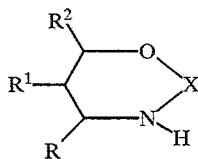


В. В. Кузнецов

## АНАЛИЗ КОНФОРМАЦИОННОГО СОСТАВА СТЕРЕОИЗОМЕРОВ 4,5- И 5,6-ДИМЕТИЛ-1,3,2-ОКСАЗАБОРИНАНОВ

С помощью эмпирического (ММ2) и полуэмпирического (АМ1) методов проведен расчет энергии с полной оптимизацией геометрии молекул *цис*- и *транс*-изомеров 4,5- и 5,6-диметил-1,3,2-оксазаборинанов, а также модельных 1,3,2-оксазаборинанов и тетрагидро-1,3-оксазинов. Из сопоставления экспериментальных и расчетных КССВ и данных по относительной энергии отдельных конформеров следует, что молекулы циклических борных эфиров образуют многокомпонентную равновесную систему, включающую формы софы и полукресла с экваториальной ориентацией N—H.

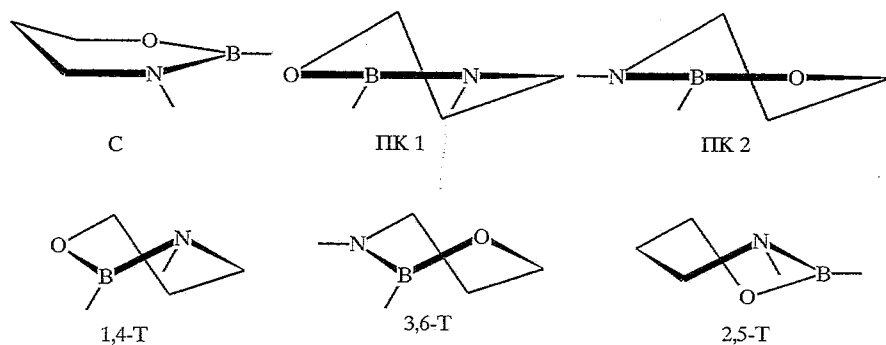
Систематические исследования стереохимии замещенных 1,3,2-оксазаборинанов показали, что для молекул большинства указанных соединений характерна преимущественная конформация софы или состояние равновесия между инвертомерами софы [1, 2]. Однако в ряде случаев для интерпретации данных ЯМР допускалась возможность участия в конформационном равновесии одной из гибких форм [2—5]. Сложность оценки относительной стабильности таких форм в рамках метода CNDO [6] из-за неполного учета энергии электронного обмена в гетероатомном фрагменте [7, 8] сохраняет вероятность ошибочных конформационных отнесений на основании данных ЯМР. В этой связи целью настоящей работы является исследование конформационного состава молекул индивидуальных стереоизомеров 4,5- и 5,6-диметил-1,3,2-оксазаборинанов (I, II), а также модельных 1,3,2-оксазаборинанов (III—V) и тетрагидро-1,3-оксазинов (VI—X) методами молекулярной механики ММ2 [9] и ССП МО ЛКАО в параметризации АМ1 [10, 11] в сочетании с данными ЯМР [3].



I X = B-H, R = R<sup>1</sup> = Me, R<sup>2</sup> = H; II X = B-H, R = H, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = Me; III X = B-H, R = R<sup>2</sup> = H, R<sup>1</sup> = Me; IV X = B-H, R = Me, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = H; V X = B-H, R = R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = Me; VI X = CH<sub>2</sub>, R = R<sup>2</sup> = H, R<sup>1</sup> = Me; VII X = CH<sub>2</sub>, R = Me, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = H; VIII X = CH<sub>2</sub>, R = R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = Me; IX X = CH<sub>2</sub>, R = R<sup>1</sup> = Me, R<sup>2</sup> = H; X X = CH<sub>2</sub>, R = H, R<sup>1</sup> = R<sup>2</sup> = Me

В результате для молекул эфиров I и II на поверхности потенциальной энергии обнаружен ряд минимумов, отвечающих конформерам софы (С), полукресла (ПК 1, ПК 2), а также 1,4-, 3,6- и 2,5-твист (1,4-, 3,6- и 2,5-Т) с диэкваториальной (е<sub>е</sub>, *транс*-) либо экваториально-аксиальной (е<sub>а</sub>, *цис*-) ориентацией заместителей.

