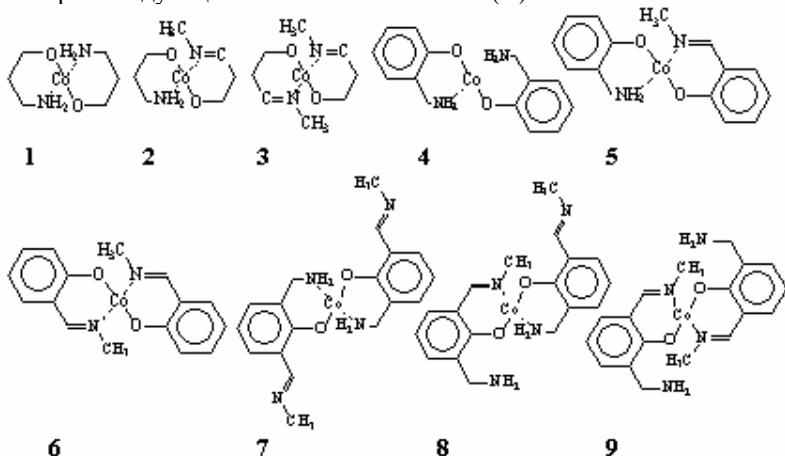


КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ
КОБАЛЬТА(II) С СОЕДИНЕНИЯМИ, СОДЕРЖАЩИМИ
АМИНОМЕТИЛЬНУЮ И ИМИННУЮ ГРУППЫ

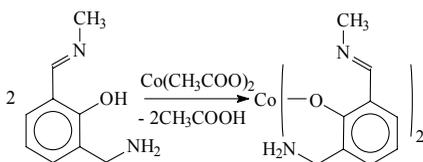
Махмутова Р.И., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Тимофеев В.П.

Башкирский государственный университет, Уфа

В неэмпирическом приближении UHF/3-21G(d) изучена равновесная геометрия следующих комплексов кобальта (II):



Указанные комплексы имеют строение близкое к тетраэдрическому, кобальт (II) является 4-х координированным и взаимодействует с кислородом, а так же с аминотимильной и иминной группами в зависимости от комплекса. Рассмотрены реакции комплексообразования по указанной схеме и рассчитаны полные энергии этих реакций.



Показано, что наличие ароматических колец в комплексах 4, 5

и 6 приводит к уменьшению энергии по сравнению с 1, 2 и 3 на 89 кДж/моль, 104 кДж/моль и 108 кДж/моль соответственно. При исследовании влияния аминотимильной и иминной групп найдено, что в комплексах 1, 2 и 3 замена аминотимильной группы на иминную дает разницу полных энергий около 10 кДж/моль. В свою очередь, в комплексах 4, 5 и 6 разница составляет 25 кДж/моль в случае 4 и 5, и 15 кДж/моль в случае 5 и 6.

Введение обеих групп приводит к разнице полных энергий в 4 кДж/моль для комплексов **4** и **7**, 7 кДж/моль для **5** и **8**, и обратную в 2 кДж/моль для **6** и **9**.

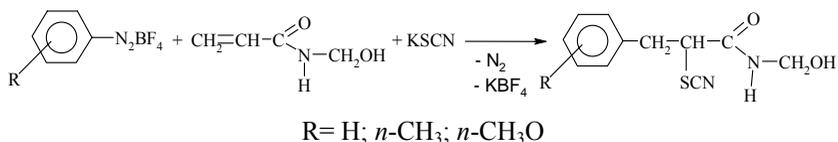
**ИССЛЕДОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
ТЕТРАФТОРБОРАТОВАРИЛДИАЗОНИЯ С N-
ГИДРОКСИМЕТИЛАКРИЛАМИДОМ В ПРИСУТСТВИИ
ТИОЦИАНАТА КАЛИЯ**

Петрушка Б.М.¹, Горбовой П.П.²

¹ Тернопольский национальный педагогический университет

² Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко

Объектом нашего [1] сообщения является исследование реакции тетрафторборатоварилдiazония с N-гидроксиметилакриламидом в присутствии роданид-аниона, продуктами которой являются функционализированные аралкильные производные тиоцианатов, которые могут представлять значительный интерес как биологически активные вещества.



Реакция происходит как в присутствии (-40÷-35⁰C), так и в отсутствии (-10÷-5⁰C) катализатора – солей меди или железа. Идентифицированы побочные продукты исследуемой реакции.

Установлено, что одним из основных побочных продуктов реакции является фенилизотиоцианат. Показано, что в отсутствие катализатора выходы целевых продуктов значительно уменьшаются, а выходы арилизоцианатов возрастают. Кроме того, образуется значительное количество смолообразных веществ неуставленного строения.

Строение синтезированных соединений N-гидроксиметиламидов-α-тиоцианато-β-арилпропионовых кислот, выходы которых составляют 52-76% доказано ИК- и ПМР-спектроскопией, а также данными элементного анализа.

1. Б.Д. Гришук, П.М. Горбовой, Н.И. Ганущак, А.В. Домбровский. Реакции ароматических солей diaзония с непредельными соединениями в присутствии нуклеофилов. //Успехи химии. Т. 63. № 3. 1994. с. 269-279.