



(H)	
Li ³ ЛИТИЙ	Be ⁴ БЕРИЛЛИЙ
Na ¹¹ НАТРИЙ	Mg ¹² МАГНИЙ
K ¹⁹ КАЛИЙ	Ca ²⁰ КАЛЬЦИЙ
²⁹ Cu МЕДЬ	³⁰ Zn ЦИНК
Rb ³⁷ РУБИДИЙ	Sr ³⁸ СТРОНЦИЙ
⁴⁷ Ag СЕРЕБРО	⁴⁸ Cd КАДМИЙ
Cs ⁵⁵ ЦЕЗИЙ	Ba ⁵⁶ БАРИЙ
⁷⁹ Au ЗОЛОТО	⁸⁰ Hg РТУТЬ
Fr ⁸⁷ ФРАНЦИЙ	Ra ⁸⁸ РАДИЙ

ТОМ 54

ВЫП. 4

ISSN 0579-2991

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

СЕРИЯ

ХИМИЯ И ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ

Иваново 2011

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ
ИЗДАНИЕ ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

**ХИМИЯ
И
ХИМИЧЕСКАЯ
ТЕХНОЛОГИЯ**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
Основан в январе 1958 года. Выходит 12 раз в год.

**Том 54
Вып. 4**

Иваново 2011

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор О.И. Койфман (*д.х.н., профессор, член-корр. РАН*)

Зам. гл. редактора В.Н. Пророков (*к.х.н.*)

Зам. гл. редактора В.В. Рыбкин (*д.х.н., профессор*)

Зам. гл. редактора А.П. Самарский (*к.х.н.*)

Зав. редакцией А.С. Манукян (*к.т.н.*)

В.К. Абросимов (*д.х.н., проф.*), М.И. Базанов (*д.х.н., проф.*), Б.Д. Березин (*д.х.н., проф.*),
В.Н. Блиничев (*д.т.н., проф.*), С.П. Бобков (*д.т.н., проф.*), В.А. Бурмистров (*д.х.н., проф.*),
Г.В. Гиричев (*д.х.н., проф.*), О.А. Голубчиков (*д.х.н., проф.*), М.В. Ключев (*д.х.н., проф.*),
А.М. Колкер (*д.х.н., проф.*), А.Н. Лабукин (*д.т.н., проф.*), Т.Н. Ломова (*д.х.н., проф.*),
Л.Н. Мизеровский (*д.х.н., проф.*), В.Е. Мизонов (*д.т.н., проф.*), В.И. Светцов (*д.х.н., проф.*),
Ф.Ю. Телегин (*д.х.н., проф.*), М.В. Улитин (*д.х.н., проф.*), В.А. Шарнин (*д.х.н., проф.*)

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

проф. Дудырев А.С. (г. Санкт-Петербург)

проф. Дьяконов С.Г. (г. Казань)

акад. РАН Егоров М.П. (г. Москва)

акад. РАН Еременко И.Л. (г. Москва)

проф. Захаров А.Г. (г. Иваново)

член-корр. РАН Новаков И.А. (г. Волгоград)

акад. РАН Новоторцев В.М. (г. Москва)

член-корр. РАН Овчаренко В.И. (г. Новосибирск)

акад. РАН Саркисов П.Д. (г. Москва)

акад. РАН Синяшин О.Г. (г. Казань)

проф. Тимофеев В.С. (г. Москва)

акад. РААСН Федосов С.В. (г. Иваново)

Издание Ивановского государственного химико-технологического университета, 2011

Адрес редакции: 153000, г. Иваново, пр. Фридриха Энгельса, 7, тел. 8(4932)32-73-07, E-mail: ivkkt@isuct.ru,
<http://CTJ.isuct.ru>

Редактор: Н.Ю. Спиридонова
Технический редактор: М.В. Тимачкова
Англ. перевод: В.В. Рыбкин
Компьютерная верстка: А.С. Манукян

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору за соблюдением законодательства
в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-24169 от 20 апреля 2006 г.

Журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук»

Журнал издается при содействии Академии инженерных наук им. А.М. Прохорова

Подписано в печать 29.03.2011. Формат бумаги 60x84 ¹/₈.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 12,6. Усл. кр.-отт. 18,34. Учетно-изд. л. 15,12. Тираж 450 экз. Заказ 265.

Отпечатано с диапозитивов в ОАО «Ивановская областная типография». 153008, г. Иваново, ул. Типографская, 6.

Подписка: ОАО Агентство «РОСПЕЧАТЬ» (подписной индекс 70381),
ООО «Научная электронная библиотека» (www.e-library.ru).

©Изв. вузов. Химия и химическая технология, 2011

УДК 547: 544.42/.43

А.Д. Котов, Е.В. Снежкова, Д.А. Базлов

СИНТЕЗ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2,3-БИС(2-ЦИАНОФЕНИЛ)-2,3-ДИФЕНИЛСУКЦИНАМИДА

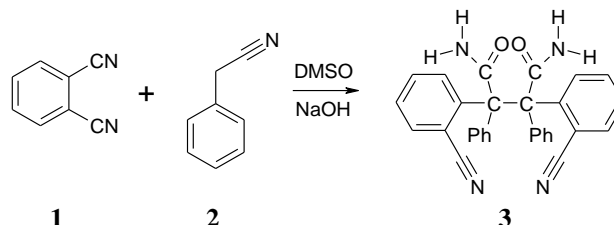
(Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова)
e-mail: bazlov@uniyar.ac.ru

Взаимодействием фталонитрила с фенилацетонитрилом в системе NaOH/ДМСО синтезирован 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамид. С использованием квантово-химического моделирования (полуэмпирический метод PM3) изучена его пространственная структура и выявлен ряд стабильных конформаций.

Ключевые слова: квантово-химическое моделирование, нуклеофильное ароматическое замещение, 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамид

Широкое применение ароматических нитрилов в качестве полупродуктов и мономеров для полимерных, люминесцирующих, фотопроводящих, нелинейно-оптических материалов, химических реактивов, исходных соединений для органических красителей, гетероциклических соединений обуславливает необходимость поиска методов их получения и функционализации, изучения строения и свойств синтезированных соединений [1-5].

Взаимодействием фталонитрила **1** с фенилацетонитрилом **2** в системе ДМСО/NaOH был синтезирован 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамид **3**:



Синтезированное вещество представляет собой продукт реакций нуклеофильного замещения цианогруппы и димеризации. Его строение установлено с помощью комплекса физико-химических методов анализа (табл. 1).

Таблица 1

Характеристики 2,3-бис(2-цианофенил)-2,3-дифенилсукцинамида **3**
Table 1. Characteristics of 2,3-bis(2-cyanophenyl)-2,3-diphenylsuccinamid **3**

Элементный анализ		Спектр ЯМР ^{13}C , δ , м.д.	Спектр ЯМР ^1H (ДМСО- d_6), δ , м.д.	ИК спектр, ν , cm^{-1}	Масс- спектр, m/z (I, %)
Найдено, %	Вычислено, %				
C 76.36	C 76.58	50.09 (C^2, C^3)	8.45 м (2H, H^3),	2202	246
H 4.84	H 4.71	121.36 (CN),	8.17 м (4H, $\text{H}^4 + \text{H}^5$),	(CN),	(100),
N 12.23	N 11.91	170.03 (CO),	7.63 т (4H, $\text{H}^3 + \text{H}^5$),	3350	219
		122,20-140,56 (Ar)	7.44 дд (4H, $\text{H}^2 + \text{H}^6$),	(NH),	(41),
			7.31 дд (2H, H^4), 8.00 м (2H, H^6),	1620	190
			8.59 шс (4H, NH_2)	(CO)	(15),
					122
					(24),
					91 (39)

Идентификация исследуемого соединения затруднена тем, что оно не обладает четкой температурой плавления (разлагается около 200°C), полоса поглощения CN-группы в ИК спектре

сильно смещена (2202 cm^{-1}) из-за образования внутримолекулярных водородных связей между атомами азота цианогруппы и атомами водорода амидной группы, в масс-спектре отсутствует пик