

УДК 547.222 : 541.6

КОЛЬЦЕГРАННЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ВИЗУАЛИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ ХЛОРУГЛЕРОДОВ. 2. ГЕКСАХЛОРЕТАН, ТЕТРАХЛОРЕТИЛЕН И ДИХЛОРАЦЕТИЛЕН

¹ М.С.Салахов, ¹ Б.Г.Багманов, ¹ О.Т.Гречкина, ² Н.А.Кадырова

¹Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана

²Бакинский Государственный Университет

Рассматриваются кольцевые модели молекул гексахлорэтана, тетрахлорэтилена и дихлорацетилен с учетом конформационных особенностей молекул.

В последнее время делаются попытки при помощи кольцевой модели к построению атома наглядно реализовать различные виды пространственного строения молекул с применением математического метода [1-2].

Такой подход к визуализации трехмерных структур гибкими кольцевыми моделями создает реальное представление о невидимых природных объектах и формирует динамическое пространственное мышление наблюдателя [3,4].

Продолжая наши публикации по визуализации хлоруглеродных молекул кольцевыми моделями [5], в данной работе рассматриваются стереохимические особенности хлоруглеродов $C_2 : C_2Cl_6$, C_2Cl_4 и C_2Cl_2 с использованием изготовленных нами гибких кольцевых моделей.

Ранее мы показали, что высота барьера внутреннего вращения вокруг С-С связи молекулы гексахлорэтана [6] примерно в пять раз больше, чем для молекулы этана (17.3 ккал/моль против 3 ккал/моль), в силу чего длина С-Cl связи (0.176 нм) и С-С связи (0.156 нм) неодинаковы и поэтому молекула $CCl_3 - CCl_3$ не имеет правильную тетраэдрическую форму, как это наблюдается для CH_3-CH_3 со значением тетраэдрического угла – $109^{\circ}28'$, и значение угла Cl-C-Cl приобретает несколько большее значение чем $109^{\circ}28'$ [7]. При этом валентный угол Cl-C-Cl из-за отталкивания электронных облаков атомов хлора должен быть меньше в заслоненной конформации (рис1.1), чем в скошенной (рис1.2).

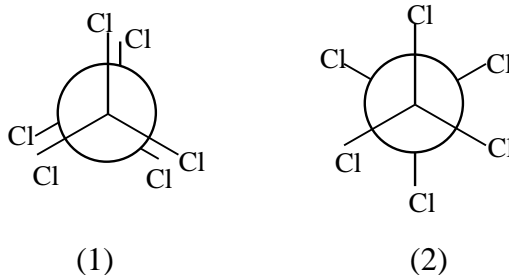


Рис.1. Ньюменовская геометрическая форма молекулы гексахлорэтана в заслоненной (1) и гош-конформациях (2)

Следовательно, при построении кольцевой модели эту молекулу следует визуализировать в ее единственной, наиболее устойчивой гош-конформации (барьер вращения 46-59

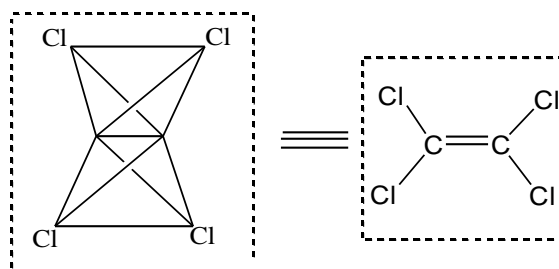
кДж/моль [8]) вследствие заторможенности вращения вокруг С-С связи, обеспечивающей систему, при которой деформация электронных колец атомов хлора снижена до минимума (рис.2).



Рис.2. Кольцевая модель молекулы гексахлорэтана в гош-конформации

Подобные деформации наибольшие в случае отсутствия вращения вокруг двойных связей, находящихся в состоянии sp^2 гибридности между углеродными атомами. Так, в молекуле тетрахлор-

этилена, благодаря sp^2 -связанности углеродных атомов, деформации практически сильно ограничены и поэтому молекула должна иметь плоскую форму.



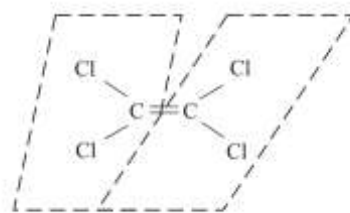
В молекуле этилена из-за меньшего значения вандер-ваальсовых радиусов водородов ($1,2 \text{ \AA}$) молекула находится в строго плоской форме со значением углов вокруг углеродных атомов равных 120° , что также получает свое наглядное отражение в визуализации кольцевых моделей этого соединения. В случае же рассмотрения кольцевых моделей молекулы тетрахлорэтилена (рис.3) приходится учитывать большой объем и сильное электроотталкивающее действие хлорных атомов, находящихся как у одного, так и у соседних углеродных атомов между собой через пространство. Вследствие этого двойная связь у тетрахлорэтилена проявляет инертность к реакциям присоединения и угол Cl-C-Cl приобретает несколько большее значение, чем 120° , как это строго соблюдается для угла H-C-H в этилене.



