

8. В бесконтурном графе есть единственная вершина контр база, состоящая из всех его выходящих вершин.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА 2-ИЗОПРОПИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА

¹Брусилковский Ю.Э., ^{2,3}Кузнецов В.В.

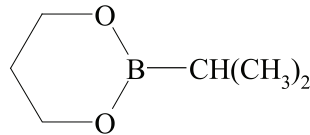
¹Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины, Одесса;

²Уфимский государственный авиационный технический университет;

³Уфимский государственный нефтяной технический университет, e-mail: kuzmaggy@mail.ru

Интерес к структурным исследованиям шестичленных циклических эфиров борных кислот связан как с особенностями их строения, так и с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1-6]. Ранее [7, 8] были выявлены основные колеба-

тельные частоты в ИК и КР спектрах замещенных 1,3,2-диоксаборинанов. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование колебательного спектра 2-изопропил-1,3,2-диоксаборинана (I) с помощью неэмпирического квантово-химического приближения HF/6-31G(d) в рамках программного обеспечения HyperChem [9].



I

Исследовались колебательные частоты, связанные с гетероатомным фрагментом кольца. Все они принадлежат к так называемой области «отпечатков пальцев» молекулы. Полученные результаты представлены в таблице.

Основные колебательные частоты соединения I

Частота, см ⁻¹	Интенсивность, %	Отнесение	Частоты из экспериментальных ИК и КР спектров, см ⁻¹ [8]
671	11	Внеплоскостные деформационные колебания фрагмента СВО ₂ (δ СВО ₂)	673 (ср), ИК
713	4	Симметричные валентные колебания ВО ₂ (ν _s ВО ₂)	732 (с), КР; 730 (о. сл), ИК
1201	36	Смешанные колебания фрагмента СОВС	1203 (с), ИК
1221	15	Смешанные колебания фрагмента (СО) ₂ ВС	1220 (сл), ИК
1238	100	Смешанные колебания фрагмента СС ₂ О ₂ ВС	1230 (сл), ИК
1274	66	Смешанные колебания фрагмента СОВОС	1270 (с), ИК
1346	91	Валентные колебания ВС (ν В-С)	1337 (с), ИК
1427	38	Асимметричные валентные колебания ВО ₂ (ν _{ас} ВО ₂)	1420 (с), ИК

Примечание: с – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая, о.сл. – очень слабая.

При определении расчетных колебательных мод использовалась процедура масштабирования с коэффициентом 0.8953, соответствующим уровню теории HF/6-31G(d) [10].

Выявленные моды свидетельствуют о заметном вкладе смешанных колебаний, в которых участвуют фрагменты гетероциклического кольца, в общий спектр. При этом для колебаний ν_s ВО₂ (КР) и δ СВО₂ (ИК) наблюдается хорошее соответствие расчетных и экспериментальных значений частот. Вместе с тем установлены и существенные расхождения с прежними отношениями колебаний в ИК спектре соединения I. Так, значение частоты ν В-С на основании данных литературы относилось к полосе при 1203 см⁻¹ [8], однако согласно результатам моделирования эта полоса отвечает смешанным колебаниям фрагмента СОВС (валентным и деформационным), а колебания ν В-С в экспериментальном ИК спектре проявляются в более высокочастотной области в виде интенсивной полосы при 1337 см⁻¹. Помимо этого асимметричным валентным колебаниям

ν_{ас} ВО₂ отвечает полоса не при 1327 см⁻¹ [8], а при 1420 см⁻¹.

Рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой 1,3,2-диоксаборинанового кольца и могут быть использованы для идентификации и подтверждения структуры соединений этого класса.

Список литературы

- Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. – Киев: Наукова думка, 1988. – 160 с.
- Кузнецов В.В. // Изв. РАН. Сер. хим. – 2005. – № 7. – С. 1499.
- Кузнецов В.В. Успехи органического катализа и химии гетероциклов. – М.: Химия, 2006. – С. 336.
- Bhat N.G., Caga-Anan Z., Leija R. // Tetrahedron Lett. – 2005. – Vol. 46, № 31. – P. 5109.
- Marciniak B., Jankowska M., Pietranzuk C. // Chem. Commun. – 2005. – № 5. – P. 663.
- Murata M., Oda T., Watanabe S., Masuda J. // Synthesis. – 2007. – № 3. – P. 351.
- Кузнецов В.В., Грень А.И. // Докл. АН УССР. Сер. Б. – 1984. – № 7. – С. 39.
- Кузнецов В.В., Алексеенко Л.И., Стайков А.И., Грень А.И. // Укр. хим. ж. – 1988. – Т. 54, № 12. – С. 1315.
- HyperChem 7.01. Trial version. – www.hyper.com.
- Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem. – 1996. – Vol. 100, №41. – P. 16502.