

**В.В. Петров, М.М. Авилова****ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ ГАЗОВ  
С ПОВЕРХНОСТЬЮ ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА В ПРИСУТСТВИИ  
МОЛЕКУЛ ВОДЫ\***

*Тонкие пленки полиакрилонитрила (ПАН), прошедшие термообработку инфракрасным излучением при температуре 300–600 °С проявляют газочувствительные свойства к ряду газов – загрязнителей. В работе проведены теоретические исследования возможности адсорбции неорганических газов на поверхность кластера термообработанного полиакрилонитрила. Для оценки возможности адсорбции молекул газов на поверхность полиакрилонитрила проведены квантово-химические расчеты и молекулярное моделирование с использованием программ HyperChem, GAUSSIAN07 и Chemoffice 2010. Исследование возможности адсорбции молекул газов проводилось в присутствии молекулы воды, то есть в условиях близких к реальным. В целях моделирования системы «кластер ПАН – молекула воды – молекула газа» рассчитана конфигурация кластера ПАН, состоящего из параллельно расположенных друг другу пентамеров ПАН. Методами молекулярного моделирования определено расположение над кластером ПАН молекулы воды и молекулы газа и рассчитаны энергии связи молекул с кластером ПАН. Проведены расчеты термодинамических параметров кластера ПАН и стерической энергии системы при адсорбции на поверхности кластера ПАН молекул воды и молекул некоторых газов (диоксида азота, метана, аммиака, оксида серы (II), сероводорода, озона, монооксида углерода, оксида углерода (II), хлора). Методом молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов показано, что молекула воды за счет своего высокого дипольного момента обладает большой энергией связи с поверхностью кластера полиакрилонитрила. В присутствии молекул воды пленки полиакрилонитрила могут обладать максимальной газочувствительностью к молекулам угарного газа, а также хлора и углекислого газа. Анализ полученных результатов показал отсутствие газочувствительности полиакрилонитрила к озону.*

*ПАН; квантово-химические расчеты; молекулярное моделирование; энергия оптимизации; стерическая энергия; адсорбция газов; влияние влажной среды.*

**V.V. Petrov, M.M. Avilova****INVESTIGATION OF THE INTERACTION OF GAS MOLECULES  
WITH THE SURFACE OF POLYACRYLONITRILE IN THE PRESENCE  
OF WATER MOLECULES**

*Thin films of polyacrylonitrile (PAN), which have been heat treated by infrared annealing at a temperature of 300-600 °C, exhibit gas sensitive properties to a number of gases - pollutants. Theoretical studies of the possibility of adsorption of inorganic gases onto the surface of a cluster of heat-treated polyacrylonitrile have been carried out. To assess the possibility of adsorption of gas molecules to the surface of polyacrylonitrile, quantum chemical calculations and molecular modeling using the HyperChem, GAUSSIAN07 and Chemoffice 2010 programs were carried out. The possibility of adsorption of gas molecules was investigated in the presence of a water molecule, that is, in conditions close to real. In order to simulate the "PAN cluster - water molecule - gas molecule" system, the configuration of a PAN cluster consisting of parallel PAN pentamers is calculated. Molecular modeling methods determine the location of the water molecule and the gas molecule over the PAN cluster and calculate the binding energies of the molecules with the PAN cluster. Calculations of the thermodynamic parameters of the PAN cluster and the steric energy of the system were carried out during the adsorption of water molecules and molecules of some gases (nitrogen dioxide, methane, ammonia, sulfur oxide (II), hydrogen sulphide, ozone, carbon monoxide).*

\* Работа выполнена при поддержке внутренним грантом Южного федерального университета № ВнГр-07/2017-21.

ide, carbon monoxide (II), chlorine). The molecular modeling and quantum chemical calculations show that the water molecule has a high binding energy to the surface of the cluster of polyacrylonitrile due to its high dipole moment. In the presence of water molecules, polyacrylonitrile films can have a maximum gas sensitivity to molecules of carbon monoxide, as well as chlorine and carbon dioxide. The analysis of the obtained results showed the absence of gas sensitivity of polyacrylonitrile to ozone.

PAN; quantum chemical calculations; molecular modeling; optimization energy; steric energy; adsorption of gases; influence of moist environment.

