

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

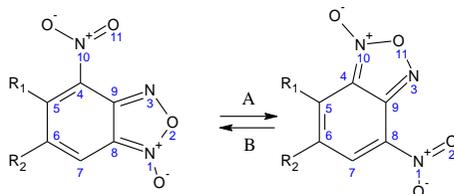
*Мацак К.Л., Рыбин Т.В.*

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 N<sub>3</sub> фуроксанового кольца. В исходных соединениях частоты и интенсивности этих колебаний выше.



№ реакции	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>
1 <sub>исходное</sub>	CH <sub>3</sub>	H
1 <sub>конечное</sub>	CH <sub>3</sub>	H
2 <sub>исходное</sub>	OCH <sub>3</sub>	H
2 <sub>конечное</sub>	OCH <sub>3</sub>	H
3 <sub>исходное</sub>	N(H)COOCH <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>
3 <sub>конечное</sub>	N(H)COOCH <sub>3</sub>	NO <sub>2</sub>
4 <sub>исходное</sub>	N(H)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H
4 <sub>конечное</sub>	N(H)C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	H

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

Были рассмотрены изменения параметров атомов N<sub>3</sub>, O<sub>2</sub> и O<sub>11</sub>, 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 N<sub>3</sub> и кислорода свободной группы. Таким образом, получили набор из семи точек (обобщённые координаты колебания). Рассчитали заряды и заселённости (по Малликену и по Бейдеру) атомов N<sub>3</sub>, O<sub>2</sub> и O<sub>11</sub> 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.<sup>(1)</sup>, Петрова А.В.<sup>(1)</sup>, Сайфутдинова М.Н.<sup>(1)</sup>,  
Шаталова Н.И.<sup>(1)</sup>, Гаврилова Е.Л.<sup>(1)</sup>, Тарасова Р.И.<sup>(1)</sup>,  
Пашина И.П.<sup>(2)</sup>, Семина И.И.<sup>(2)</sup>*

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

<sup>(2)</sup> 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]: