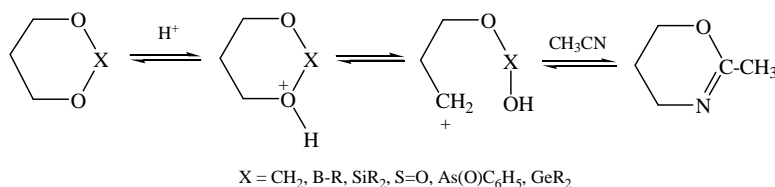


Радиоактивность и радиоактивные элементы

ОТНОСИТЕЛЬНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ
ОКСОНИЕВЫХ ИОНОВ 4-ФЕНИЛ-1,3-
ДИОКСАНАКурамшина А.Е.¹, Бочкор С.А.¹, Кузнецов В.В.²¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет²Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН

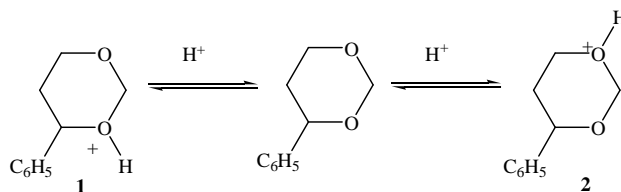
При протонировании 1,3-диоксанов - ценных в практическом отношении кислородсодержащих гетероаналогов циклогексана, - а также других 1,3- и 1,3,2-гетероциклов образуются циклические оксониевые ионы. Последние являются интермедиатами в многочисленных гетеролитических реакциях, катализируемых кислотами, в результате которых образуются сложные эфиры,



Полученные данные выявили необходимость оценки относительной стабильности протонированных форм замещенных 1,3-диоксанов, литературные сведения о которых весьма фрагментарны [6,7]. В этой связи целью настоящей работы является исследование минимумов на

1,3-диола, 5,6-дигидро-1,3-оксазины и другие ценные продукты органического и нефтехимического синтеза [1,2]. Вместе с тем в условиях эксперимента оксониевые ионы можно обнаружить лишь при температурах ниже -50⁰С, что затрудняет использование физико-химических методов для определения тонких особенностей их структуры. В этой связи весьма актуальным становится изучение строения и конформационного поведения данных частиц с помощью квантово-химических методов. В частности, указанный подход оказался весьма плодотворным при анализе механизмов реакций 1,3-диоксанов и 1,3-диокса-2-гетероциклогексанов с нитрилами, где циклические оксониевые ионы образуются уже на первой стадии реакции [2-5].

поверхности потенциальной энергии (ППЭ) оксониевых ионов 4-фенил-1,3-диоксана **1** и **2** с помощью полужемпирического (AM1) и неэмпирического (HF//STO-3G) методов в рамках программного обеспечения HyperChem [8].

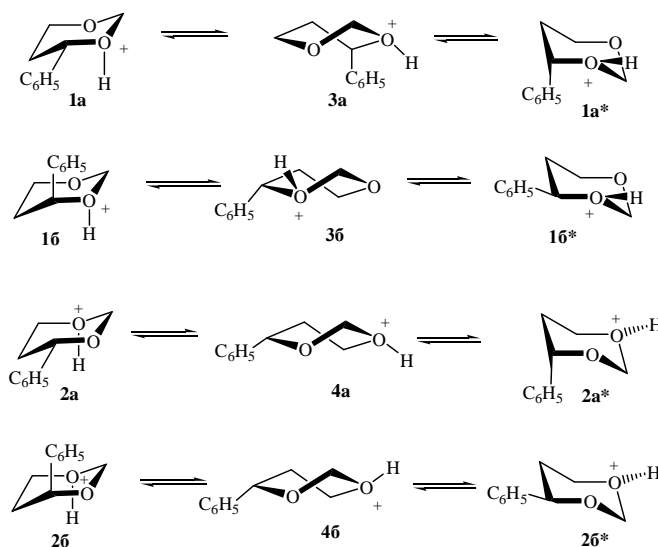


Известно [9,10], что наиболее стабильными минимумами на ППЭ самого 4-фенил-1,3-диоксана являются конформеры *кресла* с экваториальной (*Ke* - главный минимум) и аксиальной (*Ka*) ориентацией фенильного заместителя. В этой связи для оксониевых ионов **1** и **2** возможно существование восьми различных конформеров

кресла (**1a-б**, **1a*-б***, **2a-б**, **2a*-б***). Они могут превращаться друг в друга через промежуточные формы: *1,4-твист* **3a-б** и **4a-б**, - также отвечающие минимумам на ППЭ. Относительные энергии всех рассматриваемых конформеров представлены в таблице.

