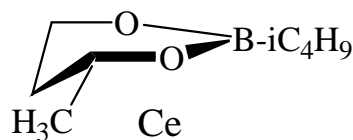
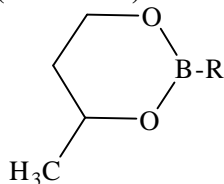
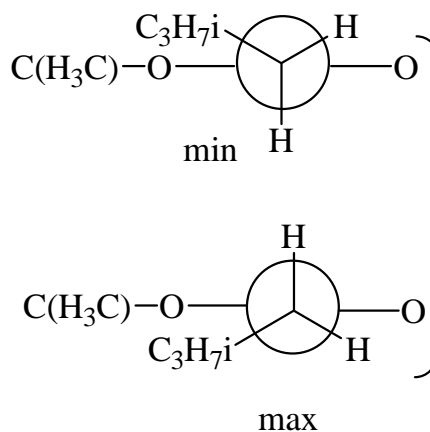
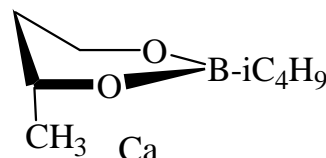


бора (q_B), понижает значение ΔE^\ddagger . Наиболее заметно этот эффект проявляется в случае эфиров **V-VIII** и **XVII**, где он обусловлен эффективным взаимодействием p -электронных пар гетероатомов с вакантной орбиталью бора. Однако в ряде случаев, например для галогензамещенных эфиров **X-XIII**, наблюдаются вторичные эффекты, связанные с увеличением стерического объема заместителя и ослаблением его мезомерного влияния из-за больших различий в энергии взаимодействующих орбиталей [1,2]. Для эфиров **I-III** увеличение размера заместителя у бора приводит к определенному снижению величины потенциального барьера инверсии. Необходимо также отметить отсутствие заметного влияния электронного и стерического характера заместителя R на относительную стабильность форм *Ce* и *Ca*.

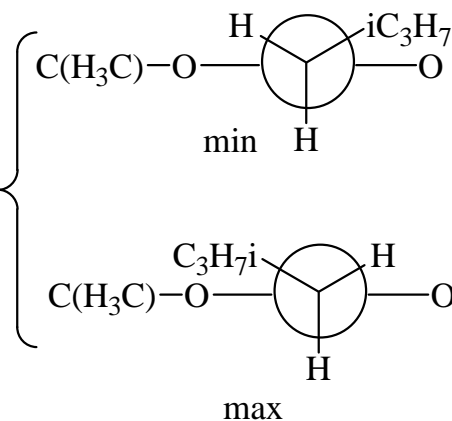
Энергетические параметры инверсии цикла эфиров I-XVIII (ккал/моль)



$\Delta E = 0.3$ ккал/моль



0.2 ккал/моль



В результате расчетов выявлены конформеры вращения, соответствующие нескольким минимумам на ППЭ. Для обеих форм они отличаются на 0.2 ккал/моль. Сами конформеры *Ce* и *Ca* с учетом найденных минимумов различаются между собой на 0.3 ккал/моль в пользу *Ce*. Таким образом, в рамках использованного расчетного приближения объемный заместитель у атома бора может оказывать существенное влияние на относительную стабильность конформеров *софы*; этот фактор необходимо учитывать при проведении конформационных расчетов таких молекул.

[1] HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев: Наукова думка, 1988. – 160 с.
2. Кузнецов В.В. Автореф. дисс. докт. хим. наук. Уфа, 2002. – 47 с.
3. Rossi K., Pihlaya K. // Acta Chem. Scand. – 1985. – V. B 39, N 8. – P.671.
4. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВНУТРЕННЕГО ВРАЩЕНИЯ ИЗОБУТИЛЬНОЙ ГРУППЫ В 2-ИЗОБУТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНЕ

Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В.
Уфимский государственный нефтяной
технический университет

С целью учета влияния объемного заместителя у атома бора на относительную стабильность конформеров экваториальной (*Ce*) и аксиальной (*Ca*) *софы*, отвечающих минимумам на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), нами в рамках пакета HyperChem [1] методом Хартри-Фока в приближении AM1 исследована энергия внутреннего вращения изобутильной группы в 2-изобутил-4-метил-1,3,2-диоксаборинане.

ВЗАИМОСВЯЗЬ СТРУКТУРЫ И ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИАРИЛАТА

Долбин И.В., Буря А.И., Козлов Г.В.
Научно-исследовательский институт прикладной
математики и автоматизации КБНЦ РАН,
Днепропетровский государственный
аграрный университет

В настоящее время известно большое число кинетических уравнений для описания данных термogravиметрического анализа (ТГА). Однако все указанные модели не учитывают структуру полимерного