

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

Список литературы

1. Деркач Л.Г., Теслюк О.И., Новикова Н.С., Дога П.Г., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б. // ЖОХ. 2014. Т.84, вып. 7. С.1095.
2. Binnemans K., Görlle-Walrand Ch. // Chem. Rev. 2002. V.102. P.2303.
3. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Кондратьева Р.В., Мешкова С.Б., Тополева З.М. // ЖПХ. 2011. Т.84, вып.6. С.954.
4. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б., Тополева З.М. // ЖПХ. 2008. Т.81, вып.8. С.1528.
5. Gaussian 03, Revision B 03. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
6. Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem., 1996. V.100. N 41. P.16502.
7. Брусиловский Ю.Э., Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Михайлов Г.П., Кузнецов В.В. // Международный журнал экспериментального образования. 2015. № 2, часть 1. С.42.
8. Брусиловский Ю.Э., Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Михайлов Г.П., Кузнецов В.В. // Международный журнал экспериментального образования. – 2015. – № 4, часть 2. С.401.

ВЛИЯНИЕ НАНОТРУБКИ НА КОНФОРМАЦИОННУЮ ПРЕДПОЧТИТЕЛЬНОСТЬ МОЛЕКУЛ СО СВЯЗЬЮ БОР-БОР. ДИБОРАН, B_2H_4

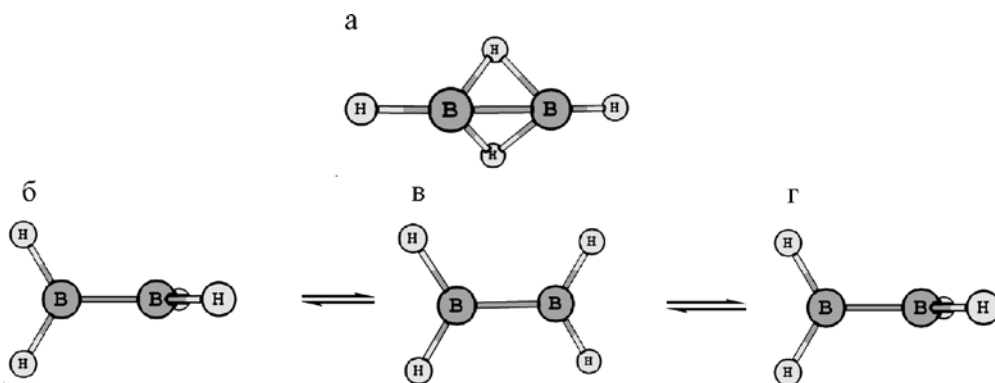
Кузнецов В.В.

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

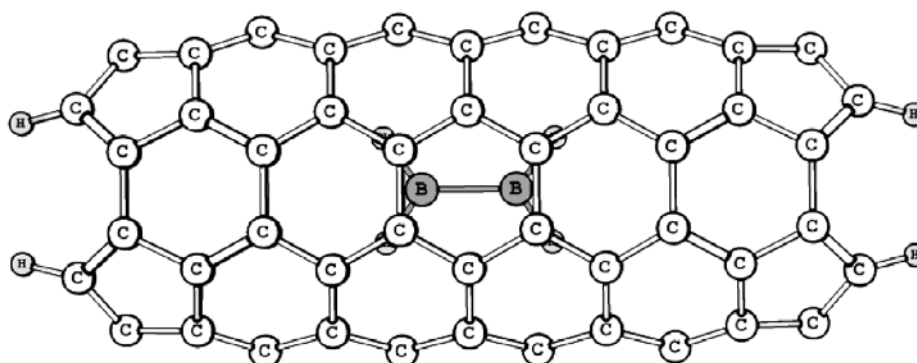
Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа

Нанообъекты, в частности, фуллерены и нанотрубки оказывают влияние на конформационные характеристики инкапсулированных молекул и существенно меняют свойства последних [1]. В частности, недавно было показано, что молекула этана в нанотрубках пребывает в заслоненной конформации [2]. В настоящей работе с помощью приближения РВЕ/3 ζ в рамках программного обеспечения ПРИРОДА [3] впервые исследовано конформационное поведение молекулы диборана, B_2H_4 (I) помещенной во внутреннюю полость модельной нанотрубки $C_{96}H_8$.

Для самого диборана возможна реализация трех форм: неклассической (а, главный минимум), ортогональной (б, локальный минимум) и планарной (в, переходное состояние между двумя минимумами б, табл.).



Данные литературы подтверждают полученные расчетные результаты [4]. Однако для инкапсулированной молекулы диборана I в нанотрубке положение меняется.