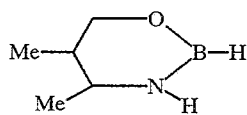
Все формы кроме С получены при условии фиксации торсионных углов C<sub>(4)</sub>NBO и C<sub>(6)</sub>OVN, в противном случае они изомеризуются в софу. Конформер 2,5-Т в ходе минимизации в приближении АМ1 даже при этих ограничениях превращается в полукресло.



Из значений внутрициклических торсионных углов наиболее стабильных конформеров *цис*- и *транс*-изомеров (на примере эфира I, табл. 1) следует, что формы ПК 1 и ПК 2 различаются степенью искажения фрагментов C<sub>(4)</sub>NBO и C<sub>(6)</sub>OVN. Необходимо также отметить большую уплощенность софы (AM1) по сравнению с результатами MM2. Расчетные значения длин связей и валентных углов этой формы соответствуют данным эксперимента [12, 13].

Т а б л и ц а 1

Внутрициклические торсионные углы (град.) отдельных конформеров молекул эфира I



Конфигурация	Метод расчета	Конформер	1-2-3-4	2-3-4-5	3-4-5-6	4-5-6-1	5-6-1-2	6-1-2-3
<i>цис</i> -	MM2	C 4a5e	4,9	-30,2	55,8	-55,6	27,9	-3,3
		C 4e5a	5,8	-31,2	57,4	-59,1	32,8	-6,4
		ПК 1 5e	-2,1	-19,6	50,5	-60,4	37,0	-7,3
		ПК 1 5a	-1,4	-21,8	52,9	-62,7	39,0	-7,9
		ПК 2 5e	-6,3	32,7	-57,0	54,0	-25,0	1,6
		ПК 2 5a	-8,0	37,9	-61,1	54,2	-22,8	-0,6
	AM1	C 4a5e	0,7	-21,2	45,8	-53,6	33,7	-6,7
		C 4e5a	-2,9	-20,3	46,0	-53,2	32,0	-2,8
		ПК 1 5e	-2,5	-16,8	43,9	-55,5	37,1	-7,9
		ПК 1 5a	-4,2	-16,2	43,6	-55,3	36,9	-6,4
		ПК 2 5e	-5,6	28,2	-48,5	49,6	-27,1	4,1
		ПК 2 5a	-5,7	32,3	-50,3	46,1	-20,8	-1,2
<i>транс</i> -	MM2	C 4e5e	-2,3	27,7	-55,5	58,8	-31,9	4,3
		ПК 1	-3,5	-18,9	50,7	-61,9	38,6	-7,1
		ПК 2	-7,5	37,0	-60,0	53,2	-21,6	-1,5
	AM1	C 4e5e	2,6	19,4	-44,2	51,2	-30,5	2,8
		ПК 1	-5,8	-12,5	40,1	-53,6	36,9	-6,8
		ПК 2	-5,7	30,9	-48,7	45,5	-21,0	-0,4

Относительные энергии конформеров эфиров I и II (табл. 2) показывают, что их стабильность убывает в ряду: С ≥ ПК > 1,4-Т > 3,6-Т > 2,5-Т. Для *транс*-изомеров вблизи основного минимума (С4е5е либо С5е6е) существуют формы ПК 1 (почти вырождена по энергии) и ПК 2. Для *цис*-изомеров наиболее устойчив конформер С4а5е (либо С5е6а), однако в окрестностях этих точек находится ряд локальных минимумов (С4е5а, С6е5а, семейство полукресел) с различиями в энергии от 0,1 до 1,0 ккал/моль. Основная причина существования таких уплощенных глобальных минимумов связана с уменьшением  $\Delta E_{C(4)CH_3}$  и  $\Delta E_{C(6)CH_3}$  по сравнению с  $\Delta E_{C(5)CH_3}$  (соединения I, II и модельные эфиры III—V, табл. 2), характерным для систем с плоской конфигурацией атома во втором положении кольца. В молекулах тетрагидро-1,3-оксазинов VI—X значения  $\Delta E_{C(4)CH_3}$  и  $\Delta E_{C(6)CH_3}$  в полтора-два раза выше, чем  $\Delta E_{C(5)CH_3}$  (за исключением результатов АМ I, существенно занижающих величину  $\Delta E_{C(6)CH_3}$  в соединениях VIII и X). Экспериментальные величины  $\Delta G^\circ$  метильной группы у С(4) и С(6) в тетрагидро-1,3-оксазинах неизвестны, однако они не должны заметно отличаться от  $\Delta G^\circ C(4)CH_3$  в 1,3-диоксанах (2,7...2,9 ккал/моль [14]). В то же время свободная конформационная энергия метильной группы у С(5) в оксазинах и 1,3,2-оксазаборинанах практически одинакова [15]. Из сказанного следует, что для молекул *цис*-изомеров оксазинов IX и X, по данным расчетов, характерно преобладание кресла К4е5а (К5а6е), хотя и не исключается присутствие альтернативных форм, а для *транс*-изомеров доминируют формы К4е5е и К5е6е соответственно; это согласуется с данными ЯМР [16—22]. Однако для *цис*- и *транс*-изомеров борных эфиров I и II выделить одну предпочтительную конформацию достаточно сложно. Необходимо также отметить, что для оксазинов VI—X более стабильны конформеры с аксиальной N—H связью (табл. 2), что подтверждено экспериментально [16—19, 23—25]. Напротив, отличительной особенностью 1,3,2-оксазаборинанов является планарная конфигурация атома азота, допускающая максимальный *p*—*p*-электронный обмен по связи B—N [1—5]. Поэтому конформеры с аксиальной N—H связью здесь отсутствуют (в ходе минимизации такие формы претерпевают быструю изомеризацию в софу со связью N—H, копланарной пяти атомам кольца). Это объективно свидетельствует о снижении по сравнению с оксазинами IX и X барьеров перехода между отдельными конформерами и повышении конформационной неоднородности как *цис*-, так и *транс*-изомеров эфиров I и II.

Ранее [3] на основании данных ЯМР  $^1H$  и  $^{13}C$  *транс*-изомерам 1,3,2-оксазаборинанов I и II была приписана преимущественная конформация софы, а *цис*- — конформация 2,5-Т. Малая вероятность реализации заметных количеств последней (наиболее неустойчивой) формы, ставшая очевидной после проведения расчетов, вызывает необходимость сравнения оптимальных геометрических параметров с реальной структурой молекул циклических эфиров I и II. С этой целью в настоящей работе на основе торсионных углов  $\phi$  между соответствующими протонами (данные оптимальной геометрии) с помощью равенства [26] и значений электроотрицательности замещающих групп [27] определены расчетные величины  $K_{SSV} \text{ } ^3J_{AX}, \text{ } ^3J_{BX}, \text{ } ^3J_{CX}$  и  $\text{ } ^3J_{DX}$  (табл. 3). Сравнение с экспериментальными  $K_{SSV}$  [3] свидетельствует о невозможности однозначного выбора одного конформера как для *цис*-, так и для *транс*-изомеров; ни один из наборов расчетных констант, как показывают значения  $\sum |\Delta J|$ , не соответствует в полной мере данным ЯМР  $^1H$ . В основном это обусловлено не погрешностями в параметризации уравнения [26] и не отсутствием поправки на влияние среды (в каждом случае рассчитывалась изолированная молекула в вакууме), а невозможностью реализации торсионных углов, соответствующих экспериментальным  $K_{SSV}$ . Действительно, для всех значений  $\phi$  любого конформера существует эмпирическая зависимость (табл. 3):  $\phi_{AX} + \phi_{BX}$  (либо  $\phi_{AX} - \phi_{BX}$ ) и  $\phi_{CX} + \phi_{DX}$  (либо  $\phi_{CX} - \phi_{DX}$ ) = = 116,0 - 121,6°.

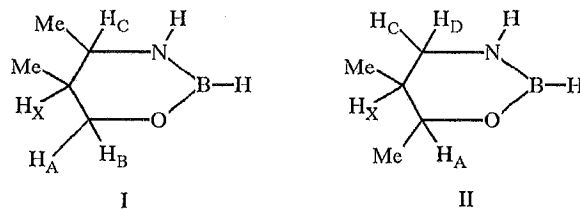
Относительные энергии конформеров молекул соединений I—X (ккал/моль)

