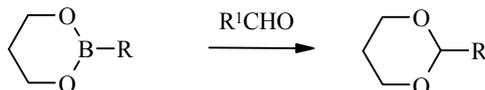


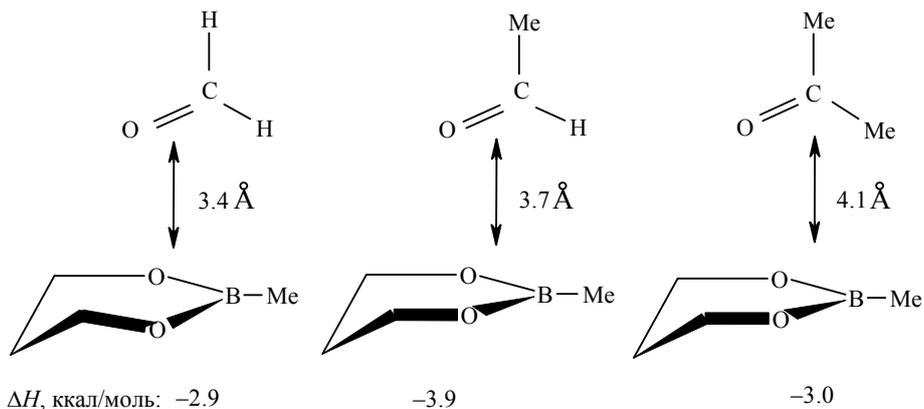
ОТНОСИТЕЛЬНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ КОМПЛЕКСОВ 2-МЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА С АЛЬДЕГИДАМИ И АЦЕТОНОМ

Ключевые слова: альдегиды, ацетон, 1,3,2-диоксаборинан, квантовая химия, комплексы.

Известно, что взаимодействие 1,3-диоксаборинанов с альдегидами приводит к соответствующим 1,3-диоксанам [1–3].



Первой стадией этой реакции является комплексообразование молекулы карбонильного соединения с циклическим борным эфиром [4]. В настоящей работе методом HF/6-31G(d) в рамках программного обеспечения HyperChem [5] исследована относительная стабильность ассоциатов 2-метил-1,3,2-диоксаборинана с формальдегидом, ацетальдегидом и ацетоном.



Образование комплексов с карбонильными соединениями не оказывает заметного влияния на конформацию цикла (*софа* [6, 7]). Во всех случаях молекула альдегида или ацетона располагается почти перпендикулярно плоскости гетероатомного фрагмента кольца и смещена к одному из атомов кислорода циклического борного эфира. Карбонильная группа параллельна этой плоскости и находится на расстоянии 3.4–4.1 Å от неё. Предполагавшееся *a priori* донорно-акцепторное взаимодействие *n*-электронных пар карбонильного кислорода с вакантной орбиталью бора не выявлено: расстояние между этими центрами составляет 3.4–4.2 Å и конфигурация атома бора остается планарной. В то же время характер ВЗМО и ВЗМО-1 указывает на то, что в основе формирования обсуждаемых ассоциатов лежит взаимодействие между *n(p)*-орбиталью одного из гетероатомов кислорода и системой: *n*-электронные пары карбонильного кислорода – орбитали связей С–С (С–Н) карбонильной группы.

Все комплексы экзотермичны, однако, значение энтальпии образования (ΔH) мало зависит от характера карбонильного соединения и не превышает 3.9 ккал/моль. Известно, что кетоны, в отличие от альдегидов, практически не взаимодействуют с циклическими борными эфирами [2, 6]. Таким образом, образование исследованных ассоциатов характеризует лишь начальную стадию процесса и не оказывает заметного влияния на глубину протекания обсуждаемой реакции.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В. В. Кузнецов, А. И. Грень, *ЖОХ*, **53**, 1432 (1983).
2. В. В. Кузнецов, Ю. Э. Брусиловский, в кн. *XX Украинская конференция по органической химии. Тез. докл.*, Одесса, 2004, с. 235.
3. В. В. Кузнецов, Ю. Э. Брусиловский, *Современные наукоемкие технологии*, № 2, 74 (2006).
4. Ю. Э. Брусиловский, В. В. Кузнецов, *Современные наукоемкие технологии*, № 4, 100 (2010).
5. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
6. А. И. Грень, В. В. Кузнецов, *Химия циклических эфиров борных кислот*, Наукова думка, Киев, 1988, 160 с.
7. В. В. Кузнецов, *Успехи органического катализа и химия гетероциклов*, Химия, Москва, 2006, с. 336.

В. В. Кузнецов*

Уфимский государственный нефтяной
технический университет,
ул. Космонавтов, 1, Уфа 450062, Россия
e-mail: kuzmaggy@mail.ru

Поступило 27.12.2010