Таблица 1. Относительная стабильность оксониевых ионов 1-4 (ккал/моль)

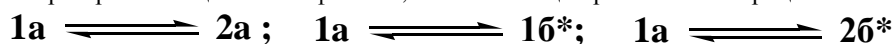
Методы	1a	1a*	3a	1б	1б*	3б	2a	2a*	4a	2б	2б*	4б
AM1	0	5.3	2.1	3.3	4.2	3.1	6.0	3.7	8.7	4.9	10.9	10.9
STO-3G	0	5.1	4.4	3.8	1.4	2.9	5.1	8.4	9.0	7.2	6.9	10.2



Полученные данные свидетельствуют об энергетической предпочтительности иона **1a**. Это соответствует ранее полученным результатам конформационного анализа оксониевого иона незамещенного 1,3-диоксана: наиболее устойчивым при прочих равных условиях является конформер с аксиальной ориентацией протона [7]. В нашем случае при наличии заместителей в кольце самым устойчивым является ион, несущий заряд на соседнем с замещенным углеродом атоме кислорода (**1a** по сравнению с **2a**). Эти результаты согласуются с данными эксперимента о преимущественном раскрытии цикла 4-фенил-1,3-

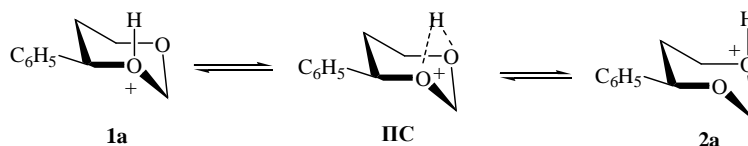
диоксана по связи C⁴-O³ в кислотно-катализируемой реакции с нитрилами [2-5]. В то же время известно, что гидролиз, алкоголиз, а также реакции с тиолами и сероводородом протекают не столь однозначно [1].

Наиболее лабильны формы **26*** и **46**. Из остальных конформеров самыми устойчивыми являются **3a** (AM1) и **16*** (STO-3G). В этой связи представляет интерес оценить вероятность прямого внутримолекулярного протонного обмена между атомами кислорода кольца без изменения конформации цикла, то есть исследовать энергию активации равновесных процессов:



Результаты показывают, что первое из них проходит с относительно высоким активационным барьером:

$$\Delta E^{\ddagger} = 41.2 \text{ (AM1) и } 36.2 \text{ (STO-3G) ккал/моль}$$



Учитывая, что само протонирование 1,3-диоксанов является практически безбарьерным [1,2], можно сделать вывод о малой вероятности протекания этого процесса даже при относительно небольшой концентрации протонов. Взаимопревращения **1a** ↔ **16*** [$\Delta E^{\ddagger} = 8.0$ (AM1) и 3.1 ккал/моль (STO-3G)], а также **1a** ↔ **3a** [$\Delta E^{\ddagger} = 3.1$ (AM1) и 6.9 ккал/моль (STO-3G)] и **3a** ↔ **1a*** [$\Delta E^{\ddagger} = 7.4$ (AM1) и 8.2 ккал/моль (STO-3G)] сравнимы по энергии и вполне могут конкурировать друг с другом. Можно предположить, что активационные барьеры остальных процессов: **16** ↔ **16***, **2a** ↔ **2a*** и **26** ↔ **26*** - практически не отличаются от установленных для превращения **1a** ↔ **1a***. В то же время результаты компьютерного моделирования свидетельствуют о невозможности прямого равновесия между формами **1a** и **26***.

Таким образом, детальный анализ конформационных превращений оксониевых ионов **1** и **2**, образующихся на начальной стадии гетеролитических реакций, указывает на возможность неоднозначного раскрытия кольца 4-фенил-1,3-диоксана в кислотно-катализируемых процессах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Итоги науки и техники. Технология органических веществ. Т.5. Химия и технология 1,3-диоксациклоалканов / Д.Л. Рахманкулов, Р.А. Караханов, С.С. Злотский и др. // М.: ВИНТИ, 1979. - 288 с.
2. Кузнецов В.В. Автореф. дисс. докт. хим. наук. - Уфа, 2002. - 47 с.
3. Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии. - 2000. - Т.36, вып. 7. - С.1097-1098.

