

нию с комплексом Д и по этой причине в настоящей работе не рассматриваются.

Полученные результаты указывают на заметное влияние электронодонорных соединений на характер ППЭ молекул циклических борных эфиров и позволяют перейти к более детальному моделированию взаимодействий между молекулой 1,3,2 - диоксиборинана и несколькими молекулами электронодонорного соединения, выступающего в качестве растворителя.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев: Наукова думка, 1988. – 160 с.
2. Кузнецов В.В. Автореф. дисс. докт. хим. наук. Уфа, 2002. – 47 с.
3. Rossi K., Pihlaya K. // Acta Chem. Scand. – 1985. – V.В 39, N 8. – P.671.
4. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Баш. хим. журн. – 2004. – Т. 11, №1. – С.79.
5. Кузнецов В.В., Новиков А.Н. // Химия гетероцикл. соединений. – 2003. - №2. – С.295.
6. HyperChem 7.01. Trial version. www.hyper.com.
7. Звиедре И.И., Марданенко В.К. // Изв. АН Латв. ССР. Сер. хим. – 1980. - №4. – С.495.
8. Cotton F., Lislely W. // Inorg. Chem. – 1982. – V.21, -№ 1. – P.300.
9. Ниденцу К., Даусон Д. Химия боразотных соединений. – М.: Мир, 1968. – 235 с.
10. Hess H. // Acta Crystallogr. B. – 1969. – V.25, № 11. – P.2338.
11. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Баш. хим. журн. – 2004. – Т.11, № 1. – С.81.
12. Мазитова Е.Г., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии. – Т.40, вып. 4. – С.615.

ПРОГНОЗ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ АМИНОВ И НИТРИЛОВ

Рукавишников В.В., Белик А.В.
Челябинский Государственный Университет,
Челябинск

Органические соединения, содержащие в своей структуре амино- и циано- группы, широко используются на практике и имеют определенный научный интерес [1]. В связи с этим, важное значение имеют теоретические исследования, позволяющие прогнозировать их некоторые физико-химические свойства, как функции молекулярного строения.

В настоящей работе предлагается рассмотреть относительную плотность (d_4^{20}) соединений в рамках нового подхода к оценке молекулярной формы и объема органических соединений [2,3]. Для этого необходимо знание декартовых координат всех атомов, образующих молекулу. Определить их можно различными способами. К настоящему времени наибольшее распространение получил способ оптимизации геометрии в рамках квантовохимических приближений. Поэтому мы выбрали модель РМЗ [4], реализованную в программном комплексе “Hyper Chemistry”. Далее каждому типу атомов в молекуле (химическому элементу) приписывается собственный атомный радиус (r^0), являющийся параметром модели. В качестве r^0 для атома водорода предлагается величина равная 0,3325 ангстрем, для атома углерода - 0,6500 ангстрем, для атома азота - 0,6775 ангстрем. Предполагается, что в результате атом-атомного взаимодействия в молекуле полученные сферические оболочки атомов деформируются. На первом этапе вычисляется величина Δr^0 для каждого из атомов. Для этого просматриваются все его соседи на валентных и невалентных расстояниях. Для атомов, находящихся на валентных расстояниях, Δr^0 вычисляется по формуле (1), где $R_{i\mu}$ евклидово расстояние между атомами i и μ ; n - главное квантовое число атома μ . Для невалентных расстояний применяется формула (2).

$$r_i = r_{\mu}^0 \exp(R_{i\mu}/R_{i\mu}^{n-1}) \quad (1)$$

$$r_i = -r_{\mu}^0 \exp(R_{\mu j}/R_{\mu j}^6) - r_{\mu}^0 \exp(R_{\mu j}/R_{\mu j}^{12}) \quad (2)$$

Таблица 1. Экспериментальные d_4^{20} (эксп.) [5] и вычисленные d_4^{20} (расч.) относительные плотности органических соединений.

Соединения	d_4^{20} (эксп.)	d_4^{20} (расч.)
ацетонитрил	0,7830	0,8343
бутиламин	0,7420	0,7087
бутиронитрил	0,7960	0,7751
валеронитрил	0,8010	0,7631
гексиламин	0,7630	0,7046
диметиламин	0,6800	0,7067
диэтиламин	0,7110	0,7039
изобутиронитрил	0,7730	0,7753
метиламин	0,7690	0,7082
пропиламин	0,7140	0,7052
пропионитрил	0,7830	0,7977
триметиламин	0,6710	0,7069
этиламин	0,7060	0,7079

Механизм трансформации исходной сферической атомной оболочки может быть различным. В частно-

сти, для каждой рассматриваемой атомной пары сферическая форма атома преобразуется в эллиптиче-

скую, где полуосями эллипсоида выступают r^0 , r^0 и $(r^0 + \Delta r^0)$. Затем формируется их суперпозиция из числа имеющих место взаимодействий. В результате получается новая форма молекулы, где атомы, ее образующие, не имеют сферической симметрии. Молекулярный объем находится для полученной фигуры численно в результате вписывания ее в параллелепипед, «нарезки» его на N частей по всем осям и оценки полученных «элементарных» объемов на принадлежность к молекуле. Их сумма и определяет искомую величину, а задание N - точность оценки объема. При расчете относительной плотности вещества использовался коэффициент упаковки, равный 0.6022.

