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]

[1]Уфимский государственный нефтяной технический университет,

[2]Институт 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* (*Ке*), а локальные минимумы соответствуют формам аксиального *кресла* (*Ка*), *1,4-твист-* (*1,4-Т*), и *2,5-твист-* (*2,5-Т*). 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 *Ке*) 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.

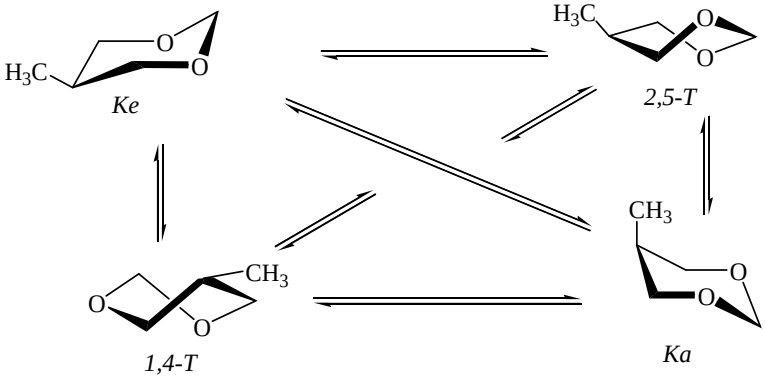

Рис. 1.

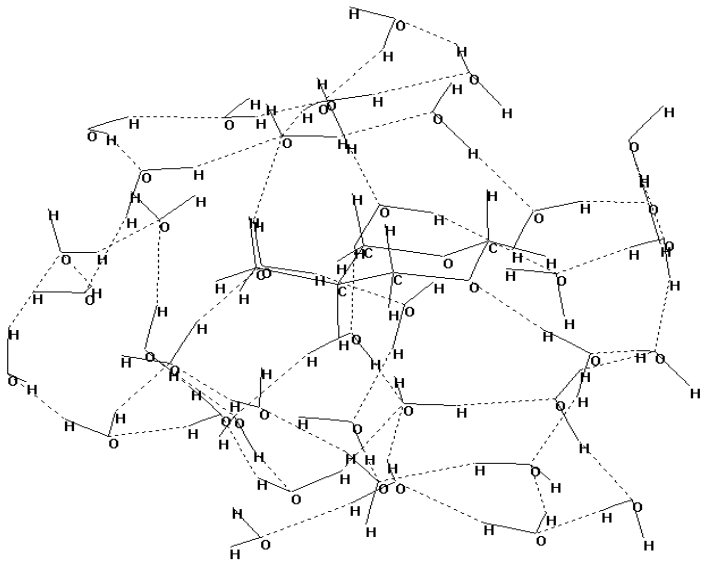

Рис. 2.

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

Соединение	*Ка*	*2,5-Т*	*1,4-Т*
Диоксан-**I**	0.8	3.4	3.2
Кластер: диоксан-**I** ·39 H_2O	3.0	5.1	5.5

*) Относительно формы *Ке.*

Полученные результаты свидетельствуют о заметном возрастании различий между главным и локальными минимумами при конформационной изомеризации соединения **I** в водном кластере. Подобный эффект проявляется при исследовании конформационного поведения незамещенного 1,3-диоксана в присутствии одной [7] либо двух молекул воды [8], однако в данном случае он становится особенно заметным: различия между локальными минимумами возрастают в 1.5-3.7 раза. Второй особенностью конформационной изомеризации диоксана-**I** в окружении воды является реализация прямого перехода *Ка* ↔ *Ке*, невозможного при конформационных превращениях этого соединения в разряженной газовой фазе.

Таким образом, моделирование конформационной изомеризации 5-метил-1,3-диокса-на в кластере, сформированном из 39 молекул воды, выявило существенные отличия в относительной стабильности локальных минимумов и доказало возможность прямой конформационной изомеризации кресло – кресло, минуя гибкие формы. Вероятной причиной таких отличий является повышение конформационной гибкости молекул исследуемого соединения в присутствии высокополярного растворителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Итоги науки и техники. Технология органических веществ. Т.5. Химия и технология 1,3-диоксациклоалканов / Д.Л. Рахманкулов, Р.А. Караханов, С.С. Злотский, Е.А. Кантор и др. // М.: ВИНИТИ, 1979. - 288 с.

2. Внутреннее вращение молекул / под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1975. – С.355.

3. Кузнецов В.В. ХГС. – 2006. С.643.

4. Кузнецов В.В. Изв. АН. Сер. хим. - 2005. С.1499.

5. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. ЖОрХ. – 2009. Т.45. С.511.

6. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.

7. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Современные наукоемкие технологии. – 2008. № 9. С.47.

8. Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. Материалы международной научно-технической конференции «Актуальные проблемы технических, естественных и гуманитарных наук». Уфа: УГНТУ, 2009. Вып.4. С.160.

АЛГОРИТМ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО МАРШРУТА ДВИЖЕНИЯ АВТОМОБИЛЯ В РАМКАХ УЛИЧНО-ДОРОЖНОЙ СЕТИ

Наумова Н.А., Данович Л.М., Савин В.Н., Булатникова И.Н., Круглова И.А.

Кубанский государственный технологический университет, Краснодар, Россия

В авторской модели движения автотранспортных средств по улично-дорожной сети города распределение интервалов по времени между автомобилями по всем направлениям движения принято подчиненным закону Эрланга *k*-го порядка. В этих предположениях была разработана аналитическая реализация модели, позволяющая рассчитывать основные характеристики обслуживания автомобилей как на нерегулируемом, так и на регулируемом перекрестках.

Вся улично-дорожная сеть города представлена в виде ориентированного графа, вершинами которого являются перекрестки. Необходимую для расчетов информацию об улично-дорожной сети конкретного населенного пункта предлагается хранить в двух связанных базах данных, структура которых представлена ниже.

Таблица 1. Структура базы данных Streets

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		11	
№	S1	S2	S3	S4	Control	Priority	Length	Col	IntA1	…	IntB1	…

1) № - номер квартала (дуги графа) в улично-дорожной сети, соединяющего перекрестки I и II;

2) S1 и S2 – пересекающиеся улицы, образующие перекресток I (вершину I графа);

3) S3 и S4 – пересекающиеся улицы, образующие перекресток II (вершину II графа);

4) Control – наличие светофорного регулирования;

5) Priority – главная или второстепенная улица;

6) Length – длина квартала;

7) Col – количество полос для движения;

8) IntA1, IntA2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении А;

9) IntB1, IntB2 и т.д. – интенсивность по полосам в направлении В.