

О. Шпенглер [4]: Материя - это «тело идеи». Здесь можно сказать, что:

1) Связанная информация - это «идея» в том случае, когда она выражает свойства собственного «тела-материи-формы».

2) Свободная информация - это «идея» в том случае, когда она свойства собственного «тела» не выражает, а выражает свойства несобственного - какого-либо другого («чужого»), «тела».

Связанная информация, как прообраз образа-свободной информации, является, очевидно, не менее важной, чем свободная (без прообраза нет образа).

И ещё, - связанная информация является не менее важной, чем свободная, также и потому, что её понятие представляет собой то, что, как уже отмечалось, именуют *истиной*. В этой связи свободная информация является лишь *оценкой* истины, - таковой, отделимой от истины погрешностями - концептуальной Δ_k (именуемой в метрологической литературе «неопределённостью») и методически-аппаратурной Δ_m (об этимологии и сущности понятия «погрешность» см. в [6]).

А далее следует принять во внимание известный тезис Н. Винера: «Информация - это обозначение (кодировка - А.Б.) содержания, полученного из внешнего мира».

Тогда, - с учётом этого, а также введённого выше понятия связанной информации, будет логичным определить информацию не, как это принято сейчас, - «сведения», а шире.

Информация, - это *кодированное* представление бытия, или кодированное бытие

Здесь, - кодированное бытие с использованием таких кодировок, как:

1) «Человеческая», «ноо» [искусственная, «арт» (соответствующая техногенному восприятию) и естественная (соответствующая физиологическим восприятию и ощущению). И, таким образом, субъективная]. Та, что выше выражала («проявляла во-вне») сведения и была атрибутом свободной информации.

2) Природная [(закрытая для пользователя, «овеществлённая») и, таким образом, объективная]. Та, что может быть проявлена только посредством техногенного и физиологических восприятия и ощущения. Та, что является атрибутом связанной информации.

Третьей кодировки быть не может - неоткуда взять.

А это значит, что в природе имеют место всего две (и только две) сущностные разновидности информации - *связанная* (соответствующая природной кодировке) и *свободная* (соответствующая кодировке человеческой, «ноо»)

А далее отметим, что сущность обеих этих разновидностей информации представляется («видится», *моделируется* человеком), как совокупность (&) их *семантики* (содержания) и *формы этой семантики* (синтаксис), которые, как, таким образом, антропогенные модели информации, представляют собой свойства [б] информации.

Таким образом, информация, как некое качество, обладает двумя сущностными свойствами - *семантикой* и *формой семантики*

где семантика информации (о чём-либо) отвечает на вопрос *ЧТО?* есть это «что-либо», а форма семантики (синтаксис) информации - отвечает на вопрос *КАК?* есть это «*ЧТО?*».

Пример сущностных свойств свободной информации. Семантика - «пять» (как сущность феномена счёта «один, два, три, четыре, пять»). Форма семантики (синтаксис) - код двоичный, или восьмеричный, или десятичный и т.д. Материальный носитель этого кода - полупроводниковый регистр.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Лурия А.Р. Ощущения и восприятия. - М.: Изд-во МГУ, 1975.
2. Бондаревский А.С. Метрология информационных операций. Основания теории рисков // Электронная техника. Серия 3 «Микроэлектроника». - Вып. 1 (150). - 1996.
3. Вернадский В.И. Очерки геохимии. - М.: Наука, 1983.
- 4 Шпенглер О. Закат Европы. - Новосибирск: Наука, 1993.
5. Лосев А.Ф., Тахо-Годи А.А. Платон, Аристотель. - М.: Молодая гвардия, 1993.
6. Бондаревский А.С. Информационная экспликация категорий качества и свойства // Материалы настоящей конференции.

КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ СТЕРЕОИЗОМЕРОВ 2,4,5-ТРИАЛКИЛЗАМЕЩЕННЫХ 1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНОВ

Валиахметова О.Ю.¹, Бочкор С.А.¹,
Кузнецов В.В.²

¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет

²Институт 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 нами была подробно изучена применимость квантово-химических методов к определению структурных и геометрических характеристик молекул циклических борных эфиров [10,11], а также исследована относительная устойчивость стереоизомеров 2,4,5-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов [12,13]. Целью настоящей работы является теоретическое исследование маршрутов конформационной изомеризации молекул индивидуальных стереоизомеров 2,4,5-триметил- и 2,4-диметил-5-изопропил-1,3,2-диоксаборинанов **1** и **2** с помощью неэмпирических (RHF//STO-3G и 3-21G) методов в рамках пакета HyperChem [14].

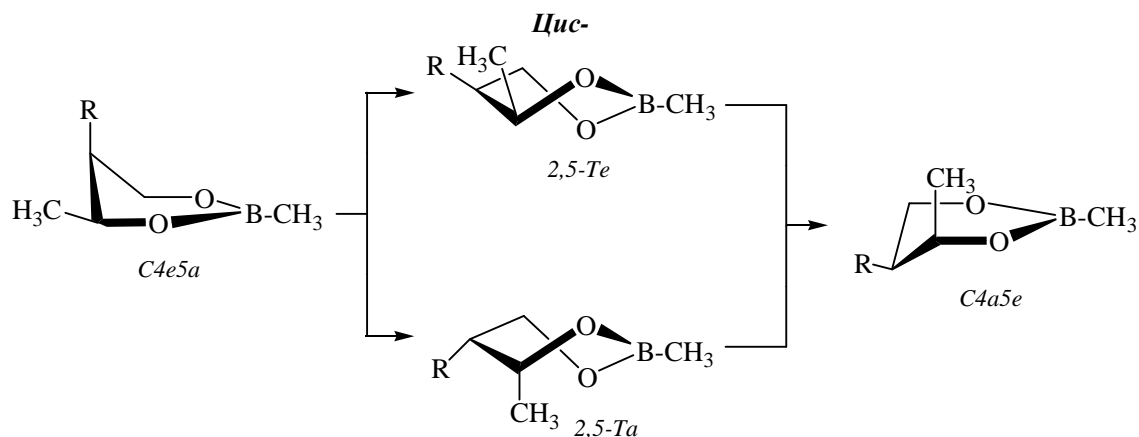
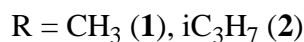
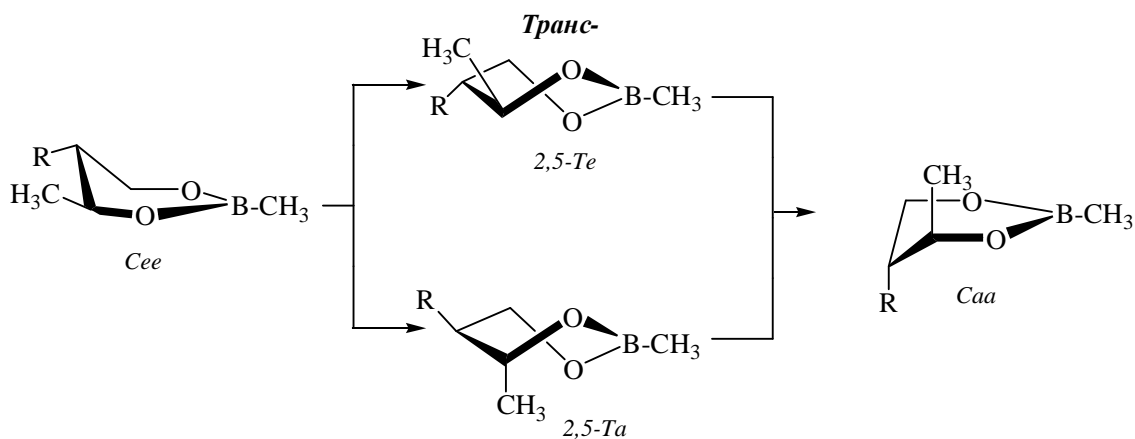
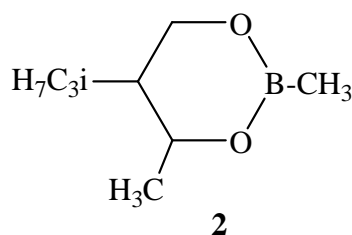
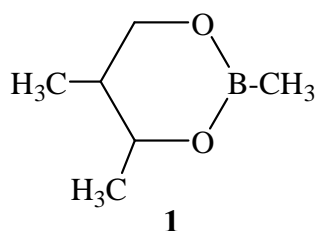


Таблица 1. Относительная стабильность минимумов и максимумов на ППЭ эфиров 1 и 2

| Соединение | Метод расчета | ΔE (ккал/моль) | | | | | |
|----------------|---------------|------------------------|------------|--------------|--------------|---------------|---------------|
| | | <i>Cee</i> | <i>Caа</i> | <i>C4a5e</i> | <i>C4e5a</i> | <i>2,5-Te</i> | <i>2,5-Ta</i> |
| 1-транс | RHF//STO-3G | 0 | 1.1 | - | - | 7.0 | 7.3 |
| | RHF//3-21G | 0 | 0.6 | - | - | 8.2 | 8.2 |
| 1-цис | RHF//STO-3G | - | - | 0 | 0.1 | 8.1 | 9.1 |
| | RHF//3-21G | - | - | 0 | 0.1 | 9.4 | 10.4 |
| 2-транс | RHF//STO-3G | 2.3 | 0 | - | - | 6.8 | 6.1 |
| | RHF//3-21G | 3.6 | 0 | - | - | 9.1 | 7.5 |
| 2-цис | RHF//STO-3G | - | - | 0 | 2.8 | 13.3 | 12.7 |
| | RHF//3-21G | - | - | 0 | 2.0 | 14.1 | 13.2 |

Обнаружено, что, как и для 4-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов [15], конформационная изомеризация молекул *цис*- и *транс*-изомеров эфиров **1** и **2** может проходить по двум маршрутам, включающим переходные состояния *2,5-Te* и *2,5-Ta*.

Полученные данные (таблица) свидетельствуют об энергетической предпочтительности формы *C4a5e* для *цис*-изомеров исследованных соединений. В случае эфира **1** конформеры *C4a5e* и *C4e5a* практически вырождены по энергии. Для *транс*-изомеров диэкваториальная форма *Cee* эфира **2** заметно искажена в сторону *полукресла* и, в отличие от эфира **1**, менее стабильна, чем диаксиальный конформер *Caа*. Различия в энергии между переходными состояниями *2,5-Te* и *2,5-Ta* при использованных методах расчета составляют от 0 до 1.0 ккал/моль. При этом увеличение конформационного размера алкильного заместителя у атома С-5 кольца приводит к возрастанию относительной стабильности формы *2,5-Ta*; для молекул эфира **2** последняя в рамках использованных расчетных приближений более выгодна, нежели альтернативная конформация *2,5-Te*. В то же время самый устойчивый конформер *транс*-изомера – за исключением результатов STO-3G для эфира **2** – стабильнее наиболее устойчивого конформера *цис*-формы.

Таким образом, анализ конформационных превращений индивидуальных стереоизомеров 2,4,5-алкилзамещенных 1,3,2-диоксаборинанов указывает на заметное влияние объема заместителя у атома С-5 кольца на конформационное поведение молекул исследованных соединений и относительную высоту потенциальных барьеров интерконверсии.

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 аминокспиртов, Дис. докт. хим. наук, Уфа, 2002.
3. Kliegel W. Die Pharmazie. – 1972. – Bd. 27, №1. – S.1-14.
4. Кузнецов В.В. // Изв. АН. Сер. хим. – 2005. - № 7. – С.1499-1507.

5. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Современные наукоемкие 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 наукоемкие технологии – 2006. - №2. – С. 71-72.

12. Кузнецов В.В. // ЖОХ. – 2000. – Т.70, вып.1. – С.71-75.

13. Кузнецов В.В., Алексеева Е.А., Худяков В.В., Левшов Ю.А. // ЖОХ. – 2002. – Т.72, вып.3. – С.429-433.

14. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.

15. Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А., Кузнецов В.В. // Современные наукоемкие технологии – 2008. - №2. – С.140-142.

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ КОНФОРМЕРОВ 2-МЕТИЛ-5-НИТРО-1,3,2- ДИОКСАБОРИНАНА

Валиахметова О.Ю.¹, Бочкор С.А.¹,
Кузнецов В.В.²

¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет

²Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН

Шестичленные циклические эфиры борных кислот – замещенные 1,3,2-диоксаборинаны – являются удобными модельными соединениями для изучения влияния гетероатомов на изменение конформационных характеристик гетероаналогов циклогексана [1,2]. Особый интерес представляют эфиры, содержащие полярные заместители в