

ституты не всегда готовы финансировать деятельность компании, осуществляющей управленческие новации.

Необходимость модернизации производственных систем современных российских предприятий связана сразу с несколькими причинами. Во-первых, происходит усиление международной конкуренции, в ходе которого привлекательность продукции становится определяющим фактором для определения позиции России на рынках. Во-вторых, для многих предприятий сохраняется дефицит инвестиционных ресурсов, что сокращает их возможности по развитию и повышению конкурентоспособности. Как следствие, в последние годы происходит замедление роста производительности труда и падение рентабельности продукции. По оценкам, в последние годы рост производительности труда в России замедляется. Если в 2004 году рост производительности труда составлял 106,8%, то уже в 2007 году он снизился на 2%. В свою очередь реальный ВВП составлял соответственно 107,2% и 106,4%. Т.е. темпы роста ВВП страны ежегодно превышали динамику производительности труда. Это, прежде всего, говорит о не полном использовании основных возможностей этого фактора экономического роста. Кроме того, рентабельность продукции находится ниже уровня 2001 года. Поэтому особую актуальность приобретает использование для повышения конкурентоспособности предприятия существующих внутренних резервов. Главным таким резервом можно считать своевременную

модернизацию имеющихся производственных систем.

В современных условиях практически все успешные компании применяют те или иные элементы модернизированных производственных систем. В большей части это относится к системе управления качеством. А также к визуализации отдельных рабочих участков. Крупнейшие предприятия России по машиностроению и металлургии активно модернизируют имеющиеся производственные системы при помощи зарубежных партнеров.

Мировой опыт совершенствования производственных систем многообразен. И, как правило, состоит из способов и мероприятий, улучшающих организацию отдельных процессов на основе исключения из производства «не нужных» звеньев и использования не капиталоемких способов повышения производительности. Основными индикаторами эффективности производственной системы являются не толь интенсивность поставок, расход времени на основные и вспомогательные операции, но и объем, и оборачиваемость запасов незавершенной продукции и количество выявленных дефектов. В связи с этим, эффективность производственной системы, на мой взгляд, должна определяться рациональностью использования имеющихся в фирме на предприятии ресурсов: капитала, труда, материалов и т.д. с учетом конкретной производственной специфики предприятия и существующих особенностей его внешнего окружения.

Фундаментальные и прикладные проблемы физики

КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ЦИС-2,5-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА

Курамшина А.Е.¹, Бочкор С.А.¹, Кузнецов В.В.^{1,2}

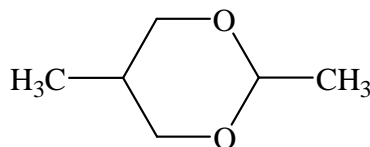
¹Уфимский государственный нефтяной технический университет

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 [5-9] было показано, что главным минимумом

на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) незамещенного, а также 2-метил- и 4,4-диметил-1,3-диоксанов является конформер *кресла* (*K*), либо экваториального *кресла* (*Ke*). Локальные минимумы соответствуют формам аксиального *кресла* (*Ka*), *1,4-твист*- (*1,4-T*), и *2,5-твист*- (*2,5-T*), а максимумы - конформациям *полукресла*, *софы* и несимметричной *ванны*. Настоящая работа посвящена исследованию конформационной изомеризации молекул *цис*-2,5-диметил-1,3-диоксана (**I**) с помощью неэмпирических квантово-химических приближений RHF//STO-3G и RHF//3-21G в рамках программного обеспечения HyperChem [10].

