

3. *Haettenschwiler, P.* Neues anwenderfreundliches Konzept der Entscheidungs-unterstützung. Gutes Entscheiden in Wirtschaft, Politik und Gesellschaft / P. Haettenschwiler. – Zurich : Hochschulverlag AG, 1999. – С. 189–208.
4. *Power, D. J.* A Brief History of Decision Support Systems / D. J. Power. – Режим доступа: <http://dssresources.com>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. англ.
5. *Power, D. J.* What is a DSS? / D. J. Power // The On-Line Executive Journal for Data-Intensive Decision Support. – 1997. – № 3.
6. *Режим доступа:* <http://www.cfin.ru/software/market/me.shtml>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
7. *Режим доступа:* <http://www.curs.ru/services/kurs.shtml>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
8. *Режим доступа:* <http://www.deol.ru/users/DecisionSupporter/projects/iasctc.html>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
9. *Режим доступа:* <http://www.kasatka.ru/>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
10. *Режим доступа:* <http://www.logist-ics.ru/solutions.htm>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.
11. *Режим доступа:* <http://www.microsoft.com/rus/dynamics/ax/overview.mspx>, свободный. – Заглавие с экрана. – Яз. рус.

УДК 539.193/.194;535/.33/34

### **КОНФОРМАЦИОННЫЕ МОДЕЛИ ЦИКЛОПЕНТАНА И ЦИКЛОПЕНТЕНА**

**А.П. Смирнов, П.М. Элькин**

*Проведены модельные квантовые расчеты геометрической структуры циклопентана и циклопентена. Установлена некомпланарная геометрическая структура пятичленного цикла соединений.*

*Ключевые слова:* геометрическая структура, циклопентан, циклопентен, некомпланарная структура, пятичленный цикл.

*Key words:* geometric structure, cyclopentane, cyclopentene, nonplanar conformation, five-member cycle.

Дискуссия относительно компланарности углеродного фрагмента циклопентана ( $C_5H_{10}$ ) и циклопентена ( $C_5H_8$ ) продолжается в литературе до настоящего времени. Мнения спектроскопистов по этому вопросу разошлись.

Аргументы в пользу плоской структуры пятичленного фрагмента, принадлежащего группам симметрии  $D_{5h}$  и  $C_{2v}$  для циклопентана и циклопентена соответственно, приведены в известной монографии [6]. По мнению авторов, это характер поведения ряда полос в колебательных спектрах, согласие с электронографическими и микроволновыми данными по геометрической структуре соединений.

Предложенная в монографии [6] теоретическая интерпретация фундаментальных колебательных состояний и оценка электрооптических параметров циклопентана и циклопентена дана в предположении плоской структуры углеродного кольца.

Исходные значения молекулярных параметров были заимствованы из парафинов, а затем подвергались варьированию до удовлетворительно совпадения с экспериментом, как это принято в рамках методики решения обратных спектральных задач. Возможные последствия такого подхода, связанного с рядом обременительных предположений, подробно исследованы в диссертации [1].

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

Однако, по мнению тех же авторов, часть экспериментально наблюдаемых спектроскопических эффектов свидетельствует о «небольшой изогнутости углеродного кольца» (к примеру, нечеткое выполнение правил произведения для наблюдаемых частот циклопропана и его дейтерированного аналога  $C_3D_{10}$ ). Имеет место расхождение между вычисленными и экспериментальными данными для значений термодинамических функций циклопентана (в предположении симметрии  $D_{5h}$ ).

Выяснить конформационные особенности соединений можно на основании модельных расчетов параметров адиабатического потенциала, поскольку геометрия отдельных молекулярных фрагментов наглядно проявляются в их колебательных спектрах. Такие возможности предоставляют неэмпирические квантовые методы расчета электронной структуры соединений в адиабатическом приближении теории строения молекул [5].

Цель данной работы – анализ информационных структурно-динамических моделей циклопентана и циклопентена в рамках метода функционала плотности DFT/b3LYP [18] с различными базисными наборами [17].

**Анализ моделей.** Оптимизация геометрии осуществлялась в рамках конформационных моделей различной исходной симметрии. При этом для пятичленного углеродного фрагмента исходной предполагалась симметрия  $D_{5h}$  и  $C_{2v}$  для циклопентана и циклопентена соответственно, а симметрия исследуемого соединения задавалась положением фрагментов  $CH_2$  относительно плоскости пятичленного кольца.

Для исходных конфигураций циклопентана и циклопентена, принадлежащих группам симметрии  $D_{5h}$  и  $C_{2v}$  соответственно, симметрия оптимизированной геометрии сохранялась, но в расчетах спектра фундаментальных колебаний появлялись отрицательные значения, по абсолютной величине превышающие  $200\text{ см}^{-1}$ . Ошибки численных методов технологии «Gaussian» к такому результату не приводят [17], а тот факт, что это касается неплоских колебаний углеродного фрагмента, позволяет сделать вывод о некомпланарности атомов пятичленного цикла.

Все остальные исходные модели, отличающиеся положениями фрагментов  $CH_2$  относительно плоского пятичленного цикла, симметрией не обладали, а в процессе оптимизации геометрии приводили к конфигурации молекул с симметрией, близкой к группе  $C_2$  с точностью до третьего знака мантииссы в значениях координат подобных атомов.

Этот факт указывает на наличие глобального минимума адиабатического потенциала, соответствующего рассчитанной геометрической структуре. Для такой неплоской конфигурации атомов углеродного пятичленного фрагмента хорошо воспроизводятся частоты фундаментальных колебаний в низкочастотной области спектра, интерпретируемые как колебания типа  $\rho$  и  $\chi$  – изменение углов между связями  $CH$  и  $CC$  соответственно и плоскостями  $ССС$  пятичленного углеродного кольца. Наглядно это иллюстрируется в табл. 1, 2. Отметим, что полученные результаты согласуются с теорией «псевдповращения» Питцера [6], согласно которой атомы углерода пятичленного фрагмента периодически последовательно выходят из плоскости кольца.

Степень изогнутости углеродного кольца как предмет дискуссии в монографии [6] можно оценить из результатов проведенной оптимизации геометрии для конфигурации молекул циклопентана и циклопентена с симметрией  $C_2$ .

Для циклопентана значения длин валентных связей равны:  $R_{CC} = 1,54\text{--}1,56\text{ \AA}$ ,  $R_{CH} = 1,09\text{--}1,1\text{ \AA}$ ; валентные углы углеродного кольца  $A_{CCC} = 103,3\text{--}106,1^\circ$ ; двугранные углы углеродного кольца  $D(1, 2, 3, 4) = 12,8^\circ$ ,  $D(2, 1, 5, 4) = 41,5^\circ$ ,  $D(3, 4, 5, 1) = -33,5^\circ$ . Отступление от тетраэдричности для углов  $A_{CCH}$  и  $A_{HCH}$  не превышает  $3,8^\circ$ . Эти данные хорошо согласуются с электронографическим экспериментом [6], учитывая математические модели теории для оценки геометрических параметров такого эксперимента [7, 9, 10].

Для циклопентена –  $R_{C1C2} = 1,51\text{ \AA}$ ,  $R_{C2C3} = 1,54\text{ \AA}$ ,  $R_{C1=C5} = 1,33\text{ \AA}$ ,  $R_{CH} = 1,09\text{--}1,1\text{ \AA}$ ; валентные углы углеродного кольца  $A(2, 1, 5) = 112,1^\circ$ ,  $A(1, 2, 3) = 103,1^\circ$ ,  $A(2, 3, 4) = 105,6^\circ$ ; двугранные углы углеродного кольца  $D(6, 1, 5, 13) = 0$ ,  $D(1, 2, 3, 4) = 19,1^\circ$ ,  $D(3, 4, 5, 1) =$

12,4°. Отступление от тетраэдричности для углов фрагмента CH<sub>2</sub> не превышает 2,8°. Положение связи C<sub>1</sub>H<sub>7</sub> относительно кольца определяет двугранный угол D (6, 1, 2, 3) = 169,9°.

Таблица 1

**Влияние базиса на интерпретацию колебательного спектра цикlopentана**

Форма колебан.	Циклопентан-C <sub>5</sub> H <sub>10</sub>								C <sub>5</sub> D <sub>10</sub>		
	ν <sub>exp</sub> [1]	ν <sub>h</sub>	ν <sub>anh</sub>	ИК	КР	ν <sub>h</sub>	ν <sub>anh</sub>	ИК	КР	ν <sub>exp</sub> [1]	ν <sub>m</sub>
		Минимум				Максимум					
Тип симметрии А											
q <sub>CH</sub>	2966	3075	2927	18,9	119	3099	2949	25,3	123	2214	2227
q <sub>CH</sub>	2966	3071	2936	11,9	184	3093	2950	16,2	277	2214	2203
q <sub>CH</sub>	2966	3045	2932	54,8	122	3066	2938	59,2	143	2125	2156
q <sub>CH</sub>	2878	3027	2866	0,01	73,9	3049	2966	0,27	95,1	2125	2135
q <sub>CH</sub>	2878	3009	2868	17,1	140	3036	2906	20,4	198	2125	2112
β <sub>НСН</sub>	1462	1524	1481	0,03	0,80	1553	1520	0,16	9,81	1155	1184
β <sub>НСН</sub>	1453	1499	1461	0,94	1,88	1527	1490	3,83	4,47	1155	1154
β <sub>НСН</sub>	1453	1488	1454	0,08	13,2	1516	1480	0,21	26,6	1124	1125
β <sub>ССН</sub>	1316	1350	1315	0,02	0,17	1371	1339	0,79	0,57	1064	1086
β <sub>ССН</sub>	1295	1339	1301	0,03	0,87	1362	1322	0,08	2,45	1050	1072
β <sub>ССН</sub>	1243	1283	1262	0,87	7,63	1297	1275	0,94	17,8	1021	1014
β <sub>ССН</sub>	1207	1236	1199	0,10	0,41	1252	1212	0,24	1,27	937	935
β <sub>ССН</sub>	–	1180	1147	0,00	4,11	1194	1163	0,01	10,8	874	898
β <sub>ССН</sub>	1020	1040	1013	0,00	6,91	1048	1023	0,00	8,26	778	792
β <sub>ССН</sub>	1004	1003	974	0,42	0,93	1013	988	0,63	2,04	778	771
Q <sub>СС</sub>	896	907	883	1,39	4,09	916	895	2,43	5,31	738	742
Q <sub>СС</sub>	886	881	863	0,35	19,8	889	872	0,57	23,6	–	718
β <sub>ССН</sub>	–	822	840	0,12	0,26	829	845	0,20	0,62	–	674
γ <sub>ССС</sub>	628	620	618	0,07	0,51	621	619	0,17	1,24	–	508
γ <sub>ССС</sub>	283	261	259	0,00	0,06	265	264	0,01	0,22	–	204
Тип симметрии В											
q <sub>CH</sub>	2966	3090	2942	110	48,7	3114	2961	115	53,7	2220	2232
q <sub>CH</sub>	2966	3073	2927	31,7	99,1	3097	2949	33,5	111	2220	2216
q <sub>CH</sub>	2966	3059	2919	38,2	5,56	3084	2935	41,8	7,77	–	2186
q <sub>CH</sub>	2878	3027	2874	51,2	25,1	3050	2894	55,1	32,1	2132	2143
q <sub>CH</sub>	2878	3016	2871	38,7	13,6	3041	2905	40,1	17,7	2132	2136
β <sub>НСН</sub>	1462	1499	1463	2,23	2,00	1527	1490	4,90	3,90	–	1087
β <sub>НСН</sub>	1453	1494	1456	3,21	9,94	1522	1485	4,85	18,7	1064	1075
β <sub>ССН</sub>	1312	1349	1313	0,05	0,12	1371	1334	0,81	0,74	1021	1038
β <sub>ССН</sub>	1283	1321	1277	0,51	4,80	1341	1291	0,77	14,5	–	980
β <sub>ССН</sub>	1283	1310	1276	0,00	0,03	1323	1289	0,00	0,08	943	934
β <sub>ССН</sub>	1207	1227	1188	0,40	4,77	1243	1216	0,60	13,1	802	800
β <sub>ССН</sub>	–	1206	1180	0,22	1,03	1220	1199	0,32	2,39	738	751
β <sub>ССН</sub>	1020	1048	1012	0,02	5,79	1060	1044	0,04	7,51	738	726
Q <sub>СС</sub>	–	973	964	0,96	0,22	981	973	1,26	0,32	1155	1159
Q <sub>СС</sub>	886	902	878	1,36	0,16	910	887	2,52	0,26	1124	1121
β <sub>ССН</sub>	–	868	842	0,50	0,35	876	875	0,76	1,49	–	696
β <sub>ССН</sub>	717	768	782	0,70	0,00	776	788	0,89	0,08	570	563
γ <sub>ССС</sub>	546	553	553	1,03	0,30	553	554	1,24	0,46	438	424
xx	–	36	30	0,00	0,01	40	50	0,01	0,02	–	27

Примечание. Частоты колебаний ν в см<sup>-1</sup>, интенсивности в ИК-спектрах в Км/моль, в КР-спектрах в Å<sup>4</sup>/асм.

Выбор базиса расчета от 6–31 G(p) до 6–311++ G(d, p) на вычисленных значениях геометрических параметров сказывается на третьем разряде мантиссы для валентных связей и на втором разряде для валентных и двугранных углов. Это не выходит за рамки точности

# СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

электронографического или микроволнового эксперимента по определению геометрических параметров молекул.

Влияние выбора базиса расчета на теоретическую интерпретацию спектра фундаментальных колебаний циклопентана и циклопентена продемонстрировано в табл. 1, 2.

Таблица 2

**Влияние базиса на интерпретацию колебательных состояний циклопентена**

Форма Колеб.	V <sub>exp</sub> [1]	v <sub>h</sub>	v <sub>anh</sub>	ИК	КР	v <sub>h</sub>	v <sub>anh</sub>	ИК	КР
		Минимум				Максимум			
<b>Тип симметрии A'</b>									
q <sub>CH</sub>	3066o.c	3188	3052	22,6	161	3213	3077	32,4	188
q <sub>CH</sub>	2958o.c	3090	2941	43,1	77,8	3113	2962	55,6	89,6
q <sub>CH</sub>	2927o.c	3055	2922	55,1	125	3074	2970	67,7	171
q <sub>CH</sub>	2916	3035	2906	5,25	53,6	3055	2966	8,54	67,3
q <sub>CH</sub>	2852o.c	2996	2792	31,2	185	3015	2911	39,2	220
Q <sub>C=C</sub>	1616	1671	1632	1,64	14,1	1702	1663	4,30	34,3
β <sub>НСН</sub>	1468	1508	1470	0,62	5,71	1539	1498	2,79	19,1
β <sub>НСН</sub>	1449	1483	1445	0,70	18,1	1513	1475	1,71	28,1
β <sub>ССН</sub>	1302	1325	1294	0,05	2,69	1347	1317	1,34	3,23
β <sub>ССН</sub>	1207ср	1229	1201	1,24	6,29	1243	1216	2,00	13,3
β <sub>ССН</sub>	1108	1129	1117	0,08	18,5	1140	1127	0,19	22,9
β <sub>ССН</sub>	1048o.c	1068	1046	4,81	0,77	1083	1061	8,49	1,58
β <sub>ССН</sub>	965	972	956	0,59	5,82	981	966	1,33	8,34
Q <sub>СС</sub>	900	902	883	0,35	11,2	909	891	0,62	14,6
Q <sub>СС</sub>	800	820	799	0,46	1,06	828	807	1,03	2,17
ρ <sub>СН</sub>	692o.c	710	700	24,4	1,58	718	707	40,9	9,09
γ <sub>ССС</sub>	603	611	612	10,0	0,91	618	616	15,2	3,57
xx	–	139	117	0,19	0,69	144	135	0,29	0,81
<b>Тип симметрии A''</b>									
q <sub>CH</sub>	3060с	3163	3048	7,84	82,1	3189	3073	12,5	92,2
q <sub>CH</sub>	2902o.c	3043	2903	32,1	116	3062	2922	43,3	129
q <sub>CH</sub>	2852o.c	2997	2814	53,914	59,0	3015	2867	62,4	77,9
β <sub>НСН</sub>	1468	1488	1446	0,22	10,3	1520	1478	2,93	14,5
β <sub>ССН</sub>	1356	1377	1348	0,69	0,28	1398	1368	2,19	0,52
β <sub>ССН</sub>	1297	1317	1287	0,01	1,26	1336	1304	0,45	5,72
β <sub>ССН</sub>	1284	1307	1280	1,69	0,70	1323	1296	2,64	1,70
β <sub>ССН</sub>	1207	1224	1195	0,00	4,92	1240	1211	0,06	12,1
β <sub>ССН</sub>	1113	1149	1128	1,30	0,39	1165	1145	1,64	0,75
β <sub>ССН</sub>	1027	1034	1010	1,52	4,59	1046	1024	2,05	5,94
β <sub>ССН</sub>	965	964	948	0,06	0,11	974	956	0,13	2,33
Q <sub>СС</sub>	904o.c	916	901	5,19	0,18	927	912	7,77	0,32
Q <sub>СС</sub>	–	889	873	2,51	1,23	901	886	4,82	1,56
γ <sub>ССС</sub>	772сл	778	766	0,18	0,82	785	773	0,38	1,19
ρ <sub>СН</sub>	387	390	381	0,05	1,82	393	393	0,07	4,06

Располагая экспериментальными данными по колебательным спектрам дейтерозамещенного циклопентана, можно проверить надежность полученной для циклопентана C<sub>5</sub>H<sub>10</sub> системы гармонических силовых постоянных, решая прямую механическую задачу для молекулы C<sub>5</sub>D<sub>10</sub>, используя поле базовой молекулы. Результаты представлены в последних колонках табл. 1. После операции масштабирования по соотношению  $v_m = v_h(0,9813 - 0,835 \cdot 10^{-6} v_h)$  [2] имеет место хорошее совпадение экспериментальных и теоретически рассчитанных частот фундаментальных колебаний для циклопентана-D<sub>10</sub>.

Данные расчета фундаментальных состояний циклопентана и циклопентена в гармоническом приближении теории молекулярных колебаний (столбец v<sub>h</sub> в табл. 1, 2) указывают на существенное расхождение с экспериментом для высокочастотного диапазона. Естественно,

в первую очередь это касается валентных колебаний связей СН. Причина, на наш взгляд, в пренебрежении ангармонизмом колебаний.

В решении этой проблемы существуют два подхода. Первый подход базируется на привлечении операции масштабирования как методе учета погрешностей квантовых расчетов гармонических силовых полей. Вводимые масштабирующие множители в линейном или квадратичном соотношении подбираются на основании статистической обработки результатов теоретического анализа колебательного спектра, его сопоставления с оптическим экспериментом.

Подробно существующие схемы масштабирования расчетных значений фундаментальных колебаний и системы гармонических силовых полей исследуемых молекулярных соединений освещены в диссертации [2] и публикации [4].

При таком подходе возникает естественный вопрос: является ли операция масштабирования компенсацией ненадлежащего учета электронной корреляции в расчетных методах квантовой механики молекул (квантовой химии) или это метод эмпирического учета ангармонизма колебаний. Ответ на этот вопрос, на наш взгляд, можно получить, осуществляя расчеты параметров адиабатического потенциала исследуемого соединения в ангармоническом приближении.

Для ряда соединений различных классов такие расчеты представлены, к примеру, в публикациях [10–15]. На их основе сделаны выводы, что метод функционала плотности [18], в определенной мере учитывающий электронную корреляцию [9], позволяет оценить систему гармонических силовых постоянных из квантовых расчетов, а операцию масштабирования следует рассматривать как метод учета ангармонизма колебаний.

Для учета влияния ангармонизма воспользуемся модельным гамильтонианом из оригинальной монографии [16].

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

где  $v_s$  – частоты гармонических колебаний;  $Q^a$  – нормальные колебательные координаты, линейно связанные с декартовыми координатами ядер;  $F_{srt}$  и  $F_{srtu}$  – кубические и квартичные силовые постоянные.

Решение уравнения (1) методами теории возмущения приводит к известному выражению для энергий колебательных состояний

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

где  $n_s$  – квантовые числа колебательного состояния,  $\chi_{sr}$  – ангармонические постоянные,  $g_s$  – степень вырождения колебательных координат.

Выражения для ангармонических силовых постоянных, полученных во втором порядке адиабатической теории возмущения, имеют вид

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

Соотношения (3) дают ангармонические поправки для сдвига фундаментальных состояний при учете ангармонизма колебаний:

$$X_{ii} = 2\chi_{ii} \text{ и } X_i = 1/2 \Sigma\chi_{ir}$$

Резонансные частотные функции (знаменатели) в выражениях (3) ограничивают применение этих соотношений в случае малой энергетической щели между фундаментальным состоянием  $v_i$  и обертоном  $v_j + v_k$ .

Условием применимости соотношения (3) в технологии «Gaussian-03», по умолчанию, является значение щели  $v_i - v_j - v_k$  более  $10 \text{ см}^{-1}$ . В противном случае схема (3) в алгоритме, заложенном в технологии «Gaussian-03», заменяется на схему учета резонансов Ферми, предложенную в монографии [3].

$$E = \{(v_i + v_j + v_k) \pm (F_{ijk})^2(1 + \delta_{jk})/2 + ((v_i - v_j - v_k)^2)^{0.5}\}/2 \quad (4)$$

Напомним, что в технологии «Gaussian-03» предусмотрена возможность установления нужного значения энергетической щели для резонирующих колебательных состояний.

---

---

## СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

---

---

Использование технологии «Gaussian-03» с параметрами по умолчанию является основной причиной того, что ангармонические смещения фундаментальных полос для разных базисных наборов могут существенно отличаться. На этом основании зачастую делается вывод о преимуществе того или иного базиса, хотя значения соответствующих кубических и квартичных силовых постоянных, входящих в выражения (3), от выбора базиса зависят несущественно [10–15]. Изменение порогового значения щели нередко снимает остроту вопроса о «лучшем базисном наборе» при анализе колебательных состояний конкретного молекулярного соединения.

Для молекул циклопентана и циклопентена число резонирующих колебательных состояний при щели менее  $10\text{ см}^{-1}$  меняется в пределах от 12 до 23. Расхождение в вычисленных значениях фундаментальных состояний для частот валентных колебаний связей СН, как это следует из табл. 1 и 2, может достигать  $100\text{ см}^{-1}$  в зависимости от выбранного базиса. Лучшее согласие с экспериментом дают базисы 6–311 G(d, p) и 6–311+ G(d, p). При этом влиянием поляризационных (p) и диффузионных эффектов (+,++) можно пренебречь.

Подчеркнем, что эксперимент по колебательным спектрам циклопентана и циклопентена, приведенный в монографии [6], осуществлен для жидкой фазы вещества, поэтому полосы имеют плохое разрешение, растянутые максимумы, размыты. В большей степени это относится к полосам, интерпретированным как валентные колебания связей СН. Для остальных полос выбор базиса расчета принципиального значения для интерпретации колебательных состояний не имеет.

Проведенный численный эксперимент касается свободной молекулы. Сравнение таких расчетов корректнее проводить для газообразной фазы вещества и его паров. Тем не менее имеет место качественное согласие вычисленных и экспериментальных значений интенсивностей колебательных полос. Наиболее интенсивными являются полосы, интерпретированные как колебания связей СН. Характер поведения полос в спектрах ИК и КР в области ниже  $1500\text{ см}^{-1}$ , который послужил аргументом, приведенным в монографии [6], в качестве доказательства плоской структуры углеродного кольца, сохраняется для неплоской модели пятичленного цикла.

1. Неэмпирические квантовые расчеты параметров адиабатического потенциала, интерпретация колебательных состояний циклопентана и циклопентена указывают на неплоскую конформацию углеродного кольца.

2. Хорошего согласия с экспериментом по колебательным состояниям можно достичь, проводя расчеты в ангармоническом приближении теории колебаний.

3. Квантовые расчеты позволяют оценить гармоническое силовое поле исследуемых молекул. Операцию масштабирования следует рассматривать как метод оценки влияния ангармонизма на смещение фундаментальных полос.

### 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. *Березин, К. В.* Квантово-механические модели и решение на их основе прямых и обратных спектральных задач для многоатомных молекул : дис. ... д-ра физ.-мат. наук / К. В. Березин. – Саратов, 2004. – 264 с.
3. *Герцберг, Г.* Электронные спектры и строение многоатомных молекул / Г. Герцберг. – М. : Мир, 1969. – 772 с.
4. *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.
5. *Минкин, В. И.* Теория строения молекул / В. И. Минкин. – Р 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. – 560 с.

7. Элькин, М. Д. Внутримолекулярная динамика и её математическое описание в задачах молекулярной спектроскопии и газовой электронографии / М. Д. Элькин, Э. К. Костерина // Химическая физика. – 1994. – Т. 10, № 1. – С. 38–42.
8. Элькин, М. Д. К вопросу об использовании функции плотности вероятности в ангармонической теории рассеяния электронов молекулами / М. Д. Элькин // Журнал структурной химии. – 1989. – Т. 30, № 6. – С. 33–37.
9. Элькин, М. Д. Кинематическая ангармоничность в электронно-графических исследованиях геометрии молекул // Журнал структурной химии. – 1986. – Т. 27. – С. 42–46.
10. Элькин, М. Д. Колебательные спектры конформеров бензофенона / М. Д. Элькин, Е. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 5. – С. 563–568.
11. Элькин, М. Д. Проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах урацила / М. Д. Элькин, Е. А. Джалмухамбетова, О. Н. Гречухина // Известия Саратовского университета. – 2008. – Т. 8, № 2. – С. 24–30. – (Новая сер. Химия).
12. Элькин, М. Д. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний пятичленных циклических соединений / М. Д. Элькин, М. А. Эрман, В. Ф. Пулин // Вестник Сарат. гос. техн. ун-та. – 2006. – № 4, вып. 4. – С. 38–44.
13. Элькин, П. М. Квантово-химический расчет нормальных колебаний молекул замещенных пятичленных халькоген-гетероциклических соединений с учетом ангармонизма анализ структуры и спектров пятичленных циклических соединений / П. М. Элькин, Е. А. Эрман, О. В. Пулин // Журнал прикладной спектроскопии. – 2009. – Т. 76, № 2. – С. 170–175.
14. Элькин, П. М. Структурно-динамические модели и ангармонический анализ колебательных состояний полихлорзамещенных дибензо-*p*-диоксинов / П. М. Элькин, М. А. Эрман // Журнал прикладной спектроскопии. – 2007. – Т. 74, № 1. – С. 21–24.
15. Элькин, П. М. Теоретический анализ таутомерных форм пурина / П. М. Элькин, О. В. Пулин, Е. А. Джалмухамбетова // Журнал прикладной спектроскопии. – 2008. – Т. 75, № 1. – С. 23–27.
16. Amat, G. Rotation-vibration of polyatomic molecules / G. Amat, H. H. Nielsen, G. Torrago. – N.Y., 1971. – 580 с.
17. Frisch, M. J. Gaussian 03 / M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al. – Pittsburgh, 2003.
18. Yoshida, H. New Approach to Vibrational Analysis of Large Molecules by Density Functional Theory: Wavenumber-Linear Scaling Method / H. Yoshida, K. Takeda, J. Okamura, A. Ehara, H. A. Matsura // J. Phys. Chem. A. – 2002. – Vol. 106, № 14. – P. 3580–3586.

УДК 538.221/681.3.06

### **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ ДОМЕНОВ ВО ВРАЩАЮЩЕМСЯ ПОЛЕ**

**В.В. Смирнов, Е.А. Джалмухамбетова, А.У. Джалмухамбетов**

*Составлены дифференциальные уравнения, описывающие динамику цилиндрического магнитного домена во вращающемся поле и его взаимодействие с точечным дефектом пленки при наличии вязкого трения. На основе численного решения этих уравнений с использованием программного пакета Mathcad моделируются различные сценарии динамики домена. Влияние дефекта описывается гауссовой потенциальной функцией.*

**Ключевые слова:** магнитный домен, ЦМД, доменная граница, магнитостатическая ловушка, моделирование динамики домена.

**Key words:** magnetic domain, magnetic bubble, domain wall, magnetic static trap, modeling of domain dynamic.