

Химические науки

**КОНФОРМАЦИОННЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ  
1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА  
В ФУЛЛЕРЕНЕ C-60**

Кузнецов В.В.

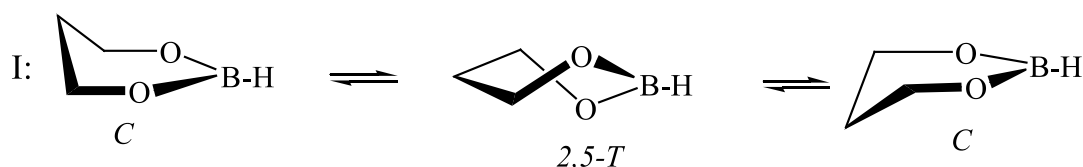
Уфимский государственный авиационный  
технический университет, Уфа,  
e-mail: kuzmaggy@mail.ru;

Уфимский государственный нефтяной технический  
университет, Уфа

Нанообъекты, в частности, фуллерены оказывают влияние на конформационные характеристики инкапсулированных молекул и существенно меняют свойства последних [1]. В частности, недавно было показано, что для этана в фулленере C-60 потенциальный барьер внутреннего вращения по сравнению со свобод-

ной молекулой возрастает в 2.7 раза [2]. С другой стороны известно, что циклические эфиры борных кислот являются важными объектами органического синтеза и конформационного анализа [3, 4]. В настоящей работе с помощью приближения AM1 в рамках программного обеспечения HyperChem [5] впервые исследовано конформационное поведение молекулы 1,3,2-диоксаборинана (I), помещенной во внутреннюю полость фуллера C-60.

Молекулы самого эфира (I), как известно, при комнатной температуре пребывают в состоянии быстрой в шкале времен ЯМР интерконверсии кольца между двумя вырожденными по энергии конформерами *софы* (C, минимум); этот процесс идет через переходное состояние (ПС), отвечающее 2,5-*твист*-форме (2,5-T) [3, 4].



Однако, в полости фуллера C-60 молекулы эфира (I) ведут себя иначе. Конформер *софы* в этом случае в ходе оптимизации геометрии превращается в форму *1,4-твист* (1,4-T), отвечающую главному минимуму на поверхности потенциальной энергии и никогда не реализующуюся для молекулы этого соединения в свободном состоянии. Положение этой формы в фуллереновой

полости показано на схеме. Данный конформер может путем инверсии кольца превращаться либо в *кресло*, либо в другую *1,4-T*-форму, энантиомерную исходной. Энергетические параметры конформационных превращений эфира (I) в полости фуллера в сравнении с данными для свободной молекулы, включая энергии переходных состояний, представлены в таблице.

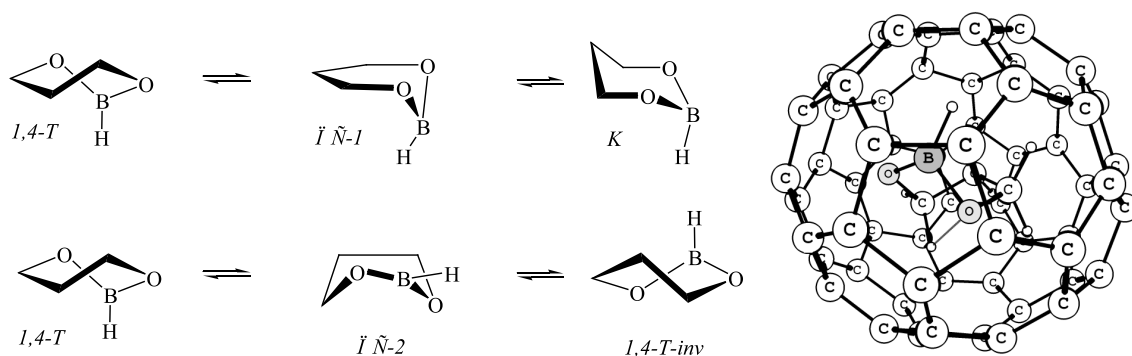
Энергетические параметры конформационных превращений 1,3,2-диоксаборинана (I)  
( $E_0$  – в Хартри,  $\Delta H$ ,  $\Delta G^0$ ,  $\Delta H^\ddagger$ ,  $\Delta G^\ddagger$  – в ккал/моль,  $\Delta S$  и  $\Delta S^\ddagger$  – в кал/моль · К)