Соединение	Конформер	MM2		AM1	
		E	$\Delta E$	-E	$\Delta E$
1	2	3	4	5	6
I	<i>цис</i> -				
	C 4a5e	5,4	0,0	1892,8	0,0
	C 4e5a	6,0	0,6	1892,6	0,2
	ПК 1 5e	5,7	0,3	1892,7	0,1
	ПК 1 5a	6,3	0,9	1892,4	0,4
	ПК 2 5e	5,4	0,0	1892,5	0,3
	ПК 2 5a	6,4	1,0	1891,8	1,0
	1,4-Т 5e	7,7	2,3	1889,9	2,9
	1,4-Т 5a	8,5	3,1	1889,9	2,9
	3,6-Т 4e	9,2	3,8	1889,3	3,5
	3,6-Т 4a	7,9	2,5	1889,0	3,8
	2,5-Т	13,1	7,7	—	—
	<i>транс</i> -				
	C 4e5e	4,8	0,0	1893,9	0,1
	ПК 1	5,0	0,2	1894,0	0,0
	ПК 2	5,2	0,4	1893,0	1,0
	1,4-Т	6,5	1,7	1892,4	1,6
	3,6-Т	7,8	3,0	1890,5	3,5
	2,5-Т	11,8	7,0	—	—
		$\Delta E C_{(5)}CH_3^*$		1,2	
	$\Delta E C_{(4)}CH_3^*$		0,6		1,1
II	<i>цис</i> -				
	C 5e6a	5,3	0,0	1892,8	0,0
	C 5a6e	6,0	0,7	1892,0	0,8
	ПК 1 5e	5,4	0,1	1892,7	0,1
	ПК 1 5a	6,3	1,0	1892,4	0,8
	ПК 2 5e	5,5	0,2	1892,4	0,4
	ПК 2 5a	6,4	1,1	1891,5	1,8
	1,4-Т 5e	7,2	1,9	1890,8	2,3
	1,4-Т 5a	8,5	3,2	1889,8	3,0
	3,6-Т 5e	8,5	3,2	1888,6	4,2
	3,6-Т 5a	9,3	4,0	1887,9	4,9
	2,5-Т	13,2	7,9	—	—
	<i>транс</i> -				
	C 5e6e	4,8	0,0	1893,4	0,0
	ПК 1	5,1	0,3	1893,3	0,1
	ПК 2	5,1	0,3	1892,6	0,8
	1,4-Т	7,0	2,2	1891,3	2,1
	3,6-Т	7,3	2,5	1890,4	3,0
	2,5-Т	11,7	6,9	—	—
		$\Delta E C_{(5)}CH_3$		1,2	
	$\Delta E C_{(6)}CH_3^*$		0,5		0,6
III	C 5e	3,3	0,0	1614,9	0,0
	C 5a	4,5	1,2	1614,0	0,9
IV	C 4e	3,3	0,0	1614,5	0,0
	C 4a	4,0	0,7	1613,8	0,7

1	2	3	4	5	6
V	C 6e	3,3	0,0	1613,7	0,0
	C 6a	4,0	0,7	1613,4	0,3
VI	K 3e5e	6,1	0,2	1652,6	5,0
	K 3a5e	5,9	0,0	1657,6	0,0
	K 3e5a	7,2	1,3	1651,6	6,0
	K 3a5a	7,1	1,2	1656,9	1,0
	$\Delta E C_{(5)}CH_3$		1,2		1,0
	$\Delta E N-H$		0,1		5,0
VII	K 3e4e	6,2	0,1	1651,4	5,4
	K 3a4e	6,1	0,0	1656,8	0,0
	K 3e4a	8,1	2,0	1652,0	4,8
	K 3a4a	8,0	1,9	1655,1	1,7
	$\Delta E C_{(4)}CH_3$		1,9		1,7
	$\Delta E N-H$		0,1		3,1...5,4
VIII	K 3e6e	6,3	0,2	1651,1	5,0
	K 3a6e	6,1	0,0	1656,1	0,0
	K 3e6a	8,6	2,5	1651,0	5,1
	K 3a6a	8,5	2,4	1655,8	0,3
	$\Delta E C_{(6)}CH_3$		2,4		0,3
	$\Delta E N-H$		0,1...0,2		5,0...5,1
IX	<i>транс-</i>				
	K 3e4e5e	7,4	0,2	1930,9	5,4
	K 3a4e5e	7,2	0,0	1936,3	0,0
	<i>цис-</i>				
	K 3e4e5a	8,6	0,1	1929,8	5,5
	K 3a4e5a	8,5	0,0	1935,3	0,0
	K 3e4a5e	9,3	0,8	1931,0	4,3
	$\Delta E C_{(4)}CH_3$		2,0		2,0
	$\Delta E C_{(5)}CH_3$		1,3		1,0
	$\Delta E N-H$		0,1...0,2		3,3...5,5
X	<i>транс-</i>				
	K 3e5e6e	7,4	0,1	1930,9	5,0
	K 3a5e6e	7,3	0,0	1935,9	0,0
	<i>цис-</i>				
	K 3e5a6e	8,7	0,1	1929,5	5,8
	K 3a5a6e	8,6	0,0	1934,9	0,4
	K 3e5e6a	9,6	1,0	1930,4	4,9
	K 3a5e6a	9,5	0,9	1935,3	0,0
	$\Delta E C_{(5)}CH_3$		1,3		0,0
	$\Delta E C_{(6)}CH_3$		2,2		0,6