4. Кузнецов В.В. // Теорет. эксперим. химия. - 2000. - Т.36, № 3. - С.159-161.
5. Кузнецов В.В. // Изв. АН. Сер. хим. - 2005. - № 7. - С.1499-1507.
6. Курамшина А.Е., Мазитова Е.Г., Кузнецов В.В. // Современные наукоемкие технологии - 2006. - №2. - с.80-82.
7. Мазитова Е.Г., Курамшина А.Е., Кузнецов В.В. // Журн. орг. химии. - 2004. - Т.40, вып.4. - С.615-616.
8. HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.
9. Кузнецов В.В., Цеплин Е.Е., Хвостенко О.Г. // XX Укр. конф. по орг. химии. Тез. докладов. Одесса, Астропринт, 2004. - Ч.1. - С.236.
10. Внутреннее вращение молекул / под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса. М.: Мир, 1975. - С.355.

Формирование личности в условиях социальной нестабильности

САМОАКТУАЛИЗАЦИЯ ЛИЧНОСТИ СТУДЕНТА В ПРОЦЕССЕ ПОДГОТОВКИ ЭКОНОМИСТОВ

Смирнова Т.Л.

*Северская государственная технологическая
академия*

Северск, Россия

В теории становления личности самоактуализация рассматривается как стремление человека к непрерывному развитию индивидуальности, эффективная реализация его системы потенциалов в процессе деятельности для достижения общественного признания. В ВУЗе в процессе подготовки экономистов через четко выстроенную и организованную образовательную среду моделируются такие значимые характеристики самоактуализации студента как индивидуальность, стремление к большей свободе, процесс достижения целостности, личностный и профессиональный рост, самостоятельность, самоуважение, общественное одобрение или порицание. Для развития базовых качеств самоактуализации студентов, лежащих в основе формирования профессиональных компетенций специалиста квалификации «экономист», может использоваться интегральный комплекс методов активизации учебного процесса, с преобладанием активных методов обучения как прогрессивной технологии современного образовательного процесса. Примером могут быть такие методы активного обучения студентов: деловая игра, проблемно-ситуационное моделирование, групповое обучение, «кейс» методы и другие.

На развитие самоактуализации студента в образовательном процессе влияют основные факторы, такие как экзогенные и эндогенные. К экзогенным факторам самоактуализации студента относятся стандарты, по которым оценивается его поведение, такие как система ценностей, стереотипы, мотивация, интеллект, знания, умения, навыки, стиль жизни, социальный статус, общественное признание и другие. К эндогенным факторам самоактуализации студента относятся: личностная уникальность, чувство самоуважения, иерархия потребностей, рациональность, самоконтроль, свобода, потребность в общении, образ выбранной профессии, самоидентификация, образ

себя и другие. Через элементы образовательного процесса в ВУЗе студент участвует в реализации своей модели самоактуализации в рамках своей траектории индивидуального развития.

Критерием самоактуализации специалиста, получившего высшее образование по квалификации «экономист» является степень его готовности к профессиональной деятельности, самостоятельность и ответственность в решении исследовательских, творческих, практических задач, развитие личных, интеллектуальных способностей и социально значимых качеств. В процессе образования корректируется модель самоактуализации студента через организацию системы получения специальных знаний и первичных навыков по выбранной специальности. Качество образования, полученное студентом в ВУЗе, определяет степень сформированной и потенциальной самоактуализации экономиста. В образовательном процессе эффективность управления познавательной деятельностью студента является важным аспектом реализации модели его самоактуализации. Другой стороной формирования самоактуализации студента квалификации «экономист» является многоуровневая непрерывная организация этапов процесса его самообразования, направленных на формирование профессиональной мобильности, развитие саморефлексии и исследовательских навыков, раскрытие творческого потенциала, индивидуальных способностей и становление личности.

В процессе образования экономисты приобретают социально-психологическую компетентность, умение эффективно взаимодействовать с окружающими, высокий уровень общей и интеллектуальной культуры, возможности оценки альтернативного выбора для решения нестандартных ситуаций, готовность к риску, уверенность и целеустремленность, высокую работоспособность, знание своих сильных и слабых сторон, знание индивидуальных различий людей, умение управлять своими эмоциями, понимать жизненные ситуации и принимать решения. Самоактуализация студента в процессе получения квалификации «экономист» в ВУЗе сопровождается накоплением и развитием человеческого капитала, формированием активной личностной позиции и ценностей в рамках учебной, научной,