

«Компьютерное моделирование в науке и технике»,  
Доминиканская Республика, 17-27 декабря 2014 г.

Технические науки

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
СПЕКТРА КОМБИНАЦИОННОГО  
РАССЕЯНИЯ СВЕТА 4-[(4-ГЕПТИЛОКСИ)  
БЕНЗОИЛОКСИ]БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ**

<sup>1</sup>Брусиловский Ю.Э., <sup>1</sup>Новикова Н.С.,  
<sup>1</sup>Кирименчук Е.Д., <sup>2</sup>Михайлов Г.П.,  
<sup>2,3</sup>Кузнецов В.В.

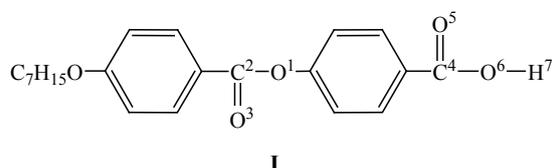
<sup>1</sup>Физико-химический институт  
им. А.В. Богатского, Одесса

<sup>2</sup>Уфимский государственный авиационный  
технический университет

<sup>3</sup>Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
e-mail: kuzmaggy@mail.ru

Интерес к структурным исследованиям бензоилоксикарбоновых кислот и их производных связан как с наличием мезоморфных свойств, так и с возможностью создания на их основе ценных люминесцентных комплексов с редкоземельными элементами [1]. Перспектив-

ность последних для внедрения в качестве активных компонентов жидкокристаллических дисплеев хорошо известна [2-4]. Целью настоящей работы является компьютерное моделирование спектра комбинационного рассеяния света 4-[(4-гептилокси)бензоилокси]бензойной кислоты (**I**) с помощью неэмпирического квантово-химического приближения HF/6-31+G(d) (пакет GAUSSIAN 03 [5]) в рамках метода непрерывного поляризуемого континуума (PCM, растворитель – бензол).



Полученные результаты представлены в таблице.

Основные колебательные частоты соединения I

Частота, см <sup>-1</sup> (интенсивность, Å <sup>4</sup> /a.e.m)	Отнесение	Частоты из экспериментального КР спектра, см <sup>-1</sup>
3060 (166), 3058 (201), 3056 (116)	νC-H аром.	3088, 3081, 3073
2910 (140), 2856 (346)	νCH <sub>3</sub>	2896, 2861
2871 (211)	νCH <sub>2</sub>	2878, 2861
1752 (192)	νC <sup>4</sup> =O <sup>5</sup> + δC <sup>4</sup> O <sup>6</sup> H <sup>7</sup>	1740
1748 (111)	νC <sup>2</sup> =O <sup>3</sup> + δCаром.C <sup>2</sup> O <sup>1</sup>	1735
1614 (99), 1603 (566)	νC-C аром.	1631, 1604
1191 (54)	δC <sup>4</sup> O <sup>6</sup> H <sup>7</sup>	1205
1154 (83)	δCCN аром.	1159
904 (27)	τO <sup>1</sup> CCN аром.	886

Примечание: ν – валентное колебание, δ – деформационное, τ – торсионное

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

В ходе отнесения проведены анализ распределения потенциальной энергии (РПЭ) по естественным колебательным координатам (валентным связям и углам, двугранным углам и координатам, соответствующих выходу связей из плоскости молекулы), а также анализ формы нормальных колебаний. Последний позволил установить степень участия каждой колебательной координаты в данной полосе КР, а исследование РПЭ по колебательной координате показывает, в каком структурном элементе ло-

кализована потенциальная энергия данного колебания. Анализ РПЭ показывает, что большинство колебаний являются смешанными. В областях 10-800 см<sup>-1</sup> и 1620-1200 см<sup>-1</sup> вклад в колебания от различных колебательных координат меньше 5 %, т.е. они не являются характеристическими. Поэтому в таблице, за исключением полос при 1614 и 1603 см<sup>-1</sup>, представлены только наиболее активные и имеющие отчетливые проявления в спектре КР колебания, вклад в которые от колебательных координат составляет больше 5%. Необходимо отметить, что для большинства представленных частот вклады в РПЭ укладываются в диапазон 10-25%. Исключением являются моды νCH<sub>3</sub> (2910 см<sup>-1</sup>,

37%) и νC-H аром (3058 см<sup>-1</sup>, 39%, 3056 см<sup>-1</sup>, 50%, 3060 см<sup>-1</sup>, 54%).

Рассмотренные колебательные частоты являются отличительной спектральной характеристикой 4-бензоилоксикарбоновых кислот и могут быть использованы для идентификации и подтверждения структуры соединений этого класса.

Экспериментальный спектр КР соединения (I) в растворе бензол-хлороформ был зарегистрирован на спектрометре ДФС-24 с использованием линии 488 нм аргонового лазера ЛГН-503 мощностью 200 мВт на образце. Погрешность в определении положения полос КР не превышала ± 2 см<sup>-1</sup>.

