

6. Седельников А.В. Проблема микроускорений: 30 лет поиска решения // Современные наукоемкие технологии. – 2005. – № 4. – С. 15-22.

7. Седельников А.В., Корунтеева С.С., Подлеснова Д.П. Фрактальная модель микроускорений: оценка и эксперименты на космической станции «Скайлаб» // Труды 8-й Международной конференции "Актуальные проблемы современной науки". Естественные науки. Часть 3. Механика Машиностроение. – 2007. – С. 105-108.

8. Седельников А.В., Подлеснова Д.П. Космический аппарат «Спот-4» как пример успешной борьбы с квазистатической компонентой микроускорений // Известия высших учебных заведений. Северокавказский регион. – 2007. – № 4 (140). – С. 44-46.

9. Казарина М.И., Седельников А.В., Серпухова А.А. Исследование адекватности физической модели микроускорений // Тезисы докладов второй Всероссийской конференции учёных, молодых специалистов и студентов «Информационные технологии в авиационной и космической технике – 2009». – М.:Изд-во МАИ-ПРИНТ. – 2009. – С. 92.

10. Седельников А.В., Бязина А.В., Иванова С.А. Статистические исследования микроускорений при наличии слабого демпфирования колебаний упругих элементов КА // Научные чтения в Самарском филиале РАО. – Часть 1. Естествознание. – М.: Изд. УРАО. – 2003. – С. 137-158.

11. Седельников А.В. К вопросу выбора обобщённого параметра упругих конструкций космического аппарата для построения фрактальной модели микроускорений // Изв. вузов. Авиационная техника. – 2008. – № 1. – С. 63-65.

12. Sedelnikov A.V., Koruntjeva S.S. Fractal model of microaccelerations: research of qualitative connection // European journal of natural history. – 2007. – №5. – P. 73-75.

13. Седельников А.В. Статистические исследования микроускорений как случайной величины // Фундаментальные исследования. – 2004. – № 6. – С. 123-124.

КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА 2,5-ДИМЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА В ВОДНОМ КЛАСТЕРЕ

Валиахметова О.Ю.¹, Кузнецов В.В.^{1,2}

¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет,

²Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН,
Уфа, Россия

Известно, что циклические эфиры борных кислот способны к формированию молекулярных комплексов как с донорами, так и с акцепторами электронной пары и, таким образом, являются удобными объектами в компьютерном моделировании механизмов взаимодействия субстрата с растворителями различной природы [1-5]. Ранее [6] было показано, что главным минимумом на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) 2,5-диметил-1,3,2-диоксаборинана (**I**) является конформер экваториальной *софы* (*Se*), локальный минимум соответствует форме аксиальной *софы* (*Sa*), а переходное состояние – конформации 2,5-*твист* (2,5-*T*).

Настоящая работа посвящена исследованию конформационной изомеризации молекул эфира **I** в кластере из 39 молекул воды с помощью полупериодического приближения РМЗ в рамках программного обеспечения HyperChem [7].

Исследуемый кластер был сформирован последовательным добавлением молекул воды к эфиру-**I** таким образом, чтобы возникала водородная связь вода-боринан либо вода-вода; при этом одна из молекул воды образует координационную связь O→B. После прибавления очередной молекулы воды проводилась минимизация энергии полученной системы. Общий вид кластера для основного минимума (конформер *Se*) показан на схеме. Пунктирными линиями обозначены водородные связи.

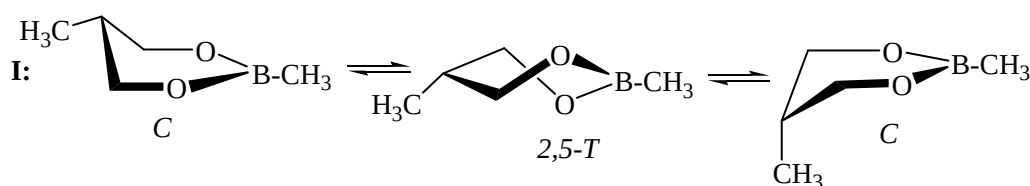


Рис. 1.

I • 39 H₂O

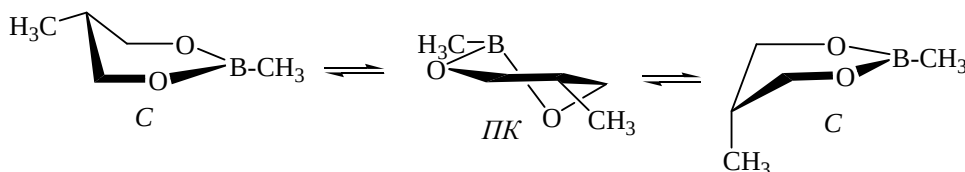


Рис. 2.

