

# КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ 2,4,5-ТРИАЛКИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНОВ

Валиахметова О.Ю.<sup>1</sup>, Бочкор С.А.<sup>1</sup>, Кузнецов В.В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, г.Уфа

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН, г.Уфа

<sup>1</sup>Валиахметова О.Ю.

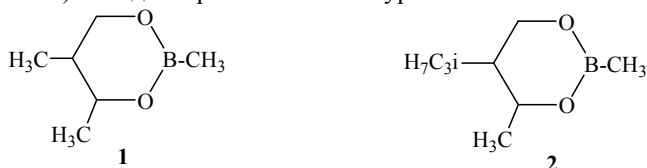
<sup>1</sup>Бочкор С.А.

<sup>1,2</sup>Кузнецов В.В.

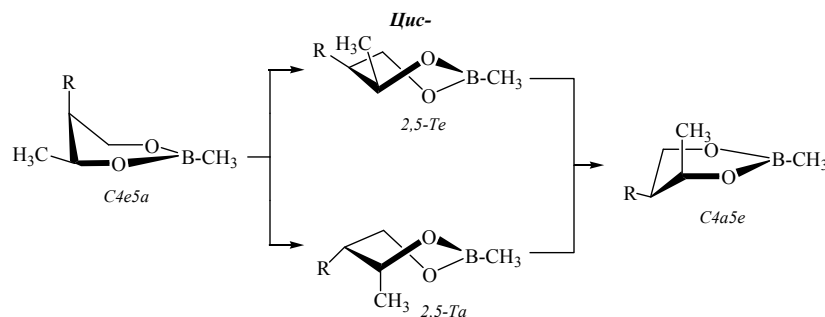
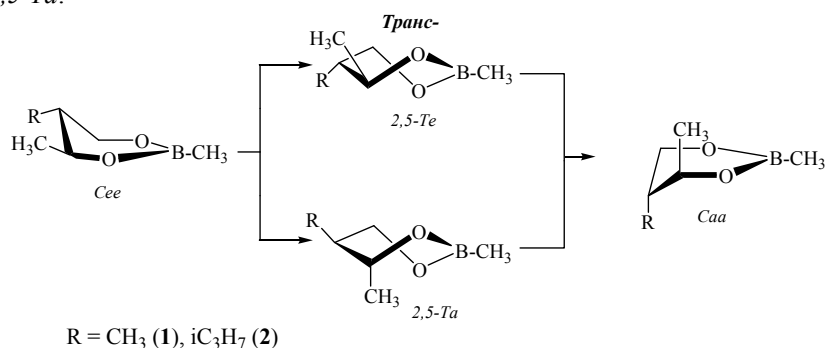
<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН

Целью настоящей работы является теоретическое исследование маршрутов конформационной изомеризации молекул индивидуальных стереоизомеров 2,4,5-триметил- и 2,4-диметил-5-изопропил-1,3,2-диоксаборинанов **1** и **2** с помощью неэмпирических (RHF//STO-3G и 3-21G) методов в рамках пакета HyperChem.



Обнаружено, что конформационная изомеризация молекул *цис*- и *транс*-изомеров эфиров **1** и **2** может проходить по двум маршрутам, включающим переходные состояния 2,5-*Te* и 2,5-*Ta*.



## Относительная стабильность минимумов и максимумов на ППЭ эфиров **1** и **2**

Соединение	Метод расчета	ΔE (ккал/моль)					
		Cee	Caа	C4a5e	C4e5a	2,5-Te	2,5-Ta
1-транс	RHF//STO-3G	0	1.1	-	-	7.0	7.3
	RHF//3-21G	0	0.6	-	-	8.2	8.2
1-цис	RHF//STO-3G	-	-	0	0.1	8.1	9.1
	RHF//3-21G	-	-	0	0.1	9.4	10.4
2-транс	RHF//STO-3G	2.3	0	-	-	6.8	6.1
	RHF//3-21G	3.6	0	-	-	9.1	7.5
2-цис	RHF//STO-3G	-	-	0	2.8	13.3	12.7
	RHF//3-21G	-	-	0	2.0	14.1	13.2

Полученные данные указывают на заметное влияние объема заместителя у атома С-5 кольца на конформационное поведение молекул исследованных соединений и относительную высоту потенциальных барьеров интерконверсии.