

формационные технологии в авиационной и космической технике – 2009». – М.:Изд-во МАИ-ПРИНТ. – 2009. – С. 92.

КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ЭФИРОВ МЕТИЛБОРНОЙ КИСЛОТЫ

Валиахметова О.Ю.¹, Кузнецов В.В.^{1,2}

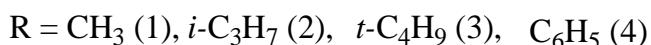
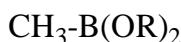
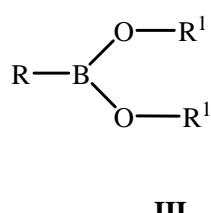
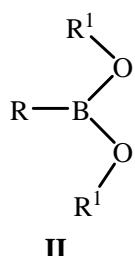
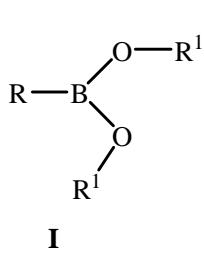
¹Уфимский государственный нефтяной технический университет

²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН
Уфа, Россия

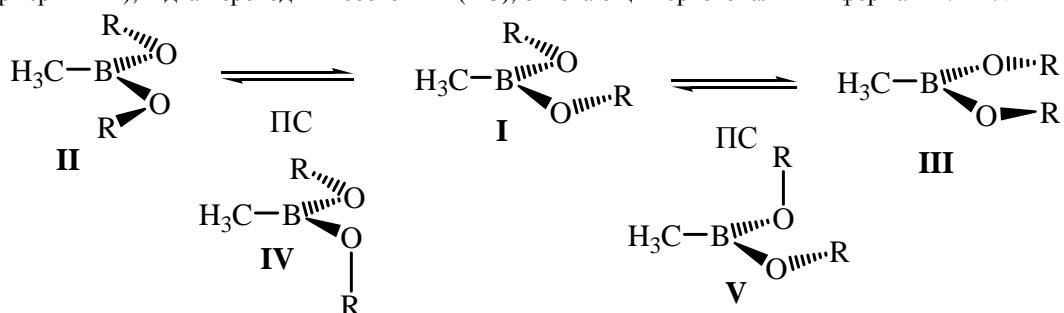
Интерес к монозамещенным борным кислотам и их эфирам связан с особенностями

строения, обусловленными наличием частично двойной B-O связи, и комплексом практически полезных свойств [1-5]. Известно [6], что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) монозамещенных борных кислот и их эфиров содержит в качестве главного минимума планарный *цикло-транс*-конформер (**I**); концентрация менее стабильных планарных форм *транс-транс*- (**II**) и *цикло-цикло*- (**III**) весьма мала.

Настоящая работа посвящена изучению путей конформационной изомеризации эфиров метилборной кислоты, $\text{CH}_3\text{B}(\text{OR})_2$ (**1-4**) с помощью неэмпирических квантово-химических приближений RHF/STO-3G и 3-21G в рамках пакета программ HyperChem [7].



Установлено, что ППЭ исследуемых соединений (кроме эфира **3**) содержит три минимума (конформеры **I-III**), и два переходных состояния (ПС), отвечающих ортогональным формам **IV** и **V**.



Параметры конформационной изомеризации, представленные в таблице, свидетельствуют о том, что главному минимуму на ППЭ отвечает *цикло-транс*-форма **I**. Конформеры **II** и **III** соответствуют локальным минимумам и менее стабильны на 2-8 ккал/моль (ΔE). Наиболее высокий потенциальный барьер конформационной изомеризации (ΔE^\ddagger), вне зависимости от расчетного базиса, лежит на пути превращения формы **I** в конформер **II** и отвечает ортогональной форме **IV**. Величина ΔE^\ddagger близка к экспериментальной величине барьера вращения вокруг связи B-O [8].

Для эфира **3** реализуются только формы **I**, **II** и переходное состояние **IV**. В случае эфира **4** сочетание пространственных и электронных факторов приводит к ортогональной ориентации обеих фенильных групп в конформерах **II** и **III** и одной - в форме **I**. При этом из-за пространственных взаимодействий фрагмент СОВОС в конформере **III** искажен.