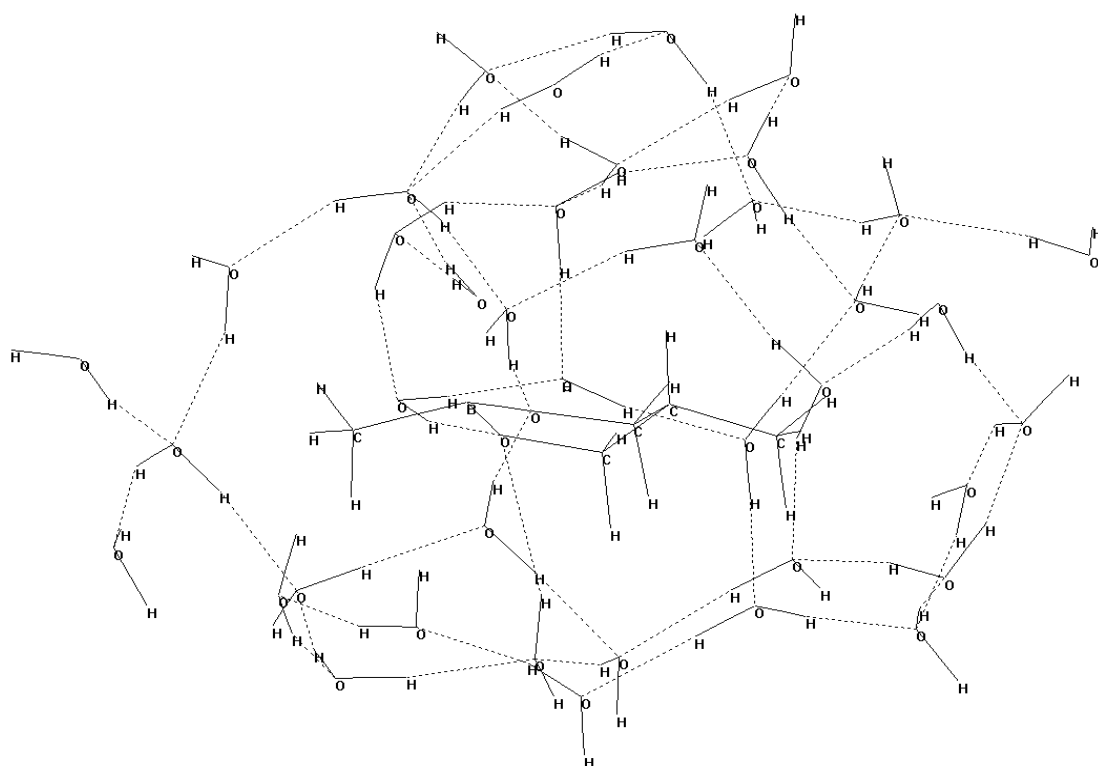


Рис. 3.

Нами установлено, что конформационное поведение соединения **I** в водном кластере, также как и в разряженной газовой фазе, содержит 2 минимума и одно переходное состояние (ПС) – полу-

кресло; их относительные энергии в сравнении с данными для изолированного борного эфира **I** представлены в таблице.

Таблица 1. Минимумы на ППЭ диоксана **I** и его водного кластера (ккал/моль)*

Соединение	<i>Ca</i>	ПС
Эфир- I	0.8	3.5
Кластер: эфир- I · 39 H ₂ O	1.8	4.1

* Относительно формы *Se*

Полученные результаты свидетельствуют о заметном возрастании различий между главным и локальными минимумами в случае кластера (примерно в 2.3 раза). Второй особенностью конформационной изомеризации борного эфира-**I** в окружении воды является изменение характера ПС (*полукресло* вместо формы 2,5-*T*) и увеличение барьера инверсии примерно в 1.2 раза. Координационная связь O→B сохраняется во всех формах; ее длина в конформерах *Se*, *Ca* и *ПК* составляет 1.5708, 1.5757 и 1.5756 Å соответственно, а средняя длина водородной связи молекул воды с гетероатомами кислорода равна 1.803 Å.

