпиричским методом HF в базисе STO 3-21G и STO 6-31G** исследованы колебательные спектры кетонных и енольных форм β-дикетонов и их производных с целью выявления основных характеристических колебаний и их зависимости от особенностей электронного строения молекул.



R = Me, i-Pr, t-Bu, CH_2Cl, CH_2F, CHF_2, CF_3

Согласно расчетам, в ацетилацетоне колебания карбонильных групп происходят синхронно, и с наибольшей интенсивностью в ИК-спектре проявляются симметричные и антисимметричные колебания. В случае замещения, синхронность колебаний нарушается, а разветвленный углеводородный радикал за счет электронодонорного эффекта увеличивая порядок карбонильной связи уменьшает волновое число. текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов текст тезисов.

Частоты колебаний карбонильной группы кетонных форм ($см^{-1}$).

Связь	Me	*i*-Pr	*t*-Bu	$-CH_2Cl$	$-CH_2F$	$-CHF_2$	$-CF_3$
1	1972 (ass)	1230	1211	1974 (ass)	1214 (sym)	1976 (ass)	1982
2	1981 (sym)	1140	920	1974 (ass)	843 (ass)	1998 (sym)	2002

Для енольных форм гомологов ацетилацетона с увеличением электронодонорной способности радикала частота колебаний $\nu_{(C=O)}$ практически не изменяется, тогда как $\nu_{(C–O)}$ понижается. Для галогензамещенных с увеличением электроотрицательности радикала частота колебаний $\nu_{(C=O)}$ возрастает, и одновременно уменьшается частота колебаний $\nu_{(C–O)}$.