

УДК 547.222 : 541.6

**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ УСТОЙЧИВОЙ КОНФОРМАЦИИ ПЕРХЛОРПРОПАНА
В КОЛЬЦЕГРАННЫХ МОДЕЛЯХ**¹М.С. Салахов, ¹Б.Г. Багманов, ²Н.А. Кадырова, ²М.О. Мамедова¹Институт полимерных материалов Национальной АН Азербайджана
AZ 5004 Сумгайыт, ул. С. Вургуна, 124; e-mail: ipoma@science.az²Бакинский государственный университет
AZ 1148 Баку, ул. З.Халилова, 23; e-mail: info@bsu.az

В статье впервые рассматривается кольцевая модель устойчивой конформации перхлорпропана, изготовленная из гибких полимерных трубочек.

Ключевые слова: перхлорпропан, модель Стюарта-Бриггеба

В продолжение наших ранних исследований по визуализации хлоруглеродов C_1-C_2 [1,2], в данной работе впервые рассматривается описание конформационной особенности перхлорпропана с применением метода кольцевых моделей, изготовленных нами [1-3] из гибких полимерных трубочек.

Известно [4], что молекула перхлорпропана, в отличие от молекулы пропана, имеет шахматное расположение атомов

хлора в результате заторможенности вращения обеих углерод-углеродных связей, обусловленных взаимным отталкиванием электронных облаков объемных хлорных атомов, изображенных в виде кольцевых моделей (рис.1), и поэтому существует в единственной устойчивой конформационной форме (рис.2) в представленных моделях Стюарта-Бриггеба.



Рис.1. Кольцевая модель молекулы Cl_2 .



Рис.2. Модель Стюарта-Бриггеба устойчивой конформации молекулы октахлорпропана.

В случае же пропана молекула способна находиться в различных конформационных формах (рис.3,4), так как минимальные

объемы водородных атомов слабо препятствуют вращению вокруг углеродных связей.



Рис.3

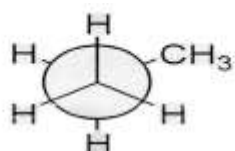


Рис.4

Рис.3.4. Модель Стюарта-Бриглеба молекулы пропана.

Поэтому визуализация такой молекулы кольцевыми моделями имеет мно-

жество вариаций, хотя сохраняется единая правильная тетраэдрическая форма каждого углеродного фрагмента (рис.5).



Ньюменовская графическая форма

Тетраэдрическая модель C_3H_8

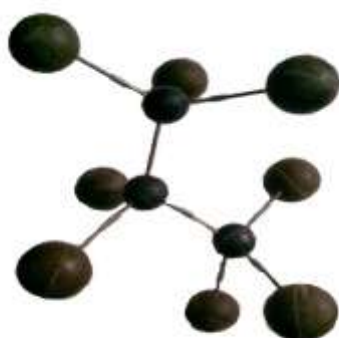
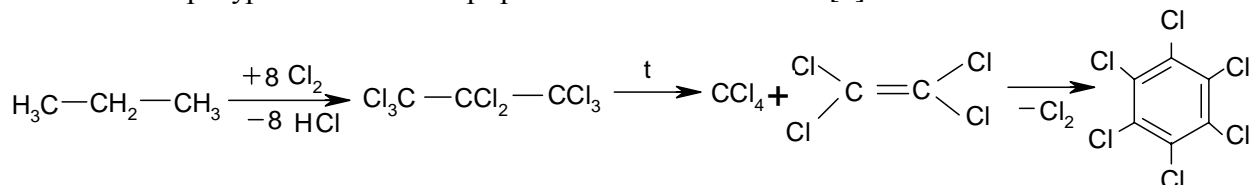


Рис.5. Шаростержневые модели молекулы перхлорпропана в устойчивой конформации.

В случае перхлорпропана происходит удлинение связи С-С (1.657 \AA) по сравнению с пропаном (1.513 \AA) [5]. Такое удлинение приводит к ослаблению энергии связи, что является причиной реакции хлоринолиза при исчерпывающем высокотемпературном хлорировании

углеводородов C_3 , приводящие к образованию эквимольных количеств CCl_4 и $CCl_2=CCl_2$ [6,7], а также образованию наиболее устойчивого хлоруглерода - гексахлорбензола при пиролизе хлоруглеродов (C_1-C_4) при температуре выше 600°C [8].



