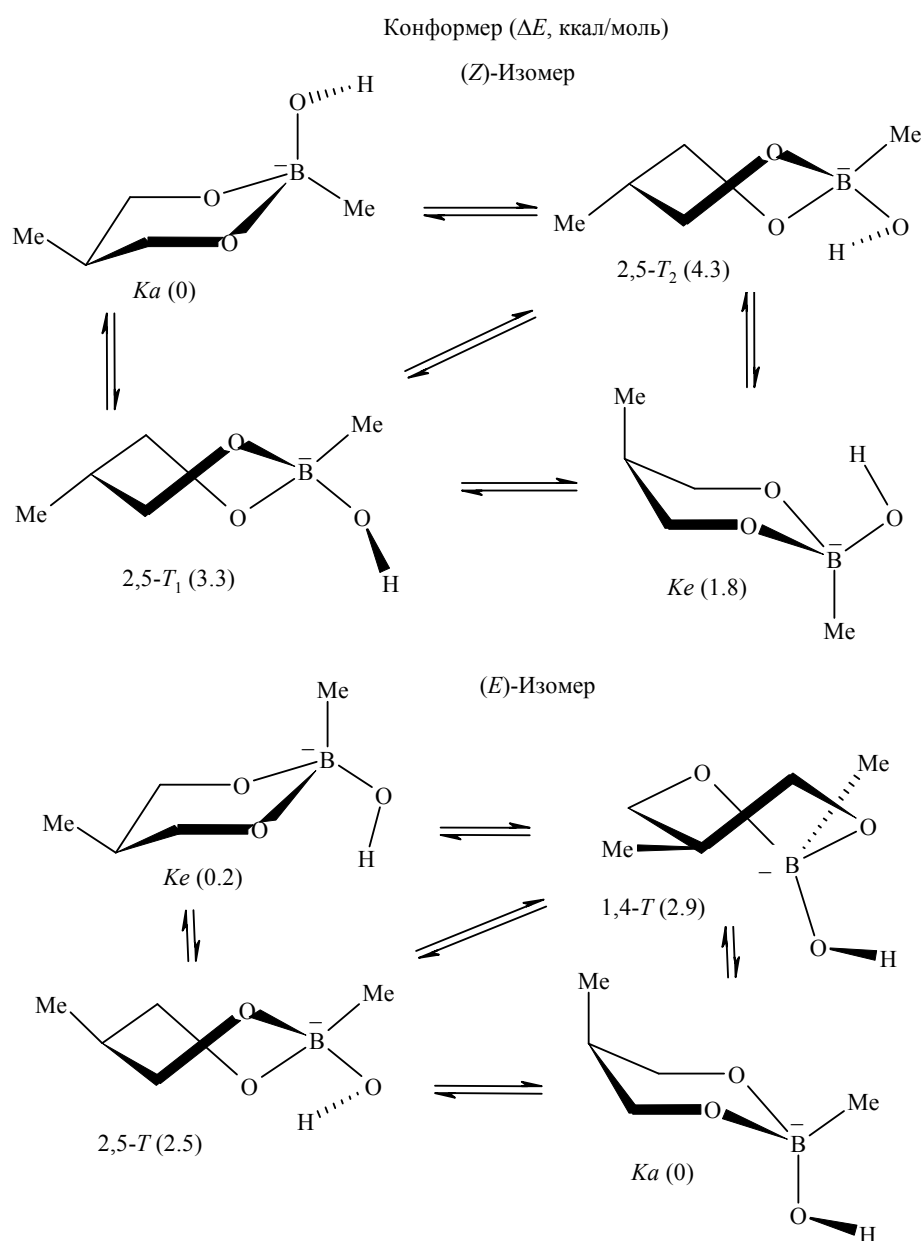


Образование экзотермичных комплексов с гидроксил-анионом приводит к конфигурационной перестройке атома бора. Преимущественная конформация циклического эфира с sp^3 -атомом бора меняется с *софы* на *кресло*; формируются (*Z*)- и (*E*)-изомеры. При этом число минимумов на поверхности потенциальной энергии образовавшихся ассоциатов заметно возрастает за счет появления гибких конформеров 1,4-*T* и 2,5-*T*. Наиболее стабильная из форм (*Z*)-изомера (*Ka*, с аксиальной гидроксильной группой) на 0.8 ккал/моль устойчивее наиболее стабильного из конформеров (*E*)-изомера (*Ka*).



Конформеры 2,5- T_1 и 2,5- T_2 (Z)-изомера различаются ориентацией группы ОН относительно гетероциклического кольца. Полученные результаты подтверждают сходство исследованных ассоциатов с ближайшими неборными аналогами – замещенными 1,3-диоксанами [7] – и открывают дополнительные возможности для детального изучения стереохимии циклических борных эфиров с тетраэдрическим атомом бора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В. В. Кузнецов, О. Ю. Валиахметова, С. А. Бочкор, *ХГС*, 1260 (2009). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **45**, 1004 (2009)].
2. О. Ю. Валиахметова, С. А. Бочкор, В. В. Кузнецов, *ЖОрХ*, **45**, 796 (2009).
3. В. В. Кузнецов, *ХГС*, 1105 (2009). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **45**, 886 (2009)].
4. О. Ю. Валиахметова, В. В. Кузнецов, *ЖОрХ*, **45**, 1268 (2009).
5. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
6. В. В. Кузнецов, А. Н. Новиков, И. С. Рублев, П. Ю. Марколенко, *ХГС*, 426 (2003). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **39**, 379 (2003)].
7. М. Г. Файзуллин, А. Е. Курамшина, А. Х. Мамлеев, В. В. Кузнецов, *ЖОХ*, **79**, 2046 (2009).

О. Ю. Валиахметова^а, В. В. Кузнецов^{а,б*}

^аУфимский государственный нефтяной
технический университет,
Уфа 450062, Россия

Поступило 30.11.2009

^бИнститут физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН,
Уфа 450075, Россия
e-mail: kuzmaggy@mail.ru