Таким образом, анализ конформационных превращений эфиров метилборной кислоты дает основание полагать, что преобладающей формой молекул этих соединений в газовой фазе является *цикло-транс*-конформер **I**.

Таблица 1.

Расчетные энергетические параметры конформационной изомеризации эфиров метилборной кислоты (ккал/моль)

№	Параметры*	RHF/STO-3G	RHF/3-21G
1	$\Delta E_{I,II}$	8.1	4.5
	$\Delta E_{I,III}$	3.7	5.1
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	13.5	10.0
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	12.1	7.4
2	$\Delta E_{I,II}$	4.2	4.6
	$\Delta E_{I,III}$	6.2	3.2
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	10.8	8.2
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	8.7	5.3
3	$\Delta E_{I,II}$	6.7	6.5
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	10.1	9.0
4	$\Delta E_{I,II}$	2.2	3.7
	$\Delta E_{I,III}$	4.6	4.6
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,II}$	12.4	8.5
	$\Delta E^{\ddagger}_{I,III}$	8.9	6.0

*⁾ Относительно конформера I

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Ferrier R.J. Methods in Carbohydrate Chemistry. New York-London, 1972. V.6. P.419.
2. Carlsohn H., Hartmann M. // Acta Polymerica. 1979. V. 30. N 7. P.420.
3. Kliegel W. // Die Pharmazie. 1972. V.27. N 1. P.1.
4. Caujolle F., Chanh P.H., Maciotta J.C. // Agressologie. 1969. V.10. N 2. P.155.
5. Несмеянов А.Н., Соколик Р.А. Методы элементоорганической химии. Бор, алюминий, галлий, индий, таллий. М.: Наука, 1964. 499 с.
6. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Успехи современного естествознания. 2008. № 10. С.57.
7. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
8. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев: Наукова думка, 1988. 160 с.

световым излучением и обычными радиоволнами, оно обладает некоторыми свойствами и света, и радиоволн.

2. Использование СВЧ технологий касается многих отраслей человеческой деятельности, однако в свое время именно СВЧ-радиолокация оказалась эффективным электронным средством раннего обнаружения удаленных объектов противника. Радиоволны СВЧ-диапазона широко применяются в технике связи. Кроме различных радиосистем военного назначения, во всех странах мира имеются многочисленные коммерческие линии СВЧ-связи. Самой распространенной из них является мобильная телефония, современные телекоммуникации и беспроводной Интернет. Система ретрансляционных радиобашен, необходимая для передачи СВЧ-излучения на большие расстояния, может быть построена только на суше. Для межконтинентальной же связи требуется иной способ ретрансляции, основанный на связных искусственных спутниках Земли, выведенных на геостационарную орбиту. Спутники последней межконтинентальной серии «Интелсат» были выведены в различные точки геостационарной орбиты таким образом, что зоны их охвата, перекрываясь, обеспечивают обслуживание абонентов во всем мире. Каждый спутник серии «Интелсат» последних модификаций предоставляет клиентам тысячи каналов высококачественной связи для одновременной передачи телефонных, телевизионных, факсимильных сигналов и цифровых данных.

3. Современные исследования показали возможность воздействия на биологические объекты СВЧ волнами, так называемая КВЧ терапия использует миллиметровые волны для лечения некоторых заболеваний. Создано несколько диагностических комплексов с использованием СВЧ, которые в ряде случаев могут использоваться также и в ветеринарной медицине для предотвращения некоторых видов заболеваний птицы,

СВЧ-ИННОВАЦИИ

Крупенин В.Л.

Учреждение Российской академии наук
Институт машиноведения
им. А. А. Благонравова РАН
Москва, Россия

1. Среди большого числа инновационных предложений последнего времени особую нишу занимают предложения, касающиеся все возрастающей роли использования прорывных СВЧ – технологий. Диапазон сверхвысоких частот (СВЧ) - 100МГц - 300 ГГц. В англоязычных странах этот частотный диапазон называется микроволновым; имеется в виду, что длины волн очень малы по сравнению с длинами волн обычного радиовещания, имеющими порядок нескольких сотен метров. Так как по длине волны излучение СВЧ-диапазона является промежуточным между