\*  $\Delta E C_{(5)}CH_3 = E C 4e5a - E C 4e5e$  (либо  $E K 3a5a - E K 3a5e$ ; либо  $E K 3a4e5a - E K 3a4e5e$ ); приведено наименьшее из возможных значений  $\Delta$ . Аналогичным образом получены значения  $\Delta E C_{(4)}CH_3$  и  $\Delta E C_{(6)}CH_3$ .

Значения торсионных углов между протонами (град.) и КССВ (Гц) для наиболее стабильных конформеров молекул эфиров I и II



Соединение	Метод расчета	Конформер	$\phi_{AX}$	$\phi_{BX}$	$\phi_{CX}$	$\phi_{DX}$	${}^3J_{AX}$	${}^3J_{BX}$	${}^3J_{CX}$	${}^3J_{DX}$	$\Sigma   \Delta J  $
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
цис-I	MM2	C 4e5a	57,2	64,5	57,7	—	3,9	3,0	3,9	—	5,6
		C 4a5e	177,8	56,1	54,0	—	11,4	4,1	4,4	—	5,1
		ПК 1 5e	177,3	60,2	49,6	—	11,4	3,5	5,0	—	6,3
		ПК 1 5a	60,5	61,6	53,6	—	3,5	3,4	4,4	—	6,1
		ПК 2 5e	176,4	54,8	55,0	—	11,3	4,2	4,2	—	4,7
		ПК 2 5a	52,8	68,3	61,2	—	4,5	2,7	3,4	—	5,0
	AM1	C 4e5a	48,4	72,8	46,0	—	5,1	2,3	5,5	—	6,7
		C 4a5e	175,6	54,2	45,4	—	11,3	4,3	5,6	—	6,0
		ПК 1 5e	177,6	55,9	43,9	—	11,4	4,1	5,8	—	6,5
		ПК 1 5a	50,3	71,1	43,8	—	4,8	2,4	5,8	—	7,2
		ПК 2 5e	171,6	50,6	47,6	—	11,2	4,8	5,3	—	5,7
		ПК 2 5a	41,7	78,9	49,9	—	6,1	1,9	4,9	—	5,5

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
<i>транс-I</i>	MM2	С 4е5е	179,7	58,1	179,8	—	11,4	3,8	11,4	—	3,6
		ПК 1	176,6	60,6	175,3	—	11,4	3,5	11,4	—	3,9
		ПК 2	175,3	53,7	175,9	—	11,3	4,4	11,4	—	2,9
	AM1	С 4е5е	171,4	50,5	167,7	—	11,2	4,8	11,0	—	2,4
		ПК 1	173,7	52,4	163,8	—	11,3	4,6	10,7	—	2,0
		ПК 2	166,0	45,6	172,0	—	10,8	5,5	11,3	—	3,8
<i>цис-II</i>	MM2	С 5е6а	59,9	—	54,4	65,3	3,4	—	4,5	3,1	6,0
		С 5а6е	54,8	—	175,1	55,2	4,0	—	12,0	4,4	3,8
		ПК 1 5е	57,0	—	172,1	52,4	3,7	—	11,8	4,8	3,3
		ПК 1 5а	63,0	—	50,7	68,7	3,0	—	5,1	2,8	6,1
		ПК 2 5е	52,0	—	178,1	57,8	4,4	—	12,0	4,0	4,6
		ПК 2 5а	55,2	—	58,1	62,2	4,0	—	4,0	3,5	6,3
	AM1	С 5е6а	52,4	—	39,9	76,8	4,3	—	6,7	2,1	5,3
		С 5а6е	48,5	—	165,1	48,4	4,8	—	11,4	5,4	4,6
		ПК 1 5е	49,4	—	163,5	46,8	4,7	—	11,2	5,6	4,5
		ПК 1 5а	53,3	—	38,4	78,2	4,2	—	6,9	2,1	4,6
		ПК 2 5е	45,3	—	169,0	52,1	5,3	—	11,7	4,9	4,9
		ПК 2 5а	45,8	—	45,1	71,9	5,2	—	5,9	2,5	6,6
<i>транс-II</i>	MM2	С 5е6е	178,0	—	177,3	57,0	10,8	—	12,0	4,2	3,7
		ПК 1	174,1	—	173,6	53,6	10,7	—	11,9	4,6	3,9
		ПК 2	176,5	—	179,3	59,8	10,8	—	12,0	3,8	3,3
	AM1	С 5е6е	174,9	—	164,2	47,6	10,7	—	11,3	5,5	4,2
		ПК 1	176,5	—	162,4	45,9	10,8	—	11,1	5,8	4,2
		ПК 2	166,0	—	167,8	50,9	10,3	—	11,6	5,0	3,6

