

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^m c_k g\left(\sum_{j=1}^n c_{jk} x_j + c_{0k}\right) + c_0, \quad (2)$$

где  $g(z) = 1/(1 + \exp(-z))$ , способна аппроксимировать с любой точностью любую непрерывную функцию многих переменных. Эта сеть имеет  $n$  входных,  $2n+1$  скрытых и один выходной нейрон. В этом случае неопределенным остается только число нейронов первого слоя. Оно подбирается в зависимости от размерности входного и выходного сигнала, а также от числа элементов обучающей выборки.

Таким образом, приведенные рекомендации позволяют облегчить построение нейронных сетей и тем самым успешно применять их в решении задач моделирования технологических процессов.

## КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ

### 4-ЗАМЕЩЕННЫХ 1,3,2-

### ДИОКСАБОРИНАНОВ

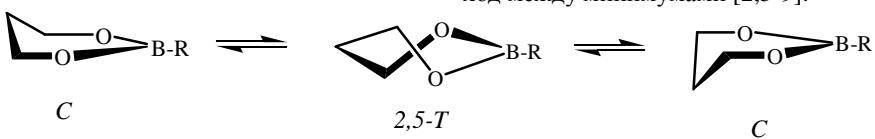
Валиахметова О.Ю.<sup>1</sup>, Бочкор С.А.<sup>1</sup>,  
Кузнецов В.В.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной  
технический университет

<sup>2</sup>Институт физики молекул и кристаллов  
Уфимского научного центра РАН

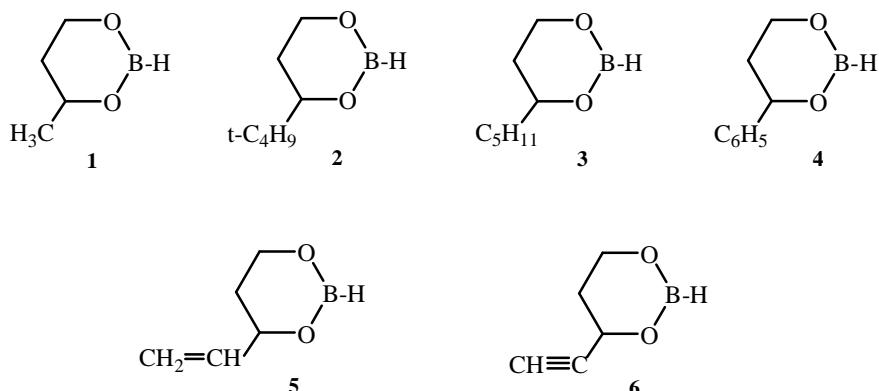
Интерес к циклическим эфирам борных кислот с гетероатомами кислорода – 1,3-диокса-2-борациклоалканам – обусловлен все более возрастающим значением этих соединений в тонком органическом синтезе (получение энантиомерных спиртов и полиенов), комплексом практически полезных свойств (биологически активные вещества, ингибиторы коррозии, компоненты полимерных и горюче-смазочных материалов), а также особенностями строения (электронные и стерические внутримолекулярные взаимодействия) [1-6]. Последнее в немалой степени обусловлено присутствием электроно-дефицитного атома бора и электроно-донорных гетероатомов кислорода в одной молекуле [1,2].

Известно, что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) молекул шестичленных борных эфиров – 1,3,2-диоксаборинанов – содержит один или два (для замещенных аналогов) минимума – конформеры *софы* (*C*) – и один максимум – форму *2,5-твист* (*2,5-T*), а конформационная изомеризация в отличие от неборных аналогов – 1,3-диоксанов – предполагает однобарьерный переход между минимумами [2,5-9].

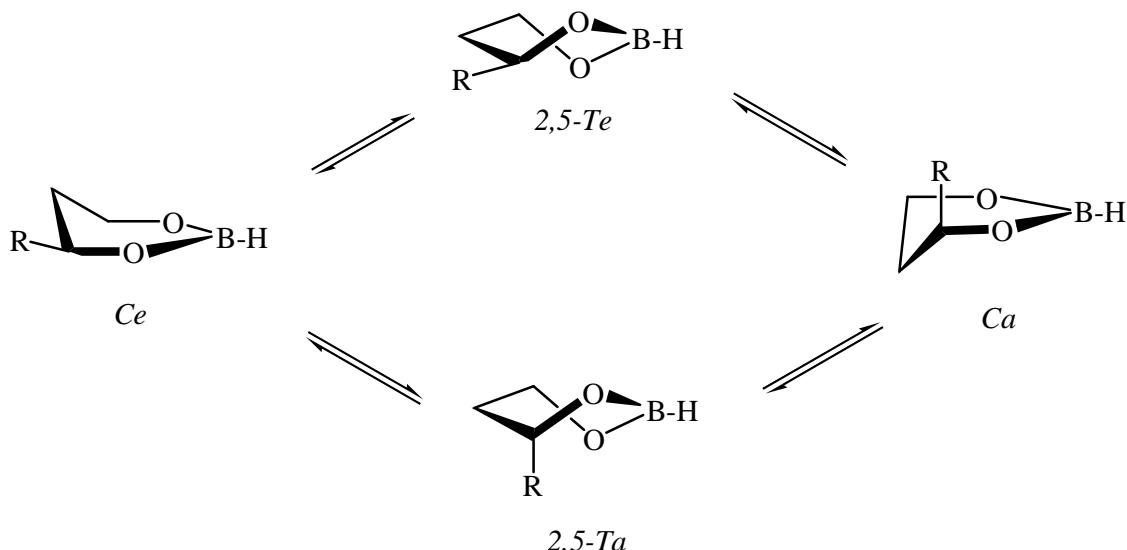


Ранее [10,11] нами была подробно изучена применимость квантово-химических методов к определению структурных и геометрических характеристик циклических борных эфиров. Целью настоящей работы является исследование маршрута конформационной изомеризации молекул

модельных 4-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов **1-6** с помощью полуэмпирического (AM1) и не-эмпирических (RHF//STO-3G, RHF//3-21G) методов в рамках программного обеспечения HyperChem [12].



Известно [1,2,5,6], что главным минимумом на ППЭ эфиров **1-4** является экваториальный конформер *софы* (*Ce*). Нами обнаружено, что конформационная изомеризация между минимумами *Ce* и *Ca* (аксиальный конформер *софы*) может проходить по двум маршрутам, включающим переходные состояния *2,5-Te* и *2,5-Ta*.



**Таблица 1.** Относительная стабильность минимумов и максимумов на ППЭ эфиров 1-6 (ккал/моль)

| Соединение | Метод расчета | $\Delta E^*$ | $\Delta \Delta E^\ddagger*$ | $\Delta E^\ddagger$ |
|------------|---------------|--------------|-----------------------------|---------------------|
| <b>1</b>   | AM1           | 0.3          | 0.02                        | 3.7                 |
|            | STO-3G        | 0.9          | 0.4                         | 7.0 – 8.0           |
|            | 3-21G         | 0.6          | 0.1                         | 8.3 – 8.4           |
| <b>2</b>   | AM1           | 1.8          | 0.4                         | 4.1 – 4.5           |
|            | STO-3G        | 3.5          | 1.1                         | 6.9 – 8.0           |
|            | 3-21G         | 3.8          | 2.0                         | 8.0 – 10.0          |
| <b>3</b>   | AM1           | 0.3          | 0.04                        | 3.8                 |
|            | STO-3G        | 1.0          | 0.6                         | 6.9 – 7.5           |
|            | 3-21G         | 0.7          | 0.4                         | 8.2 – 8.6           |
| <b>4</b>   | AM1           | 0.3          | 0.06                        | 3.9                 |
|            | STO-3G        | 1.0          | 1.0                         | 7.2 – 8.2           |
|            | 3-21G         | 0.1          | 1.3                         | 8.6 – 9.9           |
| <b>5</b>   | AM1           | 0.1          | -0.1                        | 3.7 – 3.8           |
|            | STO-3G        | 0.7          | 0.2                         | 7.1 – 7.3           |
|            | 3-21G         | 0.5          | 0.3                         | 8.5 – 8.8           |
| <b>6</b>   | AM1           | -0.7         | -0.8                        | 3.7 – 4.5           |
|            | STO-3G        | -0.3         | 0                           | 7.4                 |
|            | 3-21G         | -2.1         | -1.4                        | 9.1 – 10.4          |

<sup>\*)</sup> Отрицательные значения свидетельствуют о более стабильных формах *Ca* либо *2,5-Ta*

Полученные данные (таблица 1) свидетельствуют об энергетической предпочтительности формы 2,5-Te для эфиров 1-5. При этом различия в энергии между переходными состояниями 2,5-Te и 2,5-Ta ( $\Delta\Delta E^\ddagger$ ) в зависимости от метода расчета и характера заместителя R составляют от 0.1 и менее до 2.0 ккал/моль. Как и следовало ожидать, увеличение конформационного размера алкильного заместителя (эфиры 1-3) приводит к возрастанию  $\Delta E$  и  $\Delta\Delta E^\ddagger$ . При этом метильная и пентильтная группы достаточно схожи между собой. Уменьшение конформационного объема R за счет появления двойной связи (эфир 5) обуславливает уменьшение значений  $\Delta E$  и  $\Delta\Delta E^\ddagger$ . В случае 4- этинил-1,3,2-диоксаборинана (6) аксиальная ориентация заместителя R становится более предпочтительной. Выигрыш в энергии между формами Ce и Ca достигает 2.1 ккал/моль в пользу последней (RHF/3-21G). Максимум – форма 2,5-Ta – в этом случае также более стабильна, чем 2,5-Te. Во всех случаях характер заместителя R слабо влияет на высоту потенциального барьера  $\Delta E^\ddagger$ .

Таким образом, детальный анализ конформационных превращений 4-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов указывает на два различных маршрута конформационного перехода  $Ce \leftrightarrow Ca$ ; их относительный вклад определяется стерическими и электронными характеристиками заместителя у атома С-4 гетероциклического кольца.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот, Наукова думка, Киев, 1988. – 160 с.
2. Кузнецов В.В. Синтез, конформационный анализ и химические превращения циклических борных эфиров диолов и аминоспиртов, Дис. докт. хим. наук, Уфа, 2002.
3. Kliegel W. Die Pharmazie, 27, 1 (1972).
4. Кузнецов В.В. // Изв. АН. Сер. хим. – 2005. - № 7. – С.1499-1507.
5. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Современные научноемкие технологии – 2006. - №2. – С. 72-74.
6. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Башкир. хим. журн. 2004. – Т.11, №1. – С.79-80.
7. Курамшина А.Е., Файзуллин А.А., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Башкир. хим. журн. 2004. – Т.11, №1. – С.81-82.
8. Мазитова Е.Г., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. // ЖОРХ – 2004. – Т.40, №4. – С. 615-616.
9. Курамшина А.Е., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Фундаментальные исследования – 2006. - № 3. - С.87-88.
10. Кузнецов В.В. // Журн. структ. химии. – 2001. – Т.42, №3. – С.591-597.
11. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Современные научноемкие технологии – 2006. - №2. – С. 71-72.
12. HyperChem 5.02. Trial version. [www.hyper.com](http://www.hyper.com).

#### О СТРУКТУРЕ ИСТОРИКО-МATEMATICHESKAYE KOMPETENTNOSTI

Головина О.В.

Калужский государственный университет  
им. К.Э. Циолковского

На сегодняшний день встала проблема совершенствования уже сложившейся системы подготовки учителя в рамках компетентностного подхода. В этих условиях важно не упустить ни одного из компонентов сложившейся системы. При выделении в составе профессиональной компетентности лишь деятельностного компонента остается вне поля зрения система знаний психолого-педагогического и предметно-методического цикла. Таким образом, необходимо уточнение сущности профессиональной компетентности через анализ ее частных видов.

Мы считаем, что в качестве одного из таких компонентов выступает историко-математическая подготовка, которая осуществляется преимущественно в рамках курса истории математики. Необходимость формирования историко-математической компетентности обусловлена целым рядом обстоятельств (изменение социально-экономической ситуации, социальный заказ на выпускника, умевающего применять знания в новой ситуации, недостаточность подготовки учителей к формированию математической компетентности школьников, не разработанность проблемы подготовки студентов к формированию историко-математической компетентности студентов педагогических вузов в теоретических исследованиях). С общих позиций историко-математическую компетентность учителя математики можно определить как культуру мышления, основанную на историко-математических знаниях. На теоретическом уровне – это овладение научным стилем мышления, основанным на принципе историзма; на практическом уровне – умение проектировать и конструировать процесс обучения математике, формулирования и творческого решения задач в области педагогики, психологии и методики обучения математике с учетом исторического развития науки.

Определим понятие «историко-математическая компетентность», его структуру, содержательное наполнение компонентов историко-математической компетентности, выделим критерии и уровни сформированности историко-математической компетентности.

Выделим компоненты историко-математической компетентности.