В таблице приведены экспериментальные и вычисленные относительные плотности ряда соединений. Анализ полученных результатов показывает удовлетворительное согласие опытных и расчетных данных. Среднее отклонение относительной плотности составляет 0,0073.

Таким образом, предложенная модель позволяет получить новую пространственную форму молекулы и достоверно оценить относительную плотность вещества.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Общая органическая химия /Под ред. Д.Бартона., У.Д.Оллиса. М.: Химия. Т.3. Азотсодержащие соединения. 1982. 736с.
2. Рукавишников В.В., Белик А.В. Вестн. Челяб. ун-та. Сер. 4. Химия. 2004. №1. С. 44-45.
3. Рукавишников В.В., Белик А.В. Моделирование пространственной формы органических соединений //Современные наукоемкие технологии. -М.: «Академия естествознания». 2005. № 9. С.103-105.
4. Stewart, J.J.P. Optimization of Parameters for Semiempirical Methods. I. //J.Comput.Chem.1989.№ 10. P.209.
5. Свойства органических соединений. Справочник /Под ред. А. А. Потехина. Л.: Химия, 1984. 520 С.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ СРЕДНЕГО ЗНАЧЕНИЯ ФРАКТАЛЬНОЙ ФУНКЦИИ ВЕЙЕРШТРАССА-МАНДЕЛЬБРОТА КАК СЛУЧАЙНОЙ ВЕЛИЧИНЫ

Седельников А.В., Корунтеева С.С., Подлеснова Д.П.
Институт энергетики и транспорта,
Самарского государственного
аэрокосмического университета,
Самара

Введение. В работе исследуется возможность построения функциональной зависимости между фрактальной размерностью D действительной части фрактальной функции Вейерштрасса - Мандельброта (ФВМ) при тождественно нулевой случайной фазе и моментом от УРД при оценке с помощью ФВМ микроускорений [1]. Сама ФВМ в этом случае имеет вид [2]:

роускорений [1]. Сама ФВМ в этом случае имеет вид [2]:

$$\text{Re}W(t) = C(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1 - \cos b^n t}{b^{(2-D)n}} \quad (1)$$

Ранее [3, 4, 5] было выяснено, что параметр t связан с безразмерным временем протекания технологического процесса на борту космического аппарата (КА) и изменяется от 0 до 1. Также был проведен ряд исследований, который показал качественную связь между фрактальной размерностью D и моментом от управляющих ракетных двигателей системы ориентации и управления движения КА (УРД). Подробно постановка задачи и суть, а также развитие и современное состояние проблемы микроускорений рассмотрены в работах [6, 7, 8]. В работах [5, 9] показано, что в коридоре значений фрактальной размерности:

$$1,99 \leq D < 2 \quad (2)$$

ФВМ соответствует понятию случайная величина. Поэтому исследования проводились именно в коридоре (2). Как известно [10], самая опасная квазистатическая компонента микроускорений практически не демпфируется во времени и тоже может быть представлена как случайная величина.

Постановка задачи. Для формирования функциональной зависимости между фрактальной размерностью ФВМ D и моментом от УРД требуется проведение исследований по влиянию фрактальной размерности ФВМ (1) в коридоре (2) на основные числовые характеристики ФВМ как случайной величины. Наиболее важной частью является исследование динамики изменения среднего значения, т.к. фактически это и есть средний уровень микроускорений по фрактальной модели, с одной стороны, и именно благодаря увеличению момента от УРД повышается средний уровень микроускорений в реальных условиях, а поскольку D как раз моделирует этот момент, то полученные результаты будут играть решающую роль в оценке микроускорений с помощью ФВМ, с другой стороны.

Таким образом, ставится задача исследования изменения среднего значения функции (1) в коридоре (2) при изменении параметра b от 0 до 1.

Основные результаты работы. На рис. 1 показаны зависимости среднего значения выборки из 1000 точек ФВМ (1) на отрезке $0 \leq t \leq 1$ с равномерным шагом $\Delta t = 0,001$ при различных значениях ее параметров D и b .