дельности. Поэтому нужны дополнительные предположения. Мы воспользовались зависимостью между энергией связи и ее длиной [2]. При малых изменениях в энергиях связей одного и того же типа эта зависимость должна быть линейной. Мы полагаем

$$\varepsilon_{\mathbf{C}_{i}-\mathbf{C}_{i}} = A + Br_{\mathbf{C}_{i}-\mathbf{C}_{i}}, \ \varepsilon_{\mathbf{C}_{i}-\mathbf{H}} = a + br_{\mathbf{C}_{i}-\mathbf{H}}. \tag{4}$$

Подставляя (4) в (3), будем иметь

$$E_{ij} = A + Br_{C_i - C_i} + [(4-i)/i](a + br_{C_i - H}) + [(4-j)/j](a + br_{C_i - H}).$$
 (5)

Получаем систему (5) из 10 уравнений с четырьмя неизвестными A, B, a, b, которые (если длины связей известны) можно определить (МНК), а по ним согласно (4) найти и энергии связей отдельных видов.

- 1. *Татевский В.М., Папулов Ю.Г.* //Журн. физ. химии. 1960. Т. 34, № 2. С. 241-258.
- 2. Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Физические свойства и химическое строение. Калинин: КГУ, 1981. 88 с.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект10-03-97500-рЦентр-а)

## МЕТАЛЛО(II)ХЕЛАТЫ 2,4-ДИОКСОКАРБОКСИЛАТОВ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА

Кириллова Е.А., Виноградов А.Н., Муковоз П.П., Карманова О.Г., Крохин И.П.  $^{(1)}$ , Козьминых В.О.  $^{(1)}$ 

Оренбургский государственный университет 460018, г. Оренбург, пр. Победы, д. 13

(1) Пермский государственный педагогический университет, 614990, г. Пермь, ул. Сибирская, 24

Химия металлокомплексов поликарбонильных систем с сочленёнными 1,3- и 1,2-диоксозвеньями — перспективная область исследования [1]. Реакцией металлообмена в водных растворах с солями металлов(II) натриевых енолятов эфиров 2,4-диоксокарбоновых (4-оксопроизводных 2-гидрокси-2-алкеновых кислот) LNa 1, синтезированных конденсацией Клайзена метиленкарбонильных соединений (соответствующих метилкетонов или алкилацетатов) с диэтилоксалатом в присутствии оснований — натрия или гидрида натрия, нами получены активированные сложноэфирным акцептором O,O'-координированные металл-1,3-дикетонатные комплексы — металло(II)хелаты  $L_2$ Met 2 на основе оксоалкеноатных бидентатных лигандов. Обсуждаются особенности строения синтезированных  $\beta$ -дикетонатов, приведены данные о получении, строении и свойствах металлопроизводных функционализо-

ванных 1,3-дикарбонильных анионов. В структуре кадмиевых хелатов обнаружена пятичленная координация сложноэфирной карбонильной группы с атомом металла 3, Met(II) = Cd. Подтверждена симметрия лигандных звеньев в молекулах комплексов 2 и обсуждаются альтернативные структуры соединений  $L_2HMetAn$  4 и солей  $(LH)_2MetAn_2$  5. Подробно изучаются магнитные свойства полученных комплексов 2.

1. Козьминых В.О., Кириллова Е.А., Щербаков Ю.В., Муковоз П.П., Виноградов А.Н., Карманова О.Г., Козьминых Е.Н. Металлопроизводные р- $\pi$ -электроноизбыточных поликарбонильных систем с сочленёнными  $\alpha$ - и  $\beta$ -диоксофрагментами. Сообщение 1. Обзор литературы // Вестник Оренбургского гос. ун-та. Оренбург, сентябрь 2008. Вып. 9 (91). С. 185-198. — http://vestnik.osu.ru/2008\_9/31.pdf

Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по образованию РФ на 2009-2010 гг., проект № 1.3.09.