Конформер	$-E_0^*$	$\Delta E_0$ ( $\Delta E_0^\ddagger$ )	$\Delta H$ ( $\Delta H^\ddagger_{298}$ )	$\Delta G^0$ ( $\Delta G^\ddagger_{298}$ )	$\Delta S_{298}$ ( $\Delta S^\ddagger_{298}$ )	Заряд эфира (I)
Свободная молекула эфира (I)						
C	43.750862	0	0	0	0	0
2,5-T	43.745853	(3.4)	(2.8)	(3.2)	(-0.9)	0
Молекула эфира (I) в фулленере C-60						
1,4-T	323.698623	0	0	0	0	-0.2957
K	323.680928	11.5	11.1	10.0	2.1	-0.2807
ПС-1	323.667629	(19.9)	(19.3)	(19.8)	(-1.3)	-0.2958
ПС-2	323.636822	(41.2)	(39.0)	(39.4)	(-1.6)	0.2566

Примечание: \*) С учетом ZPE

Нетрудно видеть, что минимумы для инкапсулированной молекулы эфира (I) уже не вырождены по энергии и барьеры перехода между

ними существенно выше. Помимо этого, инкапсулированная молекула приобретает электрический заряд.



Полученные результаты свидетельствуют о формировании в рамках рассмотренной модели своеобразного силового поля внутри фуллерена, которое «сжимает» инкапсулированную молекулу и тем самым кардинально меняет ее конформационные свойства.

#### Список литературы

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 438 с.
2. Кузнецов В.В. // ЖОХ. – 2013. – Т.83. – Вып.6. – С. 1033.
3. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. Киев, Наукова думка, 1988. – 160 с.
4. Кузнецов В.В. В кн. Успехи органического катализа и химии гетероциклов. М: Химия, 2006. – С. 336.
5. HyperChem 8.0. <http://www.hyper.com>.

**«Математическое моделирование социально-экономических процессов»,  
ОАЭ (Дубай), 16-23 октября 2014 г.**

**Экономические науки**

#### К ЗАДАЧЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ДОХОДНОЙ СТРУКТУРЫ ПРЕДПРИЯТИЯ ПО КРИТЕРИЮ ЕЁ СТОИМОСТИ

Слепова С.В., Шахина М.А., Щипицын А.Г.  
ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный  
университет» (национальный исследовательский  
университет), Челябинск, e-mail: svsl906@mail.ru

Методики оценки эффективности бизнеса применяются, в частности, для количественного анализа стоимости предприятий реального производства, позволяющего определить эффективность их деятельности при вложении ресурсов для его развития в будущем. Одной из наиболее адекватно отражающих экономическую ситуацию в России является оценка стоимости предприятия методикой дисконтированных денежных потоков доходного метода [1], [2].

При модернизации предприятия у его руководителя может появиться задача модернизации существующих доходных структур или создания новых подобных структур с целью повышения их доходности. Для решения этой задачи необходима количественная оценка планируемых будущих доходов от модернизированных и новых доходных структур, а также оценка стоимости этих структур с какими-либо целями.

Использование математически, алгоритмически и программно обеспеченных систем поддержки принятия управленческих решений при наличии достоверной информации об объекте управления и критериях его эффективного функционирования позволит поддержать руководите-

ля в принятии рационального решения. Работы [3], [4] посвящены разработке математического и алгоритмического обеспечения поддержки принятия решений (ППР) руководителем предприятия по двум задачам его эффективного функционирования и являются компонентами общего пакета прикладных программ (ППП) указанной ППР. Настоящая работа дополняет этот ППП решением еще одной задачи функционирования предприятия.

Рассмотрим задачу разработки алгоритма оценки стоимости предприятия методикой дисконтированных денежных потоков. Задачу поставим в возможно общем виде, а числа в алгоритме приведем для примера отладки разработанной программы и получения конкретных численных результатов, позволяющих судить о правильности вычислений по разработанной программе, на основе которой в дальнейшем можно обработать реальную числовую информацию и получить реальные результаты.

**Постановка задачи.**<sup>1</sup> Определить в годы прогнозного периода: 1) балансовую прибыль, 2) чистую прибыль, 3) денежные потоки собственного капитала; 4) стоимость бизнеса, созданную дисконтированными денежными потоками; 5) стоимость бизнеса, созданной денежными потоками собственного капитала; а также определить: 6) стоимость бизнеса на начало первого прогнозного года.

Исходная информация:

<sup>1</sup> Постановка задачи согласована с Механовым Д.С.