$$\dot{x} - 2y - (1 + 8(q_1 + q_2))x = 0,$$
$$\dot{y} + 2x - (1 - 4(q_1 + q_2))y = 0, \quad (9)$$
$$\dot{z} + 4(q_1 + q_2)z = 0$$

Характеристическое уравнение этой системы:

$$\Delta(\lambda) = \begin{vmatrix} \lambda^2 - (1 + 8(q_1 + q_2)) & -2\lambda & 0 \\ 2\lambda & \lambda^2 - (1 - 4(q_1 + q_2)) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^2 + 4(q_1 + q_2) \end{vmatrix} = 0,$$

или

$$\lambda^4 + 2(1 - 2a)\lambda^2 + 1 + 4a - 32a^2 = 0, \quad (10)$$
$$\lambda^2 + 4a = 0$$

где $a = q_1 + q_2$, $q_1 \in]-\infty, 1]$, $q_2 \in]-\infty; 1]$.

Видим, что для определенного множества значений параметров q_1, q_2 система может иметь пару чисто мнимых простых корней. Следовательно, условия теоремы Ляпунова, гарантирующие существование периодических по t , аналитически зависящих от одного параметра (начального отклонения например, величины x) решений, выполнены.

Список литературы

1. Куницын А.Л. Турешбаев А.Т.Письма в АЖ..// 1983, т. 9, №7, С. 432-435.

2. Kunitsyn A.L. and Tureshbaev A.T. Celestial Mechanics //1985, Y.35, p. 105-112.

3. Куницын А.Л., Турешбаев А.Т. Письма в АЖ.// 1985, т. II , №2, С. 145-148.

4. Турешбаев А.Т. Письма в Астрон. журн.// 1986. т. 12, № 9, С. 722-725.

5. Турешбаев А.Т. Тематический сборник научных трудов МАИ //1987 г., С. 28-31.

6. Пережогин А.А., Турешбаев А.Т. Астрон. журн.// т.66, вып.4, С. 859-865.

7. Турешбаев А.Т. ВИНИТИ . //1985, № 7, 207-В, Деп.

8. Куницын А.Л., Турешбаев А.Т. Материалы Всесоюзного совещания "Динамика гравитирующих систем и методы аналитической небесной механики"// Алма-Ата: Наука, 1990, С. 32-36.

9. Моисеев Н.Н. Ассимптотические методы нелинейной механики // М.: Наука,1981.

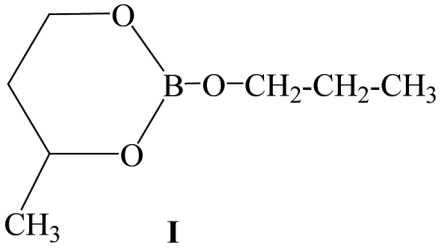
Химические науки

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА 2-ПРОПОКСИ-4-МЕТИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА

[1]Брусиловский Ю.Э., [2,3]Кузнецов В.В.

[1]Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины, г. Одесса, Украина;
[2]Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия;
[3]Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа, Россия

Интерес к структурным исследованиям шестичленных циклических эфиров борных кислот связан как с особенностями их строения, так и с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1-6]. Ранее [7, 8] были выявлены основные колебательные частоты в ИК и КР спектрах замещенных 1,3,2-диоксаборинанов. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование колебательного спектра 2-пропокси-4-метил-1,3,2-диоксаборинана (**I**) с помощью неэмпирического квантово-химического приближения HF/6-31G(d) в рамках программного обеспечения HyperChem [9].



I

Исследовались колебательные частоты, связанные с гетероатомным фрагментом кольца. Все они принадлежат к так называемой области «отпечатков пальцев» молекулы.

Основные колебательные частоты соединения I

Частота, $см^{-1}$	Интенсивность, %	Отнесение	Частоты из экспериментальных ИК и КР спектров, $см^{-1}$
663	7	Внеплоскостные деформационные колебания фрагмента CBO_3 (δ CBO_3)	662 (ср), ИК
732	0.002	Крутильные колебания C_3H_7	741 (ср), КР;
750	1	Симметричные валентные колебания BO_3 (ν_s BO_3)	755 (с), КР
1068	10	νC-O (O-C_3H_7)	1068 (ср), ИК
1277	21	Асимметричные валентные колебания BO_2 (ν_{as} BO_2) в цикле	1280 (с), ИК 1285 (сл), КР
1326	4	Скелетные колебания кольца	1325 (с), ИК
1348	100	Валентные колебания экзоциклической связи B-O, ν BO	1342 (сл) КР

Примечание: с – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая

При определении расчетных колебательных мод использовалась процедура масштабирования с коэффициентом 0.8953, соответствующим уровню теории HF/6-31G(d) [10].

Выявленные моды свидетельствуют о заметном вкладе смешанных колебаний, в которых участвуют фрагменты гетероциклического кольца, в общий спектр. При этом наблюдается хорошее соответствие расчетных и экспериментальных значений частот. Следует также отметить наличие близких частотных интервалов в спектрах других соединений этого класса. Так, в случае 2-изопропил-4,4,6-триметил-1,3,2-диоксаборинана скелетные колебания δ CBO_2 рассчитаны и наблюдаются при 663 $см^{-1}$ [11] и при 671 $см^{-1}$ для 2-изопропил- [12] и 2-изопропил-5,5-диметил-1,3,2-диоксаборинанов соответственно [13]. Сильная КР полоса, отвечающая ν_s BO_3, проявляется в спектре 2-изопропил-4,4,6-триметил-1,3,2-диоксаборинана при 767 $см^{-1}$, а ее расчетное значение составляет 766 $см^{-1}$ [11].

Таким образом, рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой 1,3,2-диоксаборинанового кольца и могут быть использованы для идентификации и подтверждения структуры соединений этого класса.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках базовой части госзадания образовательным организациям высшего образования.

Список литературы

1. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев: Наукова думка, 1988. 160 с.

2. Кузнецов В.В. // Изв. РАН. Сер. хим. 2005. № 7. С.1499.

3. Кузнецов В.В. Успехи органического катализа и химии гетероциклов. М: Химия, 2006. С.336.

4. Bhat N.G., Caga-Anan Z., Leija R. // Tetrahedron Lett. 2005. V.46. № 31. P.5109.

5. Marciniec B., Jankowska M., Pietranzuk C. // Chem. Commun. 2005. № 5. P.663.

6. Murata M., Oda T., Watanabe S., Masuda J. // Synthesis. 2007. № 3. P.351.

7. Кузнецов В.В., Грень А.И. // Докл. АН УССР. Сер. Б. 1984. № 7. С.39.

8. Кузнецов В.В., Алексеенко Л.И., Стайков А.И., Грень А.И. // Укр. хим. ж. 1988. Т.54. № 12. С.1315.

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

10. Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem., 1996. V.100. N 41. P.16502.

11. Брусиловский Ю.Э., Кузнецов В.В. // Международный научно-исследовательский журнал 2013. № 8 (15). Часть 1. С.64.

12. Брусиловский Ю.Э., Кузнецов В.В. // Международный научно-исследовательский журнал 2012. № 4. С.59.

13. Брусиловский Ю.Э., Кузнецов В.В. // Международный журнал прикладных и фундамен-тальных исследований. 2011. № 10. С.132.