**Введение.** Пленки термостабилизированного полиакрилонитрила (ПАН), сформированные ИК-отжигом (300–600 °С), обладают полупроводниковыми свойствами и высокой чувствительностью к различным газам при комнатной температуре, в том числе к диоксиду азота и хлору [1–3]. Газочувствительность материала определяется адсорбцией молекул газов на поверхности пленок ПАН и поверхностными химико-физическими процессами. Для реальных условий наличие молекул воды в окружающей среде является естественным, однако, в работах посвященных газочувствительным свойствам материалов влиянию паров воды на их газочувствительность уделяется недостаточное внимание. В связи с этим, актуальными являются теоретические исследования влияния молекул воды на адсорбцию молекул ряда газов с поверхностью пленок ПАН.

Для исследования возможности взаимодействия неорганических газов с поверхностью органических полупроводниковых материалов используются квантово-химические расчеты и метод молекулярного моделирования, позволяющие произвести расчет термодинамических и геометрических параметров и оценить возможность протекания различных физико-химических процессов [4–6].

В связи с этим, целью исследования является изучение возможности адсорбции ряда неорганических газов с поверхностью термостабилизированного ПАН при наличии молекул воды методом молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов.

**Экспериментальная часть.** Первый этап проведения теоретического исследования включал расчеты пространственных конфигураций ПАН, приведенных на рис. 1.

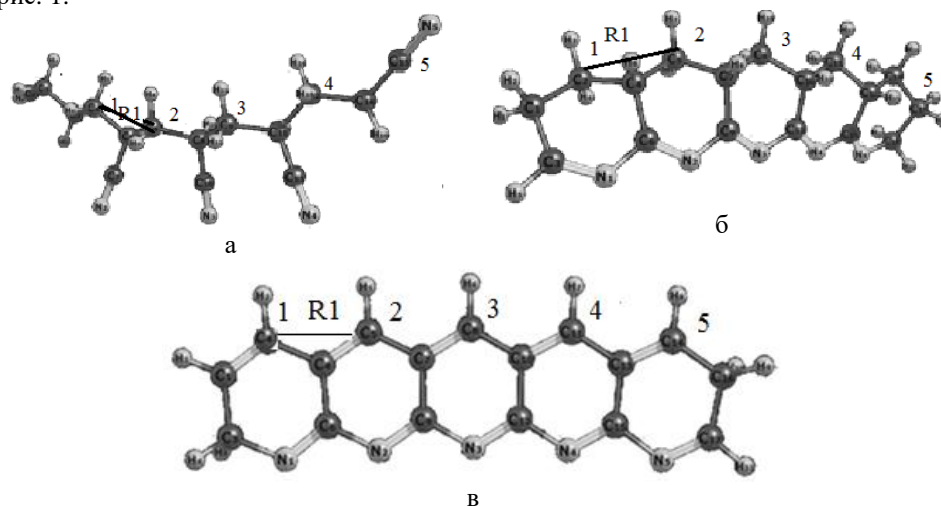


Рис. 1. Модели макромолекул пентамера ПАН развернутой (а), циклической (б), сопряженной (в) структуры

Известно, что ИК-отжиг пленок ПАН в диапазоне от 200 °С до 250 °С приводит к трансформации развернутой структуры макромолекул ПАН (рис. 1,а) в циклическую структуру ПАН (рис. 1,б), а при дальнейшем воздействии ИК-отжига при температурах выше 250 °С образуется окончательная термостабилизированная структура макромолекул ПАН за счет дегидрирования основной цепи и образования сопряженных связей  $-C=C-$  (рис. 1,в) [7–8].

Моделирование конфигураций макромолекул ПАН и расчет термодинамических показателей проводился с помощью программного пакета GAUSSIAN07 с реализацией базисного набора 6-31 G\* использующей теорию функционала плотности (DFT) [6, 9–11]. Кроме этого, при проведении указанных расчетов использовались полумпирические вычисления пространственных конфигураций макромолекул ПАН с использованием обменно-корреляционного функционала (B3LYP) [6, 12–15].

На следующем этапе рассчитывали модель поверхностного кластера ПАН, который представлял собой две параллельно расположенных сопряженных макромолекулы пентамеров ПАН – рис. 2. Выбор сопряженной макромолекулы пентамера ