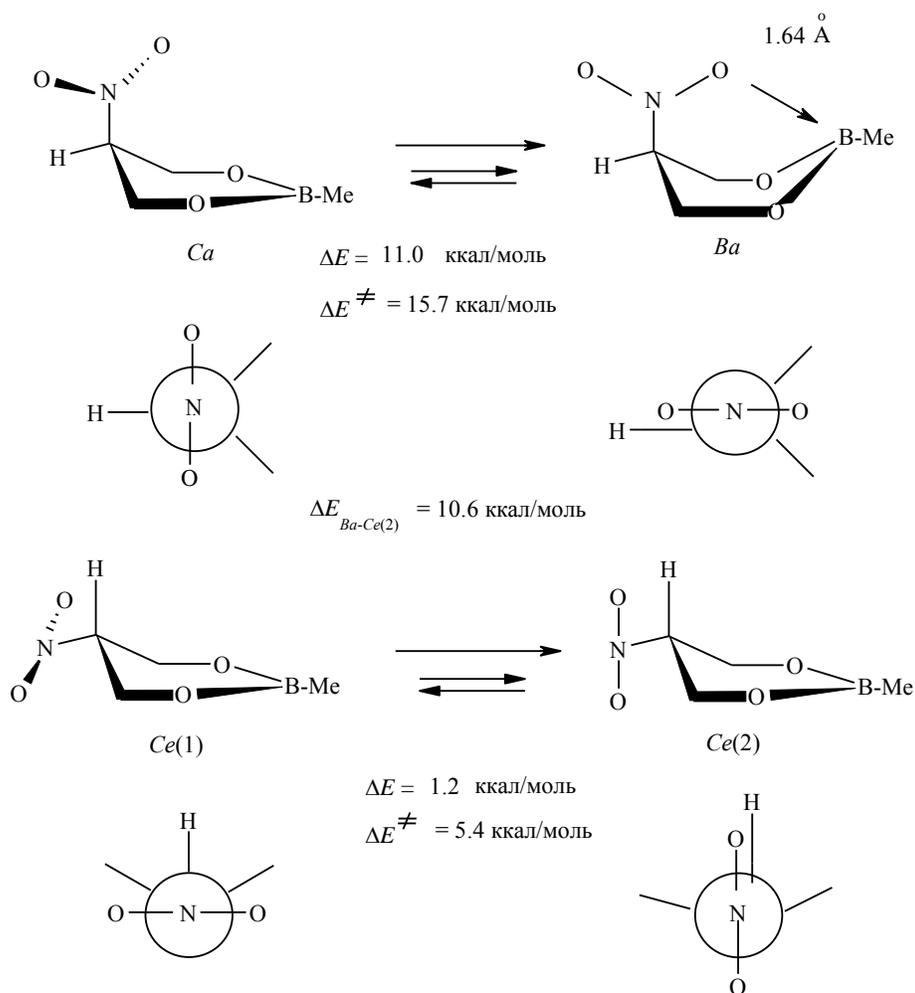


ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ НИТРОГРУППЫ В 2-МЕТИЛ-5-НИТРО-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНЕ

Ключевые слова: 2-метил-5-нитро-1,3,2-диоксаборинан, барьер вращения, квантовая химия, конформер, поверхность потенциальной энергии.

Интерес к 1,3,2-диоксаборинанам, связанный с особенностями строения, химического поведения и комплексом практически полезных свойств [1], делает актуальным изучение поверхности потенциальной энергии (ППЭ) молекул этих соединений методами компьютерного моделирования [2, 3]. Ранее было показано, что молекулы 5-нитро-1,3,2-диоксаборинанов пребывают в преимущественной конформации с аксиальной нитрогруппой [2–5]. В настоящей работе в рамках пакета NucleonChem [6] методом RHF//STO-3G впервые исследованы барьеры внутреннего вращения нитрогруппы в аксиальном и экваториальном конформерах молекулы 2-метил-5-нитро-1,3,2-диоксаборинана.



Полученные данные свидетельствуют о существовании двух ротамеров как для аксиального, так и для экваториального конформеров. В случае аксиальной формы более устойчивый ротамер *Ba*, по всей видимости, стабилизирован за счет внутрикоординационной связи $O \rightarrow B$, экспериментальное значение которой для тетраалкоксиборанов составляет 1.44–1.59 Å [1]; конформационное равновесие

между формами *Sa* и *Va* отличается относительно высокими значениями ΔE и ΔE^\ddagger . Наиболее стабильный ротамер экваториального конформера *Ce(2)* характеризуется "биссектральной" ориентацией нитрогруппы, которая устойчивей "ортогональной" ориентации *Ce(1)*; при этом ротамер *Va* более чем на 10 ккал/моль стабильнее, чем форма *Ce(2)*. Таким образом, результаты расчетов подтверждают преимущественную реализацию конформера *Va*, геометрия которого близка к наблюдаемой, по данным РСА, для молекулы циклического фенил-борного эфира бис(оксиалкил)нитрона [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А. И. Грень, В. В. Кузнецов, *Химия циклических эфиров борных кислот*, Наукова думка, Киев, 1988, 160 с.
2. В. В. Кузнецов, О. Ю. Валиахметова, С. А. Бочкор, *ХГС*, 1860 (2007). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **43**, 1577 (2007)].
3. В. В. Кузнецов, С. А. Бочкор, *ХГС*, 1065 (1999). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **35**, 935 (1999)].
4. В. В. Кузнецов, К. С. Захаров, И. В. Петровский, А. И. Грень, *ХГС*, 1107 (1990). [*Chem. Heterocycl. Comp.*, **26**, 927 (1990)].
5. W. Kliegel, L. Preu, S. J. Rettig, J. Trotter, *Can. J. Chem.*, **64**, 1855 (1986).
6. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
7. W. Kliegel, L. Preu, S. J. Rettig, J. Trotter, *Can. J. Chem.*, **63**, 509 (1985).

О. Ю. Валиахметова, С. А. Бочкор, В. В. Кузнецов^а

Уфимский государственный нефтяной
технический университет,
Уфа 450062, Россия

Поступило 20.05.2008

^аИнститут физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН,

Уфа 450075
e-mail: kuzmaggy@mail.ru

ХГС. – 2008. – № 10. – С. 1593.