Цис-



I

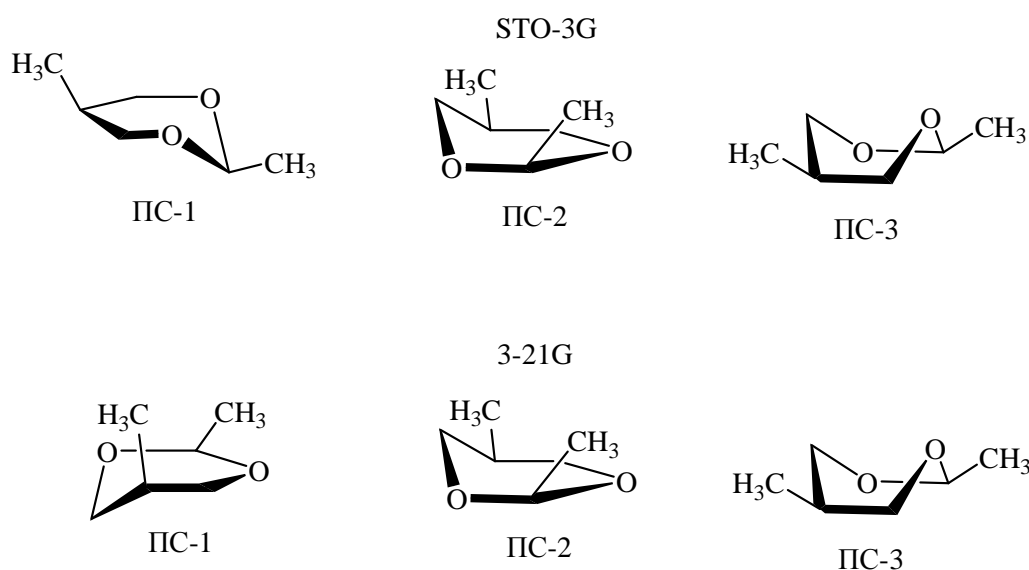
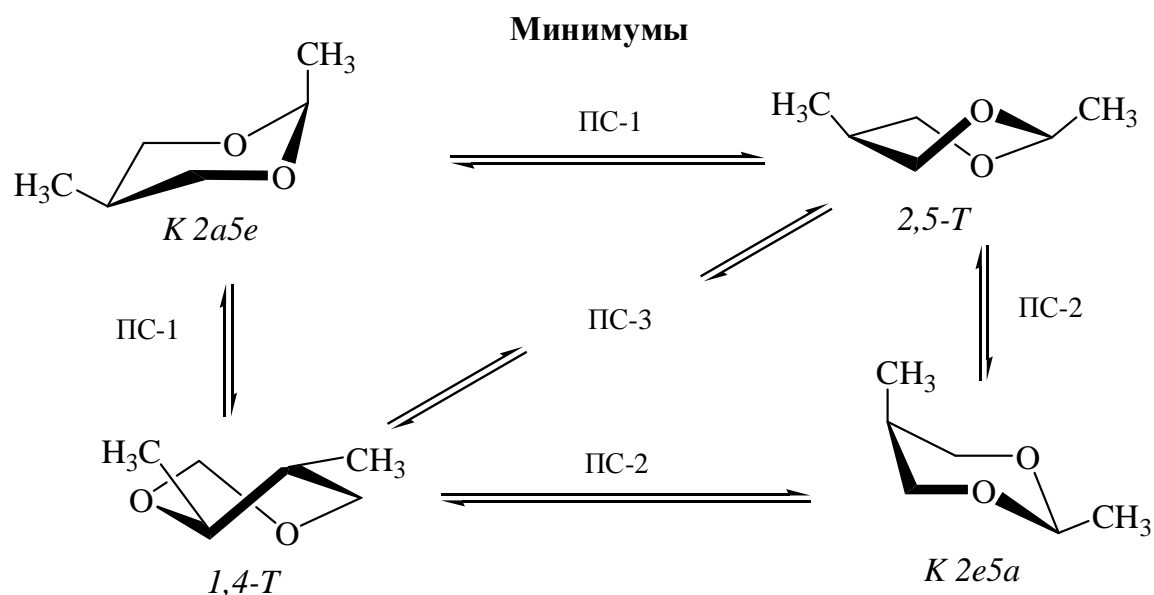
Известно [11], что согласно данным ЯМР ^1H для молекул *цис*-2,5-диалкил-1,3-диоксанов в качестве наиболее стабильной постулируется конформация *кресла* с *5a2e*-ориентацией заместителей (*K 5a2e*). Нами установлено, что ППЭ со-

единения **I**, как и в случае незамещенного, а также 2-метил- и 4,4-диметил-1,3-диоксанов, содержит 4 минимума; их относительные энергии, а также энергии максимумов (переходные состояния, ПС) представлены в таблице.

Таблица 1. Стационарные точки на ППЭ диоксана **I** (ккал/моль)

Расчетные базисы	Минимумы*			Максимумы*		
	<i>K 2a5e</i>	<i>1,4-T</i>	<i>2,5-T</i>	ПС-1	ПС-2	ПС-3
RHF//STO-3G	3.2	4.4	4.5	9.1	12.1	4.8
RHF//3-21G	3.6	5.1	4.5	8.6	8.7	5.1

*) Относительно формы *K 2e5a*



Полученные данные свидетельствуют об энергетической предпочтительности формы *K 2e5a*, что соответствует данным ЯМР ^1H [11,12]. Ближайший локальный минимум в рамках обоих расчетных базисов отвечает конформеру *K 2a5e*. Можно предположить, что конформационное равновесие между ними значительно смещено в сторону формы *K 2e5a*.

Переходные состояния, или максимумы на ППЭ, отвечают конформациям *софы* и несимметричной *ванны*. В приближении STO-3G наиболее высокий потенциальный барьер (ПС-2) существует между формами *2,5-T* и *K 2e5a*, а также между последней формой и конформером *1,4-T*. По результатам 3-21G переходные состояния ПС-1 и ПС-2 практически вырождены по энергии. В рамках обоих расчетных базисов наиболее низкий потенциальный барьер характерен для конформационной изомеризации гибких форм *2,5-T* и *1,4-T*.

Таким образом, анализ относительной стабильности конформеров *цис*-2,5-диметил-1,3-диоксана **I** указывает на высокую концентрацию формы кресла *K 2e5a*. Полученный результат хорошо согласуется с известными данными эксперимента об относительной выгодности аксиальной ориентации заместителя у атома C-5 по сравнению с другими углеродными атомами 1,3-диоксанового кольца из-за ослабления 1,3-несвязанных взаимодействий в цикле, обусловленного присутствием гетероатомов кислорода [12-14].

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 и др. // М.: ВИНТИ, 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. Freeman F., Uyen Do K. J. Mol. Struct. (Theochem). - 2002. V.577. P.43.
6. Курамшина А.Е., Файзуллин А.А., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. Баш. хим. ж. - 2004. Т.11. С.81.
7. Мазитова Е.Г., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. ЖОрХ. - 2004. Т.40. С.615.
8. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. ЖОрХ. - 2006. Т.42. С.629.
9. Кузнецов В.В., Курамшина А.Е., Цеплин Е.Е., Бочкор С.А., Хвостенко О.Г. Современные наукоемкие технологии. - 2006. N 2. С.76.
10. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.
11. Самитов Ю.Ю. Атлас спектров ЯМР пространственных изомеров. Т.1. Казань: Казанский университет, 1978.
12. Eliel E., Knoeber M.C. J. Am. Chem. Soc. - 1968. V.90. P.3444.
13. Богатский А.В., Гарковик Н.Л. Усп. химии. - 1968. Т.37. С.581.
14. Богатский А.В., Самитов Ю.Ю., Грень А.И., Соболева С.Г. ХГС. - 1971. С.893.

Подробная информация об авторах размещена на сайте «Учёные России» - <http://www.famous-scientists.ru>