#### Список литературы

1. Деркач Л.Г., Теслюк О.И., Новикова Н.С., Дога П.Г., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б. // ЖОХ. – 2014. – Т.84. – Вып. 7. – С.1095.
2. Binnemans K., Görille-Walrand Ch. // Chem. Rev. – 2002. – V.102. – P.2303.
3. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Кондратьева Р.В., Мешкова С.Б., Топилова З.М. // ЖПХ. – 2011. – Т.84. – Вып.6. – С.954.
4. Новикова Н.С., Килименчук Е.Д., Яркова М.Ю., Мешкова С.Б., Топилова З.М. // ЖПХ. – 2008. – Т.81. – Вып.8. – С.1528.
5. Gaussian 03, Revision B 03. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.
6. Scott P.A., Radom L. // J. Phys. Chem. – 1996. – V.100. – № 41. – P.16502.

#### КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДИКИ АУТЕНТИФИКАЦИИ С ПОЗИЦИЙ ВИРТУАЛИЗАЦИИ РЕЧЕВЫХ ИДЕНТИФИКАТОРОВ

Котенко В.В., Румянцев К.Е., Брагин И.А., Котенко С.В., Макаренко Я.А.

Южный федеральный университет, Таганрог,  
e-mail: virtsecurity@mail.ru

Целью исследования являлась разработка программного комплекса, обеспечивающего абсолютную аутентификацию. Основу исследования составила методика аутентификации с позиций комплексного определения разборчивости и избыточности виртуальных идентификаторов [1,2]. Содержание реализуемой методики состоит в использовании двух видов идентификаторов: виртуального и рабочего. Виртуальные идентификаторы находятся у корреспондентов и формируются ими. Особенностью методики является то, что выборочные пространства ансамблей виртуального идентификатора X\* является непрерывным, в результате чего обеспечивается его бесконечная энтропия (H[X\*]=∞) для несанкционированного пользователя. Основу функционирования комплекса составляет определение среднего количества информации и разборчивости [1,2]. Численные значения комбинаций этих параметров используются в качестве рабочего идентификатора.

Введение идентификационных признаков осуществляется путем зашумления исходного речевого идентификатора пользователем. Основу математических моделей разборчивости W и избыточности μ составляют выражения:

$$I=0,01W\log_2 0,01W+(1-0,01W)\log_2 \left( \frac{1-0,01W}{L-1} \right) -$$

$$-\sum_{l=1}^L \left\{ 0,01D_p P(x^{(l)}) + \frac{1-0,01D_p}{L-1} \left[ 1-P(x^{(l)}) \right] \right\} \times$$

$$\times \log_2 \left\{ 0,01WP(x^{(l)}) + \frac{1-0,01W}{L-1} \left[ 1-P(x^{(l)}) \right] \right\},$$

$$\mu_{s_{ce}} [S_{cs}] = 1 - \left( 1 - I[S_{cs}; S_{ce}] \right) \frac{H[S_{cs}]}{H_{\max} [S_{cs} / S_{ce}]},$$

$$H[S_{cs}] = -W \cdot \log W - \frac{1-W}{M-1} \log \left( \frac{1-W}{M-1} \right),$$

$$H_{\max} [S_{cs} / S_{ce}] = \frac{1-W}{M-1} \log (M-1) -$$

$$-\frac{1-W}{M-1} \log \left( \frac{1-W}{M-1} \right) - W \cdot \log W,$$

где W – разборчивость; M – количество логических элементов речевых сообщений в выборочном пространстве ансамбля сообщений; I – среднее количество информации.

Алгоритм аутентификации по разборчивости и избыточности на основе формирования виртуального идентификатора:

1. Задаются N<sub>i</sub> частот f<sub>i</sub>, соответствующих средним частотам спектральных информационных каналов (N<sub>i</sub>=20) с равным средним количеством информации: 0,1; 0,22; 0,32; 0,41; 0,475; 0,55; 0,65; 0,77; 0,88; 0,99; 1,43; 1,85; 2,24; 2,45; 3,23; 3,72; 4,22; 4,76; 5,60; 6,65 (кГц).

2. Формируется виртуальный идентификатор.

3. На основе спектров сигнала, соответствующего логическому элементу сообщения, и шума рассчитываются отношения сигнал/шум на средних частотах f<sub>i</sub> спектральных каналов с равным средним количеством информации.

4. Для каждого спектрального канала определяется коэффициент восприятия.

5. По значениям коэффициентов восприятия рассчитывается среднее количество информации логического элемента аудиосообщения, выделяемое слухом.

6. Разборчивость W логического элемента аудиосообщения, выделяемого слухом, определяется из графика на основании (1).

7. Избыточность μ логического элемента аудиосообщения, выделяемого слухом, определяется из W.