\*  $|\sum \Delta J| = |\sum J_{\text{эксп}} - J_{\text{расч}}|$ . Экспериментальные КССВ [3]: *цис-I*  ${}^3J_{AX} = 7,6$  Гц,  ${}^3J_{BX} = 4,5$  Гц,  ${}^3J_{CX} = 3,5$  Гц; *транс-I*  ${}^3J_{AX} = 11,2$  Гц,  ${}^3J_{BX} = 4,6$  Гц,  ${}^3J_{CX} = 8,8$  Гц;

*цис-II*  ${}^3J_{AX} = 3,6$  Гц,  ${}^3J_{CX} = 8,8$  Гц,  ${}^3J_{DX} = 4,6$  Гц; *транс-II*  ${}^3J_{AX} = 9,1$  Гц,  ${}^3J_{CX} = 10,6$  Гц,  ${}^3J_{DX} = 3,6$  Гц.

Нетрудно видеть (табл. 4), что удовлетворяющие экспериментальным КССВ углы, установленные по уравнению [26], отклоняются от выявленной эмпирической зависимости на 20...30° (за исключением *транс*-I). Отсюда следует, что реальному состоянию молекул эфиров I и II в полном соответствии с расчетными данными отвечает не один, а несколько конформеров. Для *транс*-изомеров преобладает софа C4e5e (C5е6е) с возможным вкладом ПК 1 и ПК 2, а для *цис*-изомеров, в противоположность результатам [3], характерно многокомпонентное равновесие с участием форм C4a5e (C5е6а), C4e5a (C5а6е) и семейства полукресел.

Т а б л и ц а 4

Значения торсионных углов (град.), соответствующие экспериментальным КССВ эфиров I и II

Конфигурация	I			II		
	$\phi_{AX}$	$\phi_{BX}$	$\phi_{AX} \pm \phi_{BX}$	$\phi_{CX}$	$\phi_{DX}$	$\phi_{CX} \pm \phi_{DX}$
<i>цис</i> *-	140,5 (31)	53 (122)	87,5 (91)	145 (25)	54 (95)	91 (95)
<i>транс</i> -	172,0	52,0	120	157,5	61,0	96,5

\* Для *цис*-изомеров определено два альтернативных набора углов.

