

3. Внутреннее вращение отдельных фрагментов парафинового остова незначительно сказывается на интенсивности полос в спектрах, однако частоты крутильных колебаний воспроизводятся лишь для трансконформаций относительно связи С–С.

4. Изменение длин валентных связей и значений валентных углов для парафинового фрагмента находится в границах, приведенных в монографии [9] для парафиновых углеводородов, и не сказывается на положении полос валентных и деформационных колебаний алкильных групп.

#### **Библиографический список**

1. Браун, П. А. Введение в теорию колебательных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : ЛГУ, 1983. – 223 с.
2. Грибов, Л. А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул / Л. А. Грибов, В. А. Дементьев. – М. : Наука, 1981. – 356 с.
3. Мясоедов, Б. Ф. Фрагментарные методы расчета ИК-спектров фосфорорганических соединений / Б. Ф. Мясоедов, Л. А. Грибов, А. И. Павлючко // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47, № 1. – С. 449–456.
4. Пулин, В. Ф. Исследование динамики молекулярных соединений различных классов / В. Ф. Пулин, М. Д. Элькин, В. И. Березин. – Саратов : СГТУ, 2002. – 546 с.
5. Свердлов, Л. М. Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 550 с.
6. Шагидуллин, Р. Р. Атлас ИК-спектров фосфорорганических соединений / Р. Р. Шагидуллин, А. В. Чернова, В. С. Виноградова, Ф. С. Мухаметов. – М. : Наука, 1984. – 336 с.
7. Элькин, П. М. Квантовомеханический анализ эффектов ангармоничности в многоатомных молекулах : дис. ... канд. физ.-мат. наук / П. М. Элькин. – Саратов, 2005.
8. Элькин, П. М. Методы оптической физики в экологическом мониторинге фосфорорганических соединений / П. М. Элькин, В. Ф. Пулин, А. С. Кладиева // Вестник СГТУ. – 2007. – Вып. 2, № 2 (25). – С. 176–181.
9. Frisch, M. J. Gaussian 03. Revision B.03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh PA : Gaussian Inc, 2003.
10. Organisation for the prohibition of chemical weapons. – 2001. – Cert. № DB/007.

УДК 539.193/.194;535/.33/34

#### **КОНФОРМАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ПЯТИЧЛЕННЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

**П.М. Элькин, Е.А. Эрман, А.П. Смирнов**

*Проведены модельные квантовые расчеты геометрической структуры тиюфана. Предложена некомпланарная конформация пятичленного цикла соединения.*

**Ключевые слова:** модель, пятичленный цикл, молекула, тиюфан.

**Key words:** model, five-member cycle, molecule, thiofane.

Пятичленные циклические соединения, исследованию геометрической структуры и колебательных спектров которых уделено особое внимание в монографии [6], до сих пор вызывают научный интерес. Действительно, целый класс полициклических соединений молекулярной биологии и фармацевтики содержит в качестве фрагментов пятичленные циклы.

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

Открытым остается вопрос: является ли пятичленный циклический фрагмент молекул плоским? Это касается таких известных соединений, как циклопентан ( $C_5H_{10}$ ) и циклопентен ( $C_5H_8$ ). В периодической литературе приводится много доводов в доказательство каждой версии.

Если учесть, что теоретическое исследование силового поля перечисленных молекул базировалось на методике решения обратных задач [1], то достоверность результатов расчета гармонических параметров адиабатического потенциала следует подтвердить неэмпирическими квантовыми расчетами. Отметим, что в монографии [6] интерпретация колебательных состояний всех пятичленных циклических соединений осуществлялась в предположении компланарности атомов пятичленного фрагмента.

В данном сообщении на примере молекулы тиюфана ( $SC_4H_8$ ) описана методика конформационного анализа геометрической структуры рассматриваемого класса циклических соединений.

Молекула тиюфана ( $SC_4H_8$ ) принадлежит к классу пятичленных азациклических соединений. При анализе колебательных спектров молекулы, описанном в монографии [6] предполагалось, что атомы кольца ( $SC_4$ ) лежат в одной плоскости, а потому в хорошем приближении можно считать, что тиюфан принадлежит группе симметрии  $C_{2v}$ . При этом исходное приближение для гармонических силовых постоянных было заимствовано из парафинов и метилмеркаптана ( $CH_3SH$ ), молекул, явно не родственных по электронной структуре.

Поскольку представленный в монографии [6] эксперимент по ИК- и КР-спектрам молекулы в жидкой фазе не согласуется с правилами отбора для группы симметрии  $C_{2v}$ , авторы высказали предположение, что имеет место незначительное отклонение от размещения атомов кольца в одной плоскости.

Часть экспериментально наблюдаемых полос тиюфана, отнесенных к валентным и деформационным колебаниям связей  $CH$ , не удалось разделить на компоненты. Отсутствуют данные по колебательным спектрам дейтерозамещенных соединений.

В этих условиях решение обратной колебательной задачи нельзя считать корректным [1]. Более того, наличие большого числа атомов водорода делает необходимым решение задачи в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний [2]. Такой подход у исследователей стал реальным с появлением соответствующих программных продуктов

В качестве информационной технологии, позволяющей решать задачу с учетом ангармонических резонансов, выбран программный комплекс "Gaussian-3" [10]. Его возможности для построения структурно-динамических моделей пятичленных циклических соединений продемонстрированы в публикациях [7–9].

Оптимизация геометрии и расчет параметров адиабатического потенциала осуществлялась в рамках метода функционала плотности DFT/b3LYP для 12-ти различных базисных наборов – от 6–31 G(d) до 6–311 ++G(d,p).

**Моделирование геометрии и колебательных состояний.** Экспериментальными данными по геометрической структуре тиюфана мы не располагаем. В качестве исходного приближения для оптимизации геометрии принималась плоская конфигурация пятичленного кольца с различной конформацией фрагмента  $CH_2$  относительно кольца.

Если исходная геометрия молекулы принадлежала группе симметрии  $C_{2v}$ , то согласно алгоритму оптимизации, заложенному в технологии "Gaussian-3", минимум адиабатического потенциала отыскивается для заданной молекулярной симметрии. Однако в этом случае квантовые расчеты фундаментальных колебаний плохо согласуются с экспериментальными данными и выдают отрицательные частоты ( $< -230\text{ см}^{-1}$ ). Напомним, что именно симметрия  $C_{2v}$  была принята для тиюфана в монографии [6] при проведении теоретического анализа колебательных спектров и оценке гармонического силового поля.

Оптимизация геометрии, когда в исходном приближении за счет различной конформации фрагментов  $CH_2$  относительно плоскости пятичленного кольца понижалась симметрия молекулы, приводила к одинаковому результату: компланарность кольца нарушалась, молеку-

лярная конфигурация стремится к симметрии  $C_2$ . При этом исчезают отрицательные частоты, в гармоническом приближении удается интерпретировать экспериментальные данные по колебательным спектрам. Согласие с экспериментом заметно улучшает операция масштабирования [3]. Результаты такого численного эксперимента представлены в таблицах 1, 2.

Выбор базиса расчета на величине геометрических параметров сказывается в третьем знаке мантиссы для валентных связей и во втором для валентных углов.

По сравнению с тиофеном ( $SC_4H_4$ ) имеет место заметное увеличение длин валентных связей пятичленного кольца:  $R(C_1C_2) = 1,53 \text{ \AA}$  (1,37  $\text{\AA}$ );  $R(C_1C_5) = 1,53 \text{ \AA}$  (1,42  $\text{\AA}$ );  $R(S_3C_2) = 1,85 \text{ \AA}$  (1,71  $\text{\AA}$ ), что согласуется с закономерностью «длина – порядок связи» [3].

Таблица 1

**Влияние атомного базиса квантового расчета на интерпретацию колебательных состояний тиофана**

| Тип Сим | Форма колеб  | $\nu_{\text{exp}}$ [1] | Минимум |                    |       |      | Максимум |                    |       |      |
|---------|--------------|------------------------|---------|--------------------|-------|------|----------|--------------------|-------|------|
|         |              |                        | $\nu_h$ | $\nu_{\text{anh}}$ | ИК    | КР   | $\nu_h$  | $\nu_{\text{anh}}$ | ИК    | КР   |
| A       | qCH          | 2967                   | 3109    | 2954               | 1,25  | 145  | 3133     | 2976               | 1,82  | 164  |
| A       | qCH          | 2948                   | 3069    | 2930               | 21,51 | 168  | 3094     | 2957               | 28,8  | 255  |
| A       | qCH          | 2948                   | 3051    | 2929               | 0,54  | 149  | 3075     | 2966               | 4,46  | 205  |
| A       | qCH          | 2913                   | 3028    | 2903               | 22,4  | 149  | 3052     | 2936               | 27,6  | 211  |
| A       | $\beta$ HCH  | 1460                   | 1510    | 1467               | 0,13  | 3,37 | 1539     | 1497               | 1,03  | 10,2 |
| A       | $\beta$ HCH  | 1439                   | 1485    | 1445               | 2,98  | 12,5 | 1513     | 1475               | 5,26  | 22,7 |
| A       | $\beta$ CCCH | 1382                   | 1361    | 1326               | 0,28  | 0,64 | 1382     | 1347               | 1,10  | 3,03 |
| A       | $\beta$ CCCH | 1255                   | 1309    | 1274               | 2,58  | 0,56 | 1326     | 1293               | 5,10  | 1,47 |
| A       | $\beta$ CCCH | 1212                   | 1240    | 1209               | 1,93  | 4,06 | 1255     | 1225               | 2,81  | 6,03 |
| A       | $\beta$ CCCH | 1136                   | 1155    | 1130               | 0,95  | 8,92 | 1168     | 1143               | 1,24  | 14,3 |
| A       | $\beta$ CCCH | 1031                   | 1048    | 1026               | 0,00  | 4,54 | 1059     | 1037               | 0,03  | 8,63 |
| A       | QCC          | 1031                   | 1043    | 1017               | 0,17  | 1,57 | 1053     | 1031               | 0,34  | 4,06 |
| A       | QCC          | 880                    | 887     | 869                | 1,42  | 4,74 | 895      | 877                | 1,94  | 5,50 |
| A       | $\beta$ CCCH | 822                    | 834     | 821                | 2,47  | 2,50 | 842      | 830                | 2,68  | 3,37 |
| A       | QCS          | 683                    | 675     | 660                | 3,56  | 20,8 | 682      | 668                | 4,10  | 27,4 |
| A       | $\gamma$ CCS | 468                    | 475     | 467                | 0,13  | 3,46 | 476      | 469                | 0,19  | 4,42 |
| A       | $\gamma$ CCC | 295                    | 288     | 277                | 0,01  | 0,13 | 291      | 282                | 0,02  | 0,25 |
| B       | qCH          | 2967                   | 3109    | 2955               | 30,9  | 17,3 | 3133     | 2977               | 46,3  | 22,1 |
| B       | qCH          | 2948                   | 3077    | 2931               | 43,2  | 51,8 | 3102     | 2954               | 65,1  | 60,3 |
| B       | qCH          | 2948                   | 3052    | 2932               | 44,3  | 3,65 | 3075     | 3024               | 54,5  | 7,46 |
| B       | qCH          | 2913                   | 3029    | 2906               | 25,4  | 48,1 | 3052     | 2965               | 31,08 | 60,2 |
| B       | $\beta$ HCH  | 1460                   | 1495    | 1455               | 1,04  | 1,39 | 1524     | 1483               | 1,96  | 2,82 |
| B       | $\beta$ HCH  | 1439                   | 1489    | 1444               | 4,10  | 9,71 | 1516     | 1473               | 6,89  | 17,6 |
| B       | $\beta$ CCCH | 1325                   | 1341    | 1310               | 0,20  | 0,44 | 1359     | 1327               | 0,76  | 2,64 |
| B       | $\beta$ CCCH | 1255                   | 1289    | 1258               | 18,8  | 5,17 | 1302     | 1272               | 25,6  | 9,46 |
| B       | $\beta$ CCCH | 1196                   | 1224    | 1194               | 4,86  | 4,93 | 1236     | 1208               | 6,62  | 9,03 |
| B       | $\beta$ CCCH | 1036                   | 1075    | 1055               | 0,60  | 1,85 | 1090     | 1068               | 2,90  | 5,47 |
| B       | $\beta$ CCCH | 956                    | 971     | 953                | 2,71  | 6,53 | 980      | 963                | 3,37  | 8,78 |
| B       | $\gamma$ CCS | 880                    | 897     | 875                | 0,38  | 0,02 | 905      | 889                | 4,91  | 1,47 |
| B       | $\beta$ CCCH | 880                    | 896     | 879                | 0,71  | 0,01 | 904      | 883                | 2,61  | 0,89 |
| B       | QCS          | 632                    | 667     | 652                | 1,46  | 3,97 | 676      | 662                | 1,70  | 5,09 |
| B       | $\gamma$ CCC | 518                    | 519     | 511                | 1,08  | 1,12 | 522      | 515                | 1,75  | 1,50 |
| B       | $\gamma$ CCS | –                      | 115     | 112                | 2,17  | 0,12 | 121      | 114                | 2,41  | 0,70 |

Примечание. Частоты колебаний ( $\nu$ ) в  $\text{см}^{-1}$ . Интенсивности в ИК-спектрах в Км/Моль, в спектрах КР в  $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$

# СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Расчетные значения валентных углов кольца имеют значения:  $A(C_2C_1C_5) = 106,7^\circ$  ( $112,5^\circ$ ),  $A(C_1C_2S_3) = 106,2^\circ$  ( $111,5^\circ$ ),  $A(C_2S_3C_4) = 93,6^\circ$  ( $92,2^\circ$ ). В скобках приведены экспериментальные значения для тиюфена [6].

О степени отклонения от копланарности пятичленного цикла можно судить по следующим значениям двухгранных углов  $D(5, 1, 2, 3) = -37,3^\circ$ ,  $D(2, 1, 5, 4) = 48,6^\circ$ ,  $D(1, 2, 3, 4) = 13,5^\circ$ . Незначительными, как это предполагалось в монографии [6], их назвать трудно. Конформация фрагментов  $CH_2$ , согласно квантовых расчетов определяется углами:  $D(6, 1, 5, 4) = -70,3^\circ$ ,  $D(7, 1, 5, 4) = -37,9^\circ$ ,  $D(5, 1, 2, 8) = -156,6^\circ$ ,  $D(5, 1, 2, 9) = 81,1^\circ$

Модельный гамильтониан для анализа колебательных состояний, записанный в системе нормальных колебательных координат  $Q_s$ , линейно связанных с декартовыми координатами ядер, имеет вид [2]

$$H^{(v)} = \frac{1}{2} (P_s^2 + (v_s Q_s)^2) + F_{srt} Q^s Q^r Q^t + F_{srtu} Q^s Q^r Q^t Q^u \quad (1)$$

Здесь  $v_s$  частоты гармонических колебаний;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и квартичные силовые постоянные.

Таблица 2

Ангармоническое смещение фундаментальных состояний в тиюфене, в  $cm^{-1}$

| Тип<br>Сим. | Xii<br>Мин | Xii<br>Макс | Xi<br>Мин | Xi<br>Макс | Тип<br>сим. | Xii<br>Мин | Xii<br>Макс | Xi<br>Мин | Xi<br>Макс |
|-------------|------------|-------------|-----------|------------|-------------|------------|-------------|-----------|------------|
| A           | -43,87     | -41,40      | -115,0    | -112,6     | B           | -39,28     | -36,52      | -119,6    | -117,2     |
| A           | -34,45     | -27,29      | -109,7    | -103,9     | B           | -28,21     | -25,31      | -121,8    | -119,2     |
| A           | -33,45     | -26,85      | -94,07    | -70,05     | B           | -38,83     | -36,51      | -81,65    | -12,82     |
| A           | -45,81     | -40,59      | -73,10    | -60,95     | B           | -30,48     | -29,87      | -82,41    | -54,83     |
| A           | -12,36     | -0,04       | -37,46    | -30,09     | B           | -34,90     | -17,00      | -22,39    | -4,99      |
| A           | -12,56     | -6,99       | -31,93    | -25,35     | B           | -40,99     | -17,39      | -26,81    | 0,38       |
| A           | -15,72     | -15,35      | -19,54    | -18,17     | B           | -7,04      | -6,67       | -25,61    | -24,32     |
| A           | -5,47      | -5,08       | -29,59    | -27,31     | B           | -3,14      | -2,82       | -28,85    | -27,17     |
| A           | -2,43      | -2,34       | -29,22    | -27,97     | B           | -3,67      | -3,22       | -25,94    | -23,85     |
| A           | -3,34      | -3,27       | -22,35    | -21,30     | B           | -1,46      | -1,14       | -21,90    | -19,21     |
| A           | -1,53      | -1,30       | -22,54    | -20,23     | B           | -2,81      | -2,60       | -15,53    | -14,16     |
| A           | -4,43      | -2,61       | -21,39    | -18,30     | B           | -2,69      | -0,41       | -19,50    | -13,50     |
| A           | -2,33      | -2,15       | -16,06    | -15,01     | B           | -2,59      | -0,54       | -18,92    | -13,99     |
| A           | 0,29       | 0,53        | -13,00    | -11,28     | B           | -2,82      | -1,97       | -12,39    | -11,23     |
| A           | -2,15      | -1,76       | -12,53    | -11,80     | B           | -0,84      | -0,32       | -8,15     | -5,95      |
| A           | -0,50      | -0,46       | -6,83     | -6,54      | B           | -8,04      | -6,16       | 0,11      | 2,14       |
| A           | -10,22     | -9,52       | -2,61     | 0,71       | –           | –          | –           | –         | –          |

Сдвиг фундаментальных полос колебаний (табл. 2) определяется ангармоническими поправками  $X_{ii} = 2 \chi_{ii}$  и  $X_i = 1/2 \sum \chi_{ir}$ , получаемыми из известного выражения для энергий колебательных состояний [11]:

$$E^{(v)} = v_s(n_s + g_s/2) + \chi_{sr}(n_s + 1/2)(n_r + 1/2)(1 + 1/2\delta_{sr}) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \chi_{ii} &= 1/4 \{ 6F_{iii} - 15(F_{iij})^2/v_i - \Sigma(F_{ijj})^2/v_j(8v_i^2 - 3v_j^2)/(4v_i^2 - v_j^2) \} \\ \chi_{ij} &= 1/4 \{ F_{ijj} - 6(F_{iij}F_{ijj}/v_i) - 4F_{ijj}^2[v_i/(4v_i^2 - v_j^2)] - \Sigma(F_{iik} - (F_{kij})^2/v_k) \\ &\quad - F_{ijk}v_k(v_k^2 - v_i^2 - v_j^2)/[(v_i + v_k + v_k)(v_i + v_k - v_k)(v_i - v_k + v_k)(v_i - v_k - v_k)] \} \end{aligned} \quad (3)$$

Выражения для ангармонических постоянных в соотношении (3) содержат резонансные частотные функции (знаменатели), которые ограничивают применение этих соотношений в случае, если энергетическая щель между фундаментальным состоянием  $v_i$  и обертоном  $v_j + v_k$  меньше определенного порогового значения. В технологии “Gaussian-3” по умолчанию это  $10 \text{ cm}^{-1}$ . В этом случае расщепление взаимодействующих состояний осуществляется по схеме

Ферми [4]. Это основная причина того, что ангармонические смещения фундаментальных полос для разных базисных наборов могут отличаться. Нередко на этом основании делается вывод о преимуществе того или иного базиса, хотя значения соответствующих кубических и квартичных силовых постоянных, входящих в выражения (3), от выбора базиса существенно не зависят. Изменение порогового значения щели нередко снимает остроту вопроса о базисном наборе при анализе колебательных состояний молекулярного соединения.

В тиюфене учет ангармонических резонансов по схеме [4] при расчете в любом базисе дает расщепление резонирующих состояний не превышающее границ, получаемых по соотношениям (2, 3). Хотя количество таких резонансов доходит до 18, все они касаются в основном деформационных колебаний связей СН. Смещение колебательных состояний при этом не превышает  $25\text{ см}^{-1}$ .

Значения ангармонических поправок, рассчитанных в различных базисах, представлены в таблице 2. Видно, что для низкочастотной области спектра ими можно пренебречь. Ангармонизму подвержены частоты валентных и деформационных колебаний связей СН. Выбор базиса для этих колебаний существенного значения не имеет. Исключение составляет валентное колебание связи СН типа симметрии В, что наглядно проявилось в таблице 1 для колебания  $\nu_{20}$ . Расчеты в базисах 6-31 G(d), 6-31 +G(d), 6-31 ++G(d) превышают экспериментальные значения до  $70\text{ см}^{-1}$ .

1. Неэмпирические квантовые расчеты геометрии пятичленного цикла тиюфена указывают на принадлежность молекулы к группе симметрии  $C_2$ , а атомы кольца некомпланарны.

2. Предложено отнесение фундаментальных полос. Показано, что согласие с экспериментальными данными можно достичь при решении механической колебательной задачи во втором порядке адиабатической теории возмущения.

3. Дана оценка параметров адиабатического потенциала тиюфана, выяснено влияние базисного набора на разброс значений квадратичных, кубических и квартичных силовых постоянных. Для высокочастотного диапазона колебательного спектра предпочтение следует отдать базисам 6-311 G. Учет поляризационных и диффузионных эффектов в базисах существенно влияние на смещение фундаментальных полос не оказывает.

4. Качественная оценка интенсивностей полос в спектрах ИК и КР в любом базисе сохраняется.

#### **Библиографический список**

1. *Березин, В. И.* Прямые и обратные задачи спектроскопии циклических и комплексных соединений : дис. ... д-ра физ.-мат. наук / В. И. Березин. – Саратов, 1983. – 336 с.
2. *Браун П. А.* Введение в теорию колебательных спектров / П. А. Браун, А. А. Киселев. – Л. : ЛГУ, 1983. – 232 с.
3. *Краснощеков, С. В.* Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля / С. В. Краснощеков, Н. Ф. Степанов // Журнал физической химии. – 2007. – Т. 81, № 4. – С. 680–689.
4. *Лисица, М. П.* Резонанс Ферми / М. П. Лисица, А. М. Яремко. – Киев : Наукова думка, 1984. – 250 с.
5. *Минкин, В. И.* Теория строения молекул / В. И. Минкин. – Ростов н/Д. : Феникс, 1997. – 386 с.
6. *Свердлов, Л. М.* Колебательные спектры многоатомных молекул / Л. М. Свердлов, М. А. Ковнер, Е. П. Крайнов. – М. : Наука, 1970. – 559 с.
7. *Элькин, П. М.* Ангармонический анализ колебательных спектров пятичленных гетероциклических соединений. / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 2. – С. 153–156.
8. *Элькин, П. М.* Квантов-химический расчет нормальных колебаний молекул замещенных пятичленных халькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма анализ структуры

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

и спектров пятичленных циклических соединений / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.

9. *Элькин, М. Д.* Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний пятичленных циклических соединений / М. Д. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Вестник Саратовского государственного технического университета. – 2006. – № 4, вып. 4. – С. 38–44.

10. *Frisch, M. J.* Gaussian 03. Revision A.7 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel [et al]. – Pittsburgh : Gaussian Inc, 2003.

11. *Nielsen H. H.* The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared / H. H. Nielsen // Handbook der Physik. – 1957. – Vol. 37. – P. 173–313.

УДК 681.586'326.001.057

### ФУНКЦИОНАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОРРЕКЦИИ АДДИТИВНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ПОГРЕШНОСТИ

**О.М. Шиккульская, Т.П. Мухина**

*Предложена концепция блочно-иерархического моделирования физического принципа действия новых технических решений, которая позволяет синтезировать цепи физического принципа действия сложной структуры, что значительно расширяет возможности автоматизированного поискового проектирования. На основе предложенной концепции реализована модель коррекции аддитивной температурной погрешности.*

**Ключевые слова:** концепция блочно-иерархического моделирования, физический принцип действия, новое техническое решение, коррекция.

**Key words:** the Concept of blochno-hierarchical modelling, a physical principle of the operation, new technical solution, correction.

Для автоматизации поиска новых технических решений в области датчиковой аппаратуры необходимо использовать унифицированное представление происходящих в них преобразований. Так как при разработке преобразователей используются результаты многих научных направлений, уровень целесообразной обобщенности при поиске их принципов действия и морфологических свойств должен быть достаточно высок. Наиболее успешно решает эту задачу теория энергоинформационных моделей цепей (ЭИМЦ) и аппарат параметрических структурных схем (ПСС) [2]. В соответствии с энерго-информационным методом любая конструкция преобразователя может быть исследована с помощью модели, описывающей ее физический принцип действия (ФПД) в виде совокупности цепей различной физической природы, взаимодействующих между собой. Цепь любой физической природы представляет собой соединение элементов преобразования, основанных на унификации представления информации о различных классах физических явлений. Все элементарные преобразования делятся на внутрицепные и межцепные. Элементарные явления определенной физической природы (оптической, электрической, тепловой, магнитной, механической, диффузионной, акустической и т.д.) представляют собой внутрицепные эффекты. Для внешнего описания процесса служат величины. Они характеризуют внешнее воздействие на цепь данной природы и ее реакцию на это воздействие. Параметры характеризуют относительную неизменность материальной среды, в которой протекают физические процессы.