Таким образом, с одной стороны, ограничение конформационной устойчивости, а с другой – удлинение углерод-углеродных связей приводит к общей нестабильности получающихся хлоруглеродных производных пропана и

позволяет наглядно визуализировать эти свойства в виде кольцеванных моделей и получить ответы на термическую неустойчивость таких молекул при высоких температурах.



Рис.6. Кольцеванные модели устойчивой конформации октахлорпропана.

Была рекомендована сборка кольцеванной модели молекулы октахлорпропана из гибких полимерных трубочек со следующими параметрами: для углерода с $R=0,63 \text{ \AA}$ и длиной трубочек 115см с диаметром трубочек $\approx 1\text{мм}$, окрашенных в

черный цвет путем обмотки изоляционной лентой, а для хлора с $R=1,81 \text{ \AA}$, длина трубочки 140см , диаметр трубочек $\approx 1\text{мм}$, окрашенных в зеленый цвет, также путем обмотки изоляционной лентой и стержневых палочек длиной 1см [9].

ЛИТЕРАТУРА

1. Салахов М.С., Багманов Б.Т., Гречкина О.Т., Кадырова Н.А.. Кольцеванные модели для визуализации молекул хлоруглеродов. Четыреххлористый углевод. // Химические проблемы. 2010. №3. С.477-479.
2. М.С.Салахов, Б.Т.Багманов, О.Т. Гречкина, Н.А.Кадырова. Кольцеванные моде-

- ли для визуализации молекул хлоруглеродов. Гексахлорэтан, тетрачлорэтилен и дихлорацетилен. // Химические проблемы. 2010. №4. С.644-648.
3. Salahov M.S., Qadirova N.A. Xlorarbonların həlqəüzlü modelləri. IV Respublika elmi konfrans BDU. 2010. S.67.

4. Salakhov M.S. "Geometrical structure of chlorocarbons". // *Sciens without borders Transations of the International Academy of Science HDE*. 2005/2006. v.2. p.500-508.
5. Мaстрюков В.С., Осини Е.Л., Вилков Л.В. Геометрия молекул. // *Журн. структ. Химии*. 1976. т.17. №1. С.80-85, 86-91.
6. Salahov M.S., Bagmanov B.T. C₁- C₃ karbohidrogenlərin qaynar-lay reaktorunda tam xlorlaşdırılması. // *IV Elmi-praktiki seminar. Bakı. Elm*. 2009. S.15-17.
7. Салахов М.С., Умаева В.С., Багманов Б.Т. Роль азербайджанских научно-инновационных исследований в развитии химической промышленности. // *ж. НАНА Новости науки и инновация*. 2009. №1. С.83-85.
8. Мамедалиев Ю.Г., Гусейнов М.М., Кичиева Д.Д., Мамедов С.М. Получение гексахлорбензола термическим распадом перхлоруглеродов. // *Доклады АН Аз.ССР.*, 1961. т.17. №2. С.109-113.
9. Салахов М.С., Мамедова М.О., Кадырова Н.А. Кольцевая модель для визуализации молекулы октахлорпропана. V Республиканская научная конференция БГУ. 2011. С.115.

**PERXLORPROPAN MOLEKULUNUN DAYANIQLI KONFORMASIYASININ
HƏLQƏÜZLÜ MODELƏRLƏ VIZUALLAŞDIRILMASI**

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

Məqalədə ilk dəfə olaraq perxlorpropan molekulunun dayanıqlı konformasiyasının çevik polimer borucuqlar vasitəsi ilə hazırlanmış həlqəüzlü modelləri nəzərdən keçirilir.

Açar sözlər: perxlorpropan, Stuart-Brigleb modeli

**VISUALIZATION OF STABLE CONFORMATION OF PERCHLORPROPAN IN
RINGHEDRAL MODELS**

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

The article considers for the first time the ringhedral model of the stable conformation of perchlorpropan, made of flexible polymer tubes.

Keywords: perchlorpropan, Stuart-Brigleb model

Поступила в редакцию 11.09.2011