Таким образом, моделирование конформационной изомеризации 2,5-диметил-1,3,2-диоксaborинана в кластере, сформированном из 39 молекул воды, выявило заметное влияние растворителя на конформационные свойства этого соединения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Современные проблемы физики и физико-математического образования. Материалы V Уральской региональной научн.-практ. конф. Уфа: БГПУ, 2006. С. 123.
2. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // XIII Всероссийская конф. «Структура и динамика молекулярных систем». Яльчик-2006. Сб. статей. Вып. 13. Ч.I. Уфа – Казань – Москва – Йошкар-Ола. 2006. С. 163.
3. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Фундаментальные исследования. 2006. № 4. С. 81.
4. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Журн. общ. химии. 2009. Т.79, вып.3. С.396.
5. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии. 2009. Т.45, вып.5. С.796.

6. Кузнецов В.В., Новиков А.Н., Рублев И.С., Марколенко П.Ю. // Химия гетероцикл. соединений. 2003. № 3. С.426.

7. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.

КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ 5-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА В ВОДНОМ КЛАСТЕРЕ

Курамшина А.Е.,¹ Кузнецов В.В.^{1,2}

¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет,

²Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН,
Уфа, Россия

Интерес к структурным исследованиям 1,3-диоксанов связан как с особенностями их строения, так и с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1-4]. Ранее [5] было показано, что главным минимумом на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) 5-метил-1,3-диоксана (**I**) является конформер экваториального кресла (*Ke*), а локальные миниму-

мы соответствуют формам аксиального кресла (*Ka*), 1,4-твист- (1,4-*T*), и 2,5-твист- (2,5-*T*). Настоящая работа посвящена исследованию конформационной изомеризации молекул 1,3-диоксана **I** в кластере из 39 молекул воды с помощью полуэмпирического приближения PM3 в рамках программного обеспечения HyperChem [6].

Исследуемый кластер был сформирован последовательным добавлением молекул воды к диоксану-**I** таким образом, чтобы возникала водородная связь вода-диоксан либо вода-вода. После каждого прибавления очередной молекулы воды проводилась минимизация энергии полученной системы. Общий вид кластера для основного минимума (1,3-диоксан в конформации *Ke*) представлен на схеме. Пунктирными линиями обозначены водородные связи.

Нами установлено, что конформационное поведение соединения **I** в водном кластере, также как и в разряженной газовой фазе, содержит 4 минимума; их относительные энергии в сравнении с данными для изолированного диоксана **I** представлены в таблице.

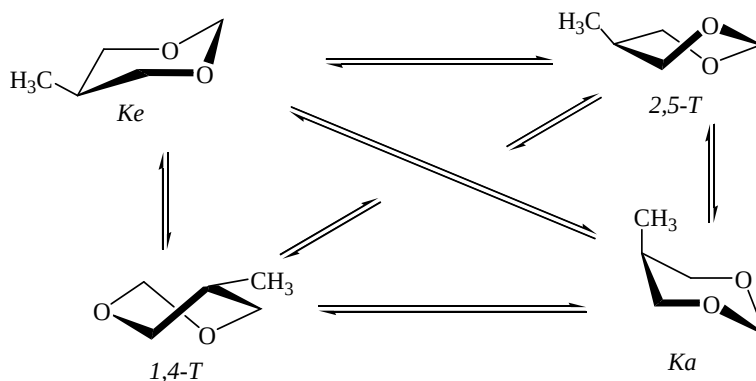


Рис. 1.

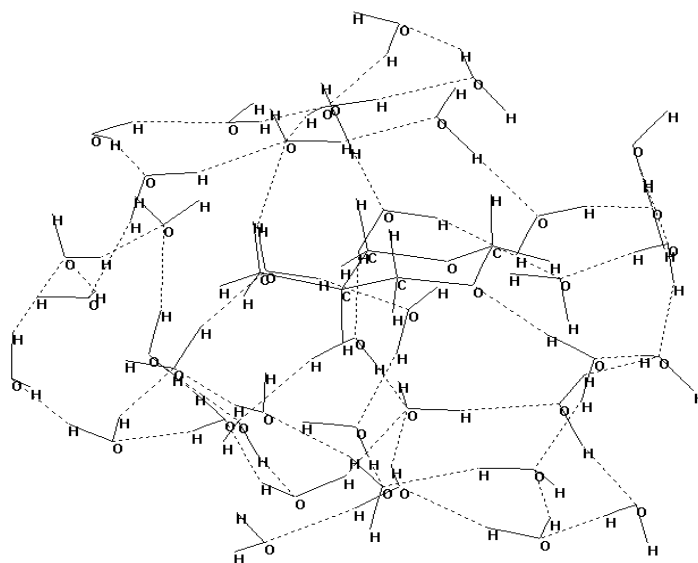


Рис. 2.