Рис.3. Кольцевая модель молекулы тетрахлорэтилена

Допускается [9,10], что плоскости Cl-C-Cl в тетрахлорэтилене, благодаря наличию 1,2-дихлорных пространственных

препятствий, несколько скошены, что следует учитывать при визуализации этой молекулы кольцевыми моделями.



Рассматривая визуализацию кольце-гранной модели молекулы дихлорацети-лена (рис.4), можно заметить, что и молекула ацетилена, и молекула дихлор-

ацетилена имеют сходные линейные конфигурации с той лишь разницей, что у дихлорацетилена связи $C\equiv C$ и $C-Cl$ несколько удлинены.

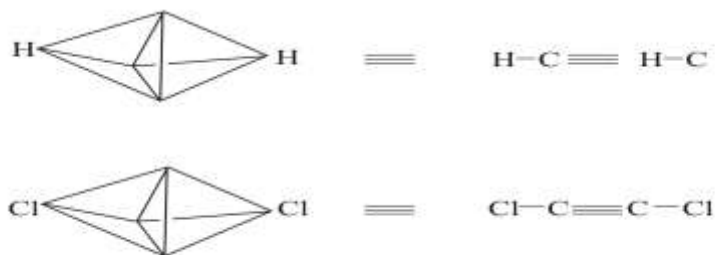


Рис.4. Кольцевая модель молекулы дихлорацетилена

В предыдущей работе [5] мы описали методику визуализации кольцевой модели для молекулы CCl_4 с учетом длин связей $C-Cl$, равных 0.176 нм и большего объема атомов хлора, характеризующегося расположением 17 электронов по орбиталим $1s^2, 2s^2 2p^6, 3s^2 3p^5$. Была рекомендована сборка кольцевых моделей молекул хлоруглеродов из гибких полимерных трубочек со следующими параметрами: для углерода $R_{ион} = 0.63 \text{ \AA}$, с

длиной трубочек 115 мм и диаметром 1мм, окрашенных в черный цвет путем обмотки изоляционной лентой; для хлора $R_{ион} = 1.81 \text{ \AA}$, длина трубочек 140 мм, диаметр 1 мм, окрашенных в зеленый цвет (также путем обмотки изоляционной лентой) и стержневых палочек длиной 1см. В данной работе мы также используем подобные трубочки с учетом деформации кольцевых моделей. (таб.).

Параметры используемых гибких трубочек для хлоруглеродов C_2

Хлоруглероды	Количество гибких трубочек зеленого цвета	Количество гибких трубочек черного цвета	Длина зеленых трубочек (мм)	Длина черных трубочек (мм)
Гексахлорэтан	42	8	140	115
Тетрахлорэтилен	28			

Дихлорацетилен	14			
----------------	----	--	--	--

ЛИТЕРАТУРА

1. Серый С.В., Кабалдин Ю.Г., Прослович А.А., Брудасов Е.Н. /Математическое моделирование наноструктур и нановзаимодействий на атомарном уровне. Комсомольск - на Амуре. ГОУВПО. 2010. С.50-53.
2. Кабалдин Ю.Г., Муравьев С.Н., Серый С.В., Прослович А.А. /Информационные модели наносистем и наноструктурирование материалов. Комсомольск - на Амуре. ГОУВПО. 2009. С.212.
3. “Dünyəvi təhsil sistemində azərbaycan aliminin töhfəsi” / Ж. Формула успеха. 2009. № 01(15). С. 13-14.
4. Bağmanov B.T., Yusifova N.İ. / Xəzər xəbər. 2005. № 196. S.32-33.
5. Салахов М.С, Багманов Б.Т., Гречкина О.Т., Кадырова Н.А. //Химические проблемы. 2010. № 3. С.477-479.
6. Salakhov M.S. / Science without Borders Transactions of International Academy of Science. 2005-2006. v.2. P.500-508.
7. Zefirov N.S., Shestakova T.G., Kirpichenok M.A. / Chemistry of hexachlorocyclopentadiene and related compounds. M.G.U. 1985. P. 15.
8. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия. 1976. С.246.
9. Гиллеспи Р. Геометрическая молекула, под ред. Ю.А. Пентина. М.Мир. 1975. С. 175.
10. Вилков Л.В., Матрюков В.С., Садова И.И. Определение геометрического строения свободных молекул. М.:Химия. 1978. 129с.

***XLORKARBONLARIN VIZUALLAŞMASI ÜÇÜN HƏLQƏÜZLÜ MOLEKUL
MODELLƏR. 2. HEKSAXLORETAN, TETRAXLORETİLEN VƏ
DİXLORASETİLEN***

M.S.Salahov, B.T.Bağmanov, O.T.Qreçkina, N.A.Qədirova

Heksaxloretan, tetraxloretilen və dixlorasetilen molekullarının həlqəüzlü modelləri konformasiya xüsusiyyətləri nəzərə alınmaqla müzakirə olunur.

***RINGHEDRAL MODELS FOR VISUALIZATION OF MOLECULES OF
CHLOROCARBON. 2. HEXACHLORETHANE, TETRACHLORETHYLENE
AND DICHLOROACETYLENE***

M.S.Salakhov, B.G.Bagmanov, O.T.Grechkina, N.A.Kadyrova

The ringhedral models of molecules of hexachlorethane, tetrachlorethylene and dichloroacetylene taking into account conformational peculiarities of molecules have been examined.