Таким образом, исследованные соединения относятся к конформационно гибким системам, предполагающим существование вблизи точки минимума заметных количеств геометрически неэквивалентных форм [28, 29]. Полученные результаты дополняют базу данных по стереохимии 1,3,2-оксазаборинанов и открывают возможность прогнозирования конформационного состава молекул этих соединений с несколькими хиральными центрами.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Калюский А. Р., Кузнецов В. В., Шапиро Ю. Е., Бочкор С. А., Грень А. И. // ХГС. — 1990. — № 10. — С. 1424.
2. Калюский А. Р. Автореф. дис. ...канд. хим. наук. — Одесса, 1990. — 21 с.
3. Калюский А. Р., Кузнецов В. В., Тимофеев О. С., Грень А. И. // ЖОХ. — 1990. — Т. 60. — С. 2093.
4. Калюский А. Р., Кузнецов В. В., Грень А. И. // ЖОХ. — 1991. — Т. 61. — С. 1351.
5. Калюский А. Р., Кузнецов В. В., Брусилковский Ю. Э., Горбатьюк В. Я., Глухова М. Г., Грень А. И. // ЖОрХ. — 1990. — Т. 26. — С. 2498.
6. Калюский А. Р., Кузнецов В. В., Кругляк Н. Е., Юданова И. В., Тригуб Л. П., Грень А. И. // Деп. в ВИНТИ, № 1113-В 90; РЖХ. — 1990. — № 11. — Б1095.
7. Bingham R. C., Dewar M. J. S., Lo D. H. // J. Amer. Chem. Soc. — 1975. — Vol. 97. — P. 1294.
8. Birner P., Hofmann H. // Int. J. Quant. Chem. — 1982. — Vol. 21. — P. 833.
9. Allinger N. L. // J. Amer. Chem. Soc. — 1977. — Vol. 99. — P. 8127.
10. Dewar M. J. S., Zoebisch E. G., Healy E. P., Stewart J. J. P. // J. Amer. Chem. Soc. — 1985. — Vol. 107. — P. 3902.
11. Dewar M. J. S., Jie C., Zoebisch E. G. // Organometallics. — 1988. — Vol. 7. — P. 513.
12. Грень А. И., Кузнецов В. В. Химия циклических эфиров борных кислот. — Киев: Наукова думка, 1988. — 160 с.
13. Seip R., Seip H. // J. Mol. Struct. — 1975. — Vol. 28. — P. 441.
14. Внутреннее вращение молекул / Под ред. В. Орвилл-Томаса. — М.: Мир, 1977. — С. 373.
15. Кузнецов В. В., Калюский А. Р., Грень А. И. // ХГС. — 1996. — № 1. — С. 106.
16. Самитов Ю. Ю., Унковский Б. В., Бойко И. П., Жук О. И., Малина Ю. Ф. // ЖОрХ. — 1973. — Т. 9. — С. 193.
17. Самитов Ю. Ю., Жук О. И., Унковский Б. В., Бойко И. П., Малина Ю. Ф. // ЖОрХ. — 1973. — Т. 9. — С. 201.



18. Данилова О. И., Самитов Ю. Ю., Бойко И. П., Бордюкова Т. О., Унковский Б. В. // Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 1056 хп-Д80; РЖХ. — 1981. — № 9. — Б329.
19. Latyrova F. N., Zorin V. V., Zlotskii S. S., Rakhmankulov D. L., Karakhanov R. A., Bartok M., Molnar A. // Acta phys. chem. — 1981. — Vol. 27. — P. 87.
20. Алимйрзоев Ф. А., Степанянц А. У., Латыпова Ф. Н., Унковский Б. В. // Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 3093/79 деп; РЖХ. — 1980. — № 3. — Б325.
21. Данилова О. И., Самитов Ю. Ю., Бойко И. П., Бордюкова Т. О., Унковский Б. В. // Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 1055 хп-Д80; РЖХ. — 1981. — № 9. — Б330.
22. Данилова О. И., Самитов Ю. Ю., Бойко И. П., Бордюкова Т. О., Унковский Б. В. // Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 539 хп-Д81; РЖХ. — 1981. — № 24. — Б392.
23. Данилова О. И., Самитов Ю. Ю., Бойко И. П., Унковский Б. В. // Деп. в ОНИИТЭХИМ, № 1058 хп-Д80; РЖХ. — 1981. — № 9. — Б328.
24. Booth H., Lemieux R. U. // Can. J. Che. — 1971. — Vol. 49. — P. 777.
25. Cook M. J., Jones R. A. Y., Katritzky A. R., Manas M. M., Richards A. C., Sparrow A. J., Trepanier D. L. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. — 1973. — N 4. — P. 325.
26. Durette P. L., Horton D. // Org. Mag. Res. — 1971. — Vol. 3. — P. 417.
27. Huggins M. L. // J. Amer. Chem. Soc. — 1953. — Vol. 75. — P. 4123.
28. Shishkin O. V., Polyakova A. S., Struchkov Yu. T., Desenko S. M. // Mendeleev Commun. — 1994. — N 5. — P. 182.
29. Шишкин О. В. // Изв. РАН. Сер. хим. — 1997. — № 12. — С. 2095.

Физико-химический институт  
им. А. В. Богатского НАН Украины,  
Одесса 270080  
e-mail: physchem@paco.net

Поступило в редакцию 10.09.98