Расчет для неклассической формы (а) проведен не удался. Планарная форма (б) неожиданно оказалась самой устойчивой (ΔE_0^0 , ΔH_{298}^0). Ее гессиан, в отличие от свободной молекулы диборана, не содержит мнимых частот.

Таким образом, данные компьютерного моделирования показывают, что силовое поле нанотрубки заметно влияет на энергетические параметры инкапсулированной молекулы и способно существенно изменить характер ее конформационного поведения.

Энергетические параметры диборана (I)

| Форма | ΔE_0^0 (ккал/моль) | ΔH_{298}^0 (ккал/моль) | ΔG_{298}^0 (ккал/моль) | ΔS_{298}^0 (кал/моль К) |
|----------------------|--------------------------------|------------------------------------|------------------------------------|-----------------------------------|
| Свободный диборан | | | | |
| а | 0 | 0 | 0 | 0 |
| б | 3.5 | 3.8 | 3.0 | 2.7 |
| в | 21.2 (ΔE_0^\ddagger) | 21.1 (ΔH_{298}^\ddagger) | 20.9 (ΔG_{298}^\ddagger) | 0.9 (ΔS_{298}^\ddagger) |
| Диборан в нанотрубке | | | | |
| Б | 0.2 | 0.3 | 0 | 0 |
| в | 0 | 0 | 0.5 | -2.5 |

Следует также отметить, что инкапсулированная форма (в) отличается самым низким порядком связи В-В (0.64), который в 1.5 раза меньше, чем для формы (б) (0.95). В то же время в случае свободной молекулы B_2H_4 порядок этой связи мало зависит от ее структуры: 1.13 для (а), 1.09 для (б) и 0.98 для (в). Помимо этого инкапсулированная молекула приобретает заметный отрицательный заряд (-1.53), хотя в целом система диборан-нанотрубка остается электрически нейтральной. Последнее характерно для всех исследованных кластеров, образованных нанотрубками и включенными в их полость молекулами [2, 5-7].

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

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. Журн. орг. химии – 2013. – Т.49. – С. 1245.
3. Лайков Д.Н., Устынюк Ю.А. // Изв. АН. Сер. хим. – 2005. № 3. С. 804.
4. Osorio E., Olson J.K., Tiznado W., Boldyrev A.I. // Chem. Eur. J. – 2012. V.18. P. 9677.
5. Кузнецов В.В. // Журн. общ. химии – 2014. Т.84. вып.1. – С. 150.
6. Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии – 2014. Т.50. вып.5. – С. 775.
7. Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии – 2014. Т.50. вып.10. – С. 1544.

Экономические науки

ВЗАИМОСВЯЗЬ НЕОПРЕДЕЛЁННОСТИ И РИСКОВ ПРЕДПРИНИМАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

¹Кунин В.А., ²Зубова Л.В.

¹НОУ ВПО «Санкт-Петербургский университет управления и экономики», Санкт-Петербург, e-mail: zll1@ya.ru;

²ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный экономический университет», Санкт-Петербург

Одним из приоритетных направлений науки является развитие экономики предпринимательства. Будущее для человека, было, есть и пока остается неизвестным, а значит неопределённым. И, как известно, в условиях неопределённости субъекту принятия решения избежать рисков не представляется возможным. Характерной особенностью предпринимательской деятельности является необходимость её осуществления в условиях неопределённости.

Неопределённость не позволяет заранее точно и достоверно определить как будущее состояние внешней и внутренней предпринимательской среды на различных временных горизонтах прогнозирования, так и результат принятия того или иного предпринимательского решения.

Предлагаемая в настоящей работе трактовка неопределённости базируется на постулировании факта неотъемлемого существования неопределённости в окружающем нас мире и неразрывной связи неопределённости с ожидаемым результатом какого-либо события или явления.

При этом, чем выше степень «размытости» ожидаемого результата или явления, тем больше неопределённость. Определённость представляется авторам вырожденным случаем состояния неопределённости, когда степень «размытости» ожидаемого результата стремится к 0. Возможные риски неразрывно связаны с неопределённостью и проявляются в отклонении фактического результата какого-либо события от ожидаемого. Чем больше неопределённость, тем более «размыт» и менее понятен ожидаемый результат. Следствием этого является вырождение самого понятия риска в условиях очень сильной неопределённости, когда ожидаемый результат размыт настолько сильно, что вообще непонятен.

В соответствии с предлагаемой в настоящей работе трактовкой мерой неопределённости может выступать величина диапазона возможных значений того или иного признака или показателя. Чем шире этот диапазон при одной и той же степени доверия – тем выше неопределённость.