

РАССМОТРЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ АТОМОВ В СОЕДИНЕНИЯХ, УЧАСТВУЮЩИХ В ПЕРЕГРУППИРОВКЕ БОУЛТОНА – КАТРИЦКОГО ПРИ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЯХ

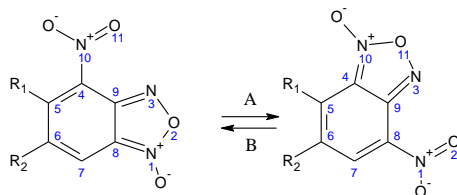
Мацак К.Л., Рыбин Т.В.

Челябинский государственный университет

454021, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, д. 129

E-mail: motiphey@mail.ru

Своеобразие химии фуроксанов тесно связано с их строением. Поэтому следует расширять знания о геометрическом и электронном строении таких соединений в рамках квантовохимических приближений. Ранее [1] было установлено, что в исходных и конечных соединениях перегруппировки Боултона – Катрицкого (на схеме) различаются характеристики колебаний атома N₃ фуроксанового кольца. В исходных соединениях частоты и интенсивности этих колебаний выше.



№ реакции	R ₁	R ₂
1 _{исходное}	CH ₃	H
1 _{конечное}	CH ₃	H
2 _{исходное}	OCH ₃	H
2 _{конечное}	OCH ₃	H
3 _{исходное}	N(H)COOCH ₃	NO ₂
3 _{конечное}	N(H)COOCH ₃	NO ₂
4 _{исходное}	N(H)C ₆ H ₅	H
4 _{конечное}	N(H)C ₆ H ₅	H

В связи с этим было решено произвести более детальное изучение данных колебаний. В качестве объектов исследования выбраны четыре пары соединений класса бензофулоксанов, соответственно по два примера прямой (А) и обратной (В) перегруппировки:

Были рассмотрены изменения параметров атомов N₃, O₂ и O₁₁, колебания которых предположительно в наибольшей степени способствуют перегруппировке.

В рамках методов квантовой химии были визуально определены структуры молекул, соответствующие различным амплитудам (0,5; 1; 2)

данных колебаний. Использовались две точки, соответствующие «дальному» и «ближнему» положению атомов. Под «дальним» и «ближним» положениями понимается сближение и отдаление атомов N₃ и кислорода свободной группы. Таким образом, получили набор из семи точек (обобщённые координаты колебания). Рассчитали заряды и заселённости (по Малликену и по Бейдеру) атомов N₃, O₂ и O₁₁ для всех полученных структур. Построили графики изменения этих параметров в ходе колебания.

Обнаружили, что заряд на кислороде свободной группы в ходе колебания в исходном соединении всегда увеличивается, а в конечном – уменьшается. Что согласуется с тем фактом, что при перегруппировке данный атом становится частью фуруксанового кольца и его заряд повышается.

1. Рыбин Т.В., Мацак К.Л., Белик А.В.. Особенности нормальных колебаний атомов соединений, участвующих в перегруппировке Боултона–Катрицкого // IV Молодёжная конференция ИОХ РАН: Сборник тезисов докладов. 11-12 ноября 2010 г. – М., 2010. – с.160-161.

**ИССЛЕДОВАНИЕ АМИНОАЛКИЛИРОВАННЫХ
КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ В КАЧЕСТВЕ
МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ РЕЦЕПТОРОВ В РЕАКЦИИ
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С ГИДРАЗИДАМИ
ФОСФОРИЛУКСУСНЫХ КИСЛОТ И ИХ ПРОИЗВОДНЫМИ**

*Мушлайкина Л.А.⁽¹⁾, Петрова А.В.⁽¹⁾, Сайфутдинова М.Н.⁽¹⁾,
Шаталова Н.И.⁽¹⁾, Гаврилова Е.Л.⁽¹⁾, Тарасова Р.И.⁽¹⁾,
Пашина И.П.⁽²⁾, Семина И.И.⁽²⁾*

⁽¹⁾ Казанский государственный технологический университет
420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68

⁽²⁾ Казанский государственный медицинский университет
420012, г. Казань, ул. Бутлерова, д. 49

Аминосодержащие каликс[4]резорцины привлекают все большее внимание в последнее время. Наиболее простым и удобным методом введения аминотетильного фрагмента в готовую каликсареновую матрицу является реакция Манниха [1]: