для лечения крупного рогатого скота и в др. случаях.

Нельзя не упомянуть о недавней отечественной инновационной разработке, позволившей, в частности создать прибор для диагностики качества сосудистой системы человека с помощью сверхширокополосного измерителя скорости пульсовой волны. Новая технология – сверхширокополосные радары – позволяет реализовать проверку эластичности сосудистой стенки артерий бесконтактно за счет контроля изменения параметров кровотока, протекающего в зоне слабого электромагнитного поля, излучаемого радаром. Одновременно радар позволяет регистрировать другой важный диагностический параметр – вариабильность (изменение) сердечного ритма. Высокая точность измерения достигается за счет очень малой длительности электромагнитных импульсов, излучаемых и принимаемых сверхширокополосным радаром – от единиц наносекунд до десятков пикосекунд.

4. СВЧ-инновации сыграли и еще сыграют важную роль в весьма актуальных научных исследованиях, например электронных свойств твердых тел. Когда тело оказывается в магнитном поле, свободные электроны в нем начинают вращаться вокруг магнитных силовых линий в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля. Частота вращения, называемая циклотронной, прямо пропорциональна напряженности магнитного поля и обратно пропорциональна эффективной массе электрона. Если на твердое тело, в магнитном поле, падает излучение СВЧ-диапазона, то оно сильно поглощается, когда его частота равна циклотронной частоте электрона.

Данное явление называется циклотронным резонансом; оно позволяет измерить эффективную массу электрона. Такие измерения дали много ценной информации об электронных свойствах полупроводников, металлов и металлоидов. Кроме того, с помощью мощных СВЧ генераторов миллиметрового диапазона волн - гиротронов на циклотронной частоте производится нагрев плазмы в термоядерных установках. Излучение СВЧ - диапазона играет важную роль также в исследованиях Космоса.

И это не говоря о «простых» бытовых СВЧ-печках. Нет сомнений в том, что СВЧ-технологии – одни из самых прорывных инноваций прошлого и нынешних веков.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ, ОБРАЗОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЯМИ БОРА

Кузнецов В.В.[1,2]
[1]*Уфимский государственный нефтяной технический университет*
[2]*Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра РАН*
Уфа, Россия

Интерес к структурным исследованиям соединений тригонального бора связан с особенностями их строения (присутствие электроноакцепторного атома бора), наличием ценных фармакологических свойств, а также с использованием в качестве реагентов тонкого органического синтеза [1,2]. Необходимость корректной оценки геометрических и энергетических параметров таких систем и их изменения в присутствии молекул растворителя, а также важная роль компьютерного моделирования в современных структурных исследованиях делают актуальной проблему оценки применимости квантово-химических методов к анализу строения молекулярных комплексов соединений бора.

Настоящая работа посвящена оценке применимости полуэмпирических (AM1, PM3) и неэмпирических [RHF/STO-3G, 3-21G, 6-31G(d)] квантово-химических методов к расчетам энтальпии образования ряда молекулярных комплексов соединений бора и длин донорно-акцепторных связей бор-элемент в рамках программного обеспечения HyperChem [3]. В качестве объектов исследования использованы комплексы ациклических соединений бора с азот-, фосфор- и кислородсодержащими лигандами, для которых известны соответствующие данные эксперимента [4].

Таблица 1.

Расчетные и экспериментальные длины донорно-акцепторной связи в молекулярных комплексах (Å)

№	Соединение	Эксперимент (метод)	Методы расчета (относительная погрешность, %)				
			AM1	PM3	STO-3G	3-21G	6-31G(d)
1	$Me_3N{\cdot}BH_3$	1.609 (МВС) 1.656 (ЭГ)	1.660 (3) (2)	1.661 (3) (0.3)	1.670 (4) (0.8)	1.685 (5) (2)	1.677 (4) (1)
2	$C_5H_5N{\cdot}BH_3$	1.610 (МВС)	1.582 (2)	1.598 (1)	1.646 (2)	1.679 (4)	1.666 (3)
3	$Me_3N{\cdot}BMe_3$	1.698 (МВС)	1.737 (2)	1.705 (1)	1.741 (3)	1.775 (5)	1.827 (8)
4	$Me_2NH{\cdot}BMe_3$	1.656 (РСА)	1.688 (2)	1.681 (1)	1.711 (3)	1.752 (6)	1.764 (7)
5	$Me_3N{\cdot}BF_3$	1.636 (МВС) 1.664 (ЭГ)	1.992(22) (20)	1.717 (5) (3)	1.889(15) (14)	1.641(0.3) (1)	1.677 (3) (1)
6	$Me_2O{\cdot}BF_3$	1.75 (ЭГ)	1.894 (8)	1.722 (2)	1.801 (3)	1.598 (9)	1.703 (3)
7	$Et_3P{\cdot}BF_3$	2.028 (РСА)	2.097 (3)	1.991 (2)	2.661(31)	2.118 (4)	2.083 (3)

Примечание: МВС – микроволновая спектроскопия, ЭГ – электронография, РСА - рентгеноструктурный анализ

Таблица 2.

Расчетные и экспериментальные энтальпии образования молекулярных комплексов (ккал/моль)

№	Соединение	Эксперимент, -ΔH (метод)	Методы расчета (относительная погрешность, %)				
			AM1	PM3	STO-3G	3-21G	6-31G(d)
1	$Me_3N{\cdot}BH_3$	32 (КМ п)	21 (28)	25 (22)	44 (38)	38 (19)	27 (16)
2	$C_5H_5N{\cdot}BH_3$	29 (КМ р)	24 (17)	30 (3)	42 (45)	42 (45)	22 (24)
3	$Me_3N{\cdot}BMe_3$	18 (ГД)	-0.25 (99)	10 (44)	21 (17)	16 (11)	3.3 (82)
4	$Me_2NH{\cdot}BMe_3$	19 (ГД)	8 (59)	16 (16)	27 (42)	20 (5)	8 (58)
5	$Me_3N{\cdot}BF_3$	27 (КМ п)	-2 (107)	59 (119)	15 (44)	52 (93)	25 (7)
6	$Me_2O{\cdot}BF_3$	23 (ГД)	7 (70)	9 (61)	14 (39)	41 (78)	12 (48)
7	$Et_3P{\cdot}BF_3$	19 (ГД)	-26 (237)	-0.4 (102)	1 (95)	14 (26)	7 (63)

Примечание: КМ п (КМ р) – калориметрия в парах (калориметрия в растворе), ГД - газофазная диссоциация

Результаты расчетов длины координационной связи X→B (табл.1) и энтальпии образования комплексов (табл. 2) свидетельствуют о существенном влиянии природы исследуемого аддукта на величину относительной погрешности. В группе боразотных ассоциатов (соединения 1-5) наилучшие результаты расчета длины связи N→B принадлежат методу PM3. С другой стороны, ни один из использованных методов не смог обеспечить достаточно высокую воспроизводимость экспериментальных значений энтальпии образования отмеченных комплексов. Если принять за необходимый уровень точности значение относительной погрешности ≤ 5%, то он был достигнут только в двух случаях (табл.2): PM3 (ассоциат 2) и 3-21G (соединение 4). В случае комплексов с координационной связью O→B и P→B наименьшую погрешность в определении длины связи также дает полуэмпирический расчет в приближении PM3 (табл.1). Минимальная погрешность в расчете энтальпии образования составляет 39% (STO-3G, комплекс 6) и 26% (3-21G, ассоциат 7, табл.2). Таким образом, точность расчета величины ΔH в рамках использованных приближений в целом неудовлетворительна и требует использования других методов расчета.

Данные работ [5,6] дают основание полагать, что более перспективными для расчета энтальпии образования молекулярных комплексов соединений бора являются методы DFT и MP2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Несмеянов А.Н., Соколик Р.А. Методы элементоорганической химии. Бор, алюминий, галлий, индий, таллий. М.: Наука, 1964. 499 с.

2. Михайлов Б.М., Бубнов Ю.Н. Борорганические соединения в органическом синтезе. М.: Наука, 1977. 515 с.

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

4. Ромм И.П., Носков Ю.Г., Мальков А.А. // Изв. АН. Сер. хим. 2007, 1869.

5. Rasul G., Prakash S.G.K., Olah G.A. J. Mol. Struct. Theochem. 2007. V.818. N 1-3. P.65.

6. Plumley J.A., Evanseck J.D. J. Phys. Chem. A. 2007. V.111. N 51. P.13472.

ЛИНГВИСТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ НА БАЗЕ UNIFIED MODELING LANGUAGE

Лосев В.В.
ГОУ ВПО СибГТУ
Красноярск, Россия

Среди приоритетных задач обеспечения функционирования GRID-системы, как архитектурной платформы для распределенных автоматизированных систем управления (АСУ) выделим задачу обмена данными, посредством основной памяти узлов, при взаимодействии прикладных программ с системами управления базами данных (СУБД). С последующим представлением данного метода с помощью информационной модели UML, как лингвистического обеспечения распределенной АСУ.

Рассматривая взаимодействие систем класса SCADA (Supervisory Control And Data Acquisition) с традиционными СУБД, ориентированными на дисковую память, выделим задачу загрузки объекта сущности с целью применения вычислительных процедур со стороны SCADA-системы.

Описание данной модели представлено в виде UML – диаграммы последовательностей Рис.1. Инициатором взаимодействия систем выступает объект *Arc.Trend*, представляющий архивный тренд в SCADA-системе, который, в свою очередь, осуществляет запрос объекта *N.Val.Param*, представляющий n-мерный массив значений параметра технологического процесса (ТП) из таблицы *Val.Param*, с целью последующего представления (визуализации). Объекту *Int.Mng*, представляющему менеджер интерфейса SCADA-системы известно об отсутствии в памяти объекта *N.Val.Param*, рассмотрение данного механизма предполагает UML - диаграмма деятельности. Данное известие влечет за собой попытку обращения к БД. Для реализации поиска объект *Arc.Trend* посылает атрибут *tempr.Val* (значение температуры), как условие поиска, в качестве аргумента операции *getVal.Param ()*.

Следующим действием является создание объектом *Int.Mng* строки SQL-запроса и передачи