

Современные проблемы науки и образования

ВЗАИМОСВЯЗЬ МЕЖДУ СТРОЕНИЕМ И СВОЙСТВАМИ АЛКИЛСИЛАНОВ

Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н.,
Ефремова А.О., Мальчевская О.А.

Тверской государственный университет
Тверь, Россия

Установление связи между свойствами веществ и строением молекул составляет фундаментальную научную проблему химии, в решении которой важное место занимает разработка теории и методов расчета и прогнозирования [1,2].

$$P_{\text{ЭН}_{4-l}\text{X}_l} = a_0 + a_1 l + a_2 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3, 4),$$

где a_0, a_1, a_2 - параметры выраженные через внутримолекулярные взаимодействия

По данной схеме нами проведены численные расчеты ряда физико-химических свойств галогензамещенных силана. Рассчитанные величины в общем согласуются с экс-

Целью настоящей работы является изучение количественных соотношений, связывающих физико-химические свойства алкилсиланов со строением молекул.

Для этого на основе развиваемой нами концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов [1,2] была выработана общая методология расчета энтальпий образования молекул, средних энергий связей и энергий разрыва связей, тепловых эффектов реакций радикального распада и замещения.

Например, для замещенных метана в квадратичном приближении имеем

периментальными, причем можно сделать предсказания.

Аналогично, энергию разрыва связей в ряду $\text{ЭН}_{4-l}\text{X}_l$ можно рассмотреть как квадратичную функцию числа заместителей (l)

$$-D_{\text{Э}}^l - \text{H} = d_0 + d_1 l + d_2 l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3),$$

$$-D_{\text{Э}}^l - \text{X} = \bar{d}_0 + \bar{d}_1 l + \bar{d}_2 l^2 \quad (l = 1, 2, 3, 4),$$

где $d_0, d_1, d_2, \bar{d}_0, \bar{d}_1, \bar{d}_2$ - параметры, выражающиеся через валентные и невалентные взаимодействия. В линейном приближении исчезают d_2 и \bar{d}_2 ; в кубическом - возникают члены с l^3 . Подобные формулы найдены для

ХУ-замещенных метана и др. По данным формулам также проведены численные расчеты.

Например, для энергий разрыва связей в метилзамещенных силана при 298 К имеем [2,3] (в кДж/моль):

	SiH_4	SiH_3CH_3	$\text{SiH}_2(\text{CH}_3)_2$	$\text{SiH}(\text{CH}_3)_3$	$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$
$D_{\text{Si-H}}$	395 ± 13	496*	477	339	-
$D_{\text{Si-CH}_3}$	-	400 ± 42	431*	477	300

Здесь звездочкой отмечены вычисленные нами значения.

В работе также дана и теоретико-графовая интерпретация аддитивных схем расчета алкилсиланов и их хлорзамещенных [4]. Проведены численные расчеты энтальпии образования $\Delta_f H^0(\text{г}, 298 \text{ К})$ выбранных соединений в разных приближениях; построены графические зависимости "Свойство-степень замещения" и др.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 07-03-96403-рЦентр-а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь: ТвГУ, 2002. - 232 с.

2. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 5. С. 25-26.

3. Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А., Потапов В.К., Ходеев Ю.С. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука, 1974. 351 с.

4. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Артемьев А.А. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 1. С. 17-19.

**НЕОБХОДИМОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ
БАЗ ДАННЫХ ПРИ ФОРМИРОВАНИИ
КАДРОВОГО ПОТЕНЦИАЛА РЕГИОНА**

Нефёдова К.А.

*Автономная некоммерческая организация
высшего профессионального образования
«Российский университет кооперации»,
Владимирский филиал
Владимир, Россия*

Формирование кадрового потенциала общества в целом означает подготовку незанятого населения к трудовой деятельности, вовлечение в материальное и духовное производство всего трудоспособного населения страны¹. Процесс формирования региональной кадровой политики представляет собой комплекс стратегических и текущих операций организационно-управленческого характера, а также совокупность отдельных программ.

Для того чтобы оценить современное состояние российского рынка труда, обычно рассматривают его основную категорию — экономически активное население (занятые общественно-полезной деятельностью, приносящей доход, и безработных, активно ищущие работу и готовые приступить к ней)². Это же население чаще всего и учитывается при формировании кадрового потенциала, как на государственном уровне, так и на уровне регионов. Но кроме части населения, подготовленной к занятию рыночных мест, существует и другая часть населения — неподготовленная к профессиональному труду (дети, часть инвалидов, вышедшая из трудовой сферы часть пенсионеров). Наибольшие сложности возникают при работе с инвалидами.

Особенность «перевода» данной группы в кадровый потенциал заключается в том, что появляется необходимость работы с ними на всех ступенях их формирования как будущего кадрового состава и для их дальнейшего перехода в кадровый капитал. Сложность работы с данной группой также объясняется минимальным уровнем самостоятельности при принятии решений, а, следовательно, основную функцию при работе с данной группой должно взять на себя государство и муниципальные органы власти.

Труд инвалидов имеет важное социально-психологическое и морально-этическое значение, способствуя утверждению личности, устранению психологических барьеров, улуч-

шению материального положения инвалидов и их семей, вносит определенный вклад в экономику страны. Рынок же труда инвалидов как специфический сегмент общего рынка труда характеризуется большой деформированностью: на фоне высокого спроса инвалидов на рабочие места практически отсутствует их предложение. Для его развития требуется корректировка извне. Анализ государственных мер в области занятости инвалидов (квотирование рабочих мест, штрафные санкции) выявил их неэффективность.

Для решения этого вопроса необходимо сделать очень многое и в первую очередь разработать мероприятия по стимулированию работодателей, у которых среди сотрудников есть люди с ограниченными возможностями, а также вернуться к прежней системе и нормам квотирования рабочих мест для инвалидов.

Следующим этапом является разработка баз данных, при помощи которых работодатели смогут за достаточно короткое время «выбрать» себе будущих сотрудников из числа лиц с ограниченными возможностями. Такие базы данных должны разрабатываться на уровне каждого региона и должны включать полную информацию обо всех лицах с ограниченными возможностями:

- личные данные: пол, возраст, место проживания, контактные телефоны;
- уровень образования;
- трудовой стаж;
- степень инвалидности с указанием категории жизнедеятельности и ограничениями по трудоспособности.

Разработка указанных баз данных позволит работодателям достаточно быстро выбрать необходимых для него сотрудников и связаться с ними. В случае если в базе своего региона не оказалось подходящего работника, можно было бы воспользоваться базой данных соседнего региона, естественно при условии возможности предоставления места проживания или автотранспорта (доставка до дома).

Также данные базы должны быть доступны для учебных заведений и центров занятости населения, что в свою очередь предоставит возможность для повышения уровня образования и эффективности трудоустройства лиц с ограниченными возможностями.

Таким образом, разработка баз данных для людей с ограниченными возможностями позволит более эффективно проводить политику в области формирования кадрового потенциала региона среди всех групп населения, а также будет способствовать повышению уровня и качества жизни рассматриваемых лиц.

¹ Типы управленческой карьеры в России // ЭКО. 1998. №4. С. 132-134.

² Войтов А.Г. Экономика. Общий курс. Учебник М.: Дашков и К, 2003, - С.401