Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации

Уральский государственный университет им. А.М. Горького

# ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ХИМИИ

Тезисы докладов
VII Всероссийской студенческой научной конференции
16 - 18 апреля 1997 года

Екатеринбург
1997

других стереоизомеров циклододецена и 1,5,9-циклододекатриена.

Хотя в некоторых случаях выходы этих аддуктов умеренные, тем не менее этот способ может служить в качестве препаративного метода для синтеза указанных труднодоступных гетероциклических соединений, которые широко применяются в качестве антигельминтина, инсектицида, антиоксиданта для смазочных масел, а также в медицине.

Полученные соединения охарактеризованы с помощью элементного анализа, ЯМР и ИК- спектроскопии, масс-спектрометрии и переданы на биологические испытания.

## КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНОГО СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ РЯДА АЛИФАТИЧЕСКИХ АМИНОВ

М.А. Мощевитин, И.Б. Широбоков, М.А. Плетнев
Удмуртский государственный университет, Ижевск

Амины алифатического ряда и их производные являются эффективными ингибиторами процесса коррозии в кислых и слабокислых средах. В ингибировании важную роль играют как нейтральные молекулы аминов, так и их протонированные формы. Для понимания причин ингибирующего действия этих соединений важно установление их молекулярной и ионной структур. Одним из методов установления структуры является её квантовохимический расчёт. В данной работе с использованием полуэмпирических методов CNDO/2, INDO, MIFNDO/3, MNDO рассчитано строение метиламина, диметиламина, триметиламина, катионов аммония и тетраметиламмония.

В ходе работы были рассчитаны геометрические (длины связей, взаимные углы), энергетические характеристики указанных соединений (энергия образования молекул, энергия межъядерного взаимодействия, теплота образования и т.д.) и показана их зависимость от строения молекул.

Сравнивая результаты, можно показать следующее :

1. С увеличением числа метильных групп в молекуле амина по методам CNDO, INDO, MINDO/3 происходит увеличение частичного заряда атома азота N (с -0,170 а.е. до -0,127 а.е. для метода CNDO, с -0,204 а.е. до -0,154 а.е. для метода INDO и с -0,161 а.е. до -0,142 а.е. для метода MINDO/3), тогда как при расчете методом MNDO – дальнейшее уменьшение заряда (с -0,283 а.е. до -0,437 а.е.). Теоретически при появлении более электроположительных заместителей в молекуле ($ЭО_C$=2,5; $ЭО_N$=3,0), должно происходить уменьшение частичного заряда на остальных атомах в молекуле вследствие электронейтральности

молекулы в целом. Следовательно, результаты, полученные методом MNDO, наиболее полно соответствуют эксперименту.

2. Изменяются частичные заряды на атоме углерода. Однако изменение последнего (его увеличение) наблюдается только при расчетах методами CNDO и MNDO, тогда как по результатам методов INDO и MINDO/3 этого не происходит (частичный заряд не изменяется).

3. На атомах водорода частичный заряд, рассчитанный всеми четырьмя методами, немного увеличивается, что также соответствует литературным данным.

4. Расстояние C—N в молекулах аминов алифатического ряда постепенно увеличивается вследствие увеличения силы взаимного отталкивания атомов и составляет величины приблизительно 1,430 - 1,540 ангстрем.

5. С увеличением числа метильных групп в исследуемом ряде аминов монотонно уменьшается энергия систем. Исключением из этого правила является теплота образования, где наблюдается обратная зависимость.

В целом можно сказать, что методами INDO и MNDO получены результаты, наиболее точно соответствующие литературным данным.

## РЕАКЦИЯ СЕРНОГО АНГИДРИДА С ОКСИРАНАМИ И ТИИРАНАМИ

А.М. Магеррамов, Г.М. Мирбагирова, З.И. Ахмедова,
М.А. Аллахвердиев, Р.М. Махмудова, К.И. Алиева
Бакинский государственный университет

В литературе имеются довольно многочисленные примеры о способности серного ангидрида внедряться по поляризованным (X-Y) и неполяризованным (X-X) связям, но однако, отсутствуют сведения о реакциях с оксиранами и тииранами.

С этой целью нами были изучены реакции оксиранов и тииранов с серным ангидридом. В качестве модельных субстратов были использованы окись пропилена, 1,2-эпокси-3-хлорпропан, 1,2-эпокси-E,Z-циклододецен-5,9-ен и эпитиопропан, 1,2-эпитио-3-хлорпропан (ЭТХП), 1,2-эпитио-фенилпропан и т.д. В результате поиска оптимальных условий мы нашли, что реакцию наиболее удобно проводить добавлением раствора оксирана (или тиирана) в хлористом метилене к раствору серного ангидрида в этом же растворителе при - 55-60°C. Во всех случаях реакции завершались в течение 20-30 минут. Полученные реакционные смеси разделяли хроматографированием на силикагеле. При этом во