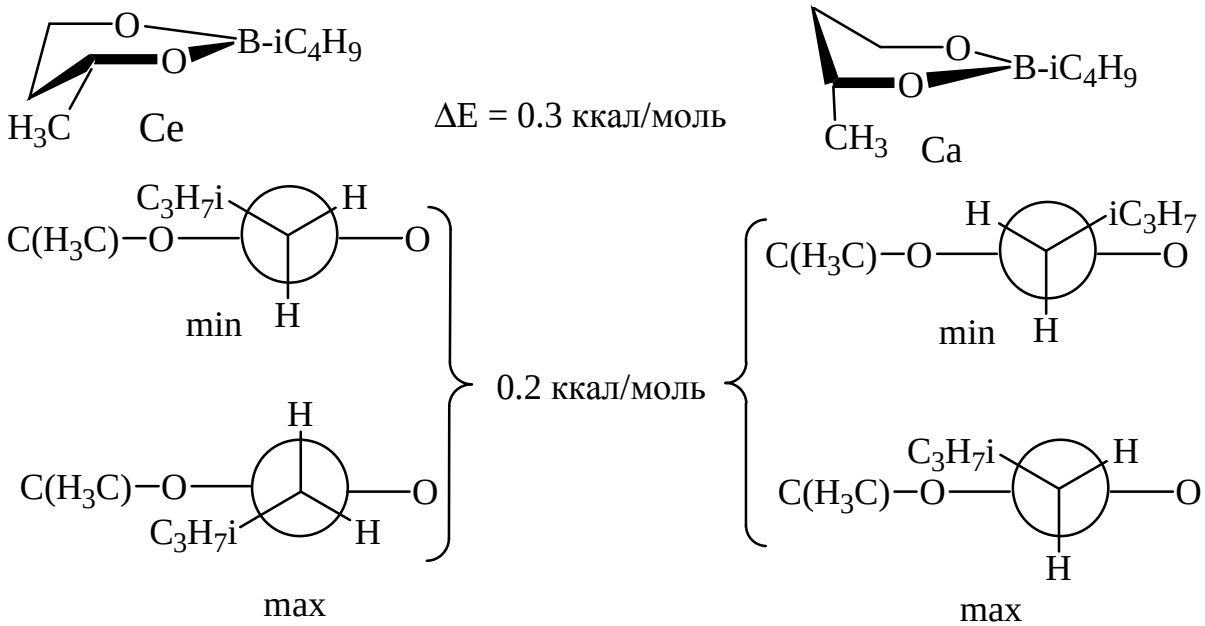
Компьютерное моделирование внутреннего вращения изобутильной группы в 2-изобутил-1,3,2-диоксаборинане

О.Ю. Валиахметова, С.А. Бочкор, В.В. Кузнецов

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

С целью учета влияния объемного заместителя у атома бора на относительную стабильность конформеров экваториальной (Ce) и аксиальной (Ca) *софы*, отвечающих минимумам на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), нами в рамках пакета HyperChem [1] методом Хартри-Фока в приближении AM1 исследована энергия внутреннего вращения изобутильной группы в 2-изобутил-4-метил-1,3,2-диоксаборинане.



В результате расчетов выявлены конформеры вращения, соответствующие нескольким минимумам на ППЭ. Для обеих форм они отличаются на 0.2 ккал/моль. Сами конформеры Ce и Ca с учетом найденных минимумов различаются между собой на 0.3 ккал/моль в пользу Ce. Таким образом, в рамках использованного расчетного приближения объемный заместитель у атома бора может оказывать существенное влияние на относительную стабильность конформеров *софы;* этот фактор необходимо учитывать при проведении конформационных расчетов таких молекул.

[1] HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.