

ков или гелей. В результате получают вполне «жизнеспособные» трехмерные изделия.

Таким образом, информационная операция «Воспроизведение» осуществляет обратный переход от горизонтальной плоскости, где повелебно хозяйничает «свободная» информация, к вертикальной, в которой перешедшая в «связанное» состояние информация лишь присутствует.

Отметим, что для информационной операции «Воспроизведения» отсутствует область «Информация» на уровне ВСЕОБЩЕГО, по той причине, что всегда происходит перевод лишь «частного» в материальное. Поэтому левая часть рисунка отличается от правой. А.С. Бондаревский левую часть рисунка на уровне всеобщего назвал «Косно- и биосферой», а правую часть, по аналогии, следует называть «Ноосферой», т.е. сферой созданной за счёт общественной практики человека.

Работы А.С. Бондаревского по информационной тематике имеют длинную предысторию [4], и он считает, что не может быть взаимного отображения «материи» на «информацию» на уровне ВСЕОБЩЕГО (перечёркнутая на рисунке пунктирная стрелка взаимного перехода между «материей» и «информацией»). Причина в том, что для такого отображения необходимо, чтобы системная сложность отображающего (в данном случае «Информации») была бы не менее отображаемого, а в данном случае это «материя», т.е. «все сущее». Главной особенностью представлений данного автора является и то, что работа с информацией предполагает наличие субъекта (деятели), который «запрашивает» материю и она ему «отвечает». Работа с информацией происходит по цепочке: информационная операция «Восприятия», затем ин-

формационная операция «Переработка», далее информационная операция «Воспроизведение». При этом, информация из «связанной» переводится в «свободную» (информационная операция «Восприятия»), затем тем или иным образом трансформируется (информационная операция «Переработка»), и далее опять из «свободной» переводится в «связанную» (информационная операция «Воспроизведение»). Наличие информационной операции между ««связанная» информацией – «связанная» информация» не предусматривается, т.к. считается, что взаимодействие «вещей в себе» между собой не даёт никаких корреляций на «информацию».

Кроме информационных операций в работах А.С. Бондаревского приведено много и других интересных моментов (тетрада Темникова-Розенберга, канонические формы, Абсолютная информация и т.д.), но попытка отразить их на предложенной схеме существенно усложнила бы картину.

Список литературы

1. Бондаревский А.С. Информационные операции: понятие, канонические классы и виды // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2011. – № 5. – С. 20–31. – URL: http://www.rae.ru/upfs/?section=content&op=show_article&article_id=1499 (дата обращения 1 мая 2011 года)
2. Бондаревский А.С. Информационные операции: свойства, применимость свойств // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2011. – № 3. – С. 27–42. – URL: http://www.rae.ru/upfs/?section=content&op=show_article&article_id=1421 (дата обращения 1 мая 2011 года)
3. Бондаревский А.С. Аксиоматика точности информационных операций // Фундаментальные исследования. – 2008. – № 6. – С. 11–25. – URL: http://www.rae.ru/fs/?section=content&op=show_article&article_id=7780964 (дата обращения 1 мая 2011 года)
4. Бондаревский А.С. Интеграция и синтез информационных знаний на основе метрологии. – URL: <http://www.electronics.ru/issue/1998/1/2> (дата обращения 1 мая 2011 года)

Физико-математические науки

ОБ ОСНОВНЫХ СВОЙСТВАХ БЕСКОНТУРНЫХ ГРАФОВ

Белаш А.Н.

Северо-Кавказский государственный технический университет, Ставрополь, e-mail: itswork2@mail.ru

Бесконтурным называется ориентированный граф, не содержащий контуров. Контур – это замкнутый путь в орграфе.

Согласно проведенным исследованиям в области бесконтурных графов, были выделены основные, присущие им свойства:

1. Бесконтурный граф содержит хотя бы одну входную вершину и хотя бы одну выходную вершину.

2. Матрица смежности бесконтурного графа содержит хотя бы одну нулевую строку и один нулевой столбец.

3. Вершины бесконтурного графа могут быть разбиты на непересекающиеся подмноже-

ства V_0, V_1, \dots, V_n так, что все дуги имеют вид (v, w) , где $v \in V_{i-1}$, а $w \in V_j, j \geq i, i = 1, \dots, n$.

4. Вершины бесконтурного графа могут быть занумерованы следующим образом:

а) номер начала дуги строго меньше номера ее конца, то есть для дуги (i, j) имеет место неравенство $i < j$;

б) номер начала дуги строго больше номера ее конца, то есть для дуги (i, j) имеет место неравенство $i > j$.

5. Вершины бесконтурного графа могут быть занумерованы так, что его матрица смежности может иметь вид треугольной матрицы.

6. Носитель графа определяется однозначно, если в орграфе не существует многоходовых контуров, то есть контуров с двумя или более вершинами, в которые заходят дуги извне контура.

7. В бесконтурном графе есть единственная вершина база, состоящая из всех его входных вершин.

8. В бесконтурном графе есть единственная вершина контр база, состоящая из всех его выходящих вершин.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА 2-ИЗОПРОПИЛ-1,3,2-ДИОКСАБОРИНАНА

¹Брусилковский Ю.Э., ^{2,3}Кузнецов В.В.

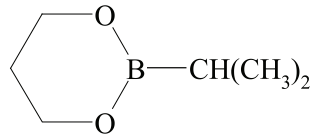
¹Физико-химический институт им. А.В. Богатского НАН Украины, Одесса;

²Уфимский государственный авиационный технический университет;

³Уфимский государственный нефтяной технический университет, e-mail: kuzmaggy@mail.ru

Интерес к структурным исследованиям шестичленных циклических эфиров борных кислот связан как с особенностями их строения, так и с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1-6]. Ранее [7, 8] были выявлены основные колеба-

тельные частоты в ИК и КР спектрах замещенных 1,3,2-диоксаборинанов. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование колебательного спектра 2-изопропил-1,3,2-диоксаборинана (I) с помощью неэмпирического квантово-химического приближения HF/6-31G(d) в рамках программного обеспечения HyperChem [9].



I

Исследовались колебательные частоты, связанные с гетероатомным фрагментом кольца. Все они принадлежат к так называемой области «отпечатков пальцев» молекулы. Полученные результаты представлены в таблице.

Основные колебательные частоты соединения I

Частота, см ⁻¹	Интенсивность, %	Отнесение	Частоты из экспериментальных ИК и КР спектров, см ⁻¹ [8]
671	11	Внеплоскостные деформационные колебания фрагмента СВО ₂ (δ СВО ₂)	673 (ср), ИК
713	4	Симметричные валентные колебания ВО ₂ (ν _s ВО ₂)	732 (с), КР; 730 (о. сл), ИК
1201	36	Смешанные колебания фрагмента СОВС	1203 (с), ИК
1221	15	Смешанные колебания фрагмента (СО) ₂ ВС	1220 (сл), ИК
1238	100	Смешанные колебания фрагмента СС ₂ О ₂ ВС	1230 (сл), ИК
1274	66	Смешанные колебания фрагмента СОВОС	1270 (с), ИК
1346	91	Валентные колебания ВС (ν В-С)	1337 (с), ИК
1427	38	Асимметричные валентные колебания ВО ₂ (ν _{ас} ВО ₂)	1420 (с), ИК

Примечание: с – сильная, ср. – средняя, сл. – слабая, о.сл. – очень слабая.

При определении расчетных колебательных мод использовалась процедура масштабирования с коэффициентом 0.8953, соответствующим уровню теории HF/6-31G(d) [10].

Выявленные моды свидетельствуют о заметном вкладе смешанных колебаний, в которых участвуют фрагменты гетероциклического кольца, в общий спектр. При этом для колебаний ν_s ВО₂ (КР) и δ СВО₂ (ИК) наблюдается хорошее соответствие расчетных и экспериментальных значений частот. Вместе с тем установлены и существенные расхождения с прежними отношениями колебаний в ИК спектре соединения I. Так, значение частоты ν В-С на основании данных литературы относилось к полосе при 1203 см⁻¹ [8], однако согласно результатам моделирования эта полоса отвечает смешанным колебаниям фрагмента СОВС (валентным и деформационным), а колебания ν В-С в экспериментальном ИК спектре проявляются в более высокочастотной области в виде интенсивной полосы при 1337 см⁻¹. Помимо этого асимметричным валентным колебаниям

ν_{ас} ВО₂ отвечает полоса не при 1327 см⁻¹ [8], а при 1420 см⁻¹.

Рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой 1,3,2-диоксаборинанового кольца и могут быть использованы для идентификации и подтверждения структуры соединений этого класса.

Список литературы

- Грень А.И., Кузнецов В.В. Химия циклических эфиров борных кислот. – Киев: Наукова думка, 1988. – 160 с.
- Кузнецов В.В. // Изв. РАН. Сер. хим. – 2005. – № 7. – С. 1499.
- Кузнецов В.В. Успехи органического катализа и химии гетероциклов. – М.: Химия, 2006. – С. 336.
- Bhat N.G., Caga-Anan Z., Leija R. // Tetrahedron Lett. – 2005. – Vol. 46, № 31. – P. 5109.
- Marciniak B., Jankowska M., Pietranzuk C. // Chem. Commun. – 2005. – № 5. – P. 663.
- Murata M., Oda T., Watanabe S., Masuda J. // Synthesis. – 2007. – № 3. – P. 351.
- Кузнецов В.В., Грень А.И. // Докл. АН УССР. Сер. Б. – 1984. – № 7. – С. 39.
- Кузнецов В.В., Алексеенко Л.И., Стайков А.И., Грень А.И. // Укр. хим. ж. – 1988. – Т. 54, № 12. – С. 1315.
- HyperChem 7.01. Trial version. – www.hyper.com.
- Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem. – 1996. – Vol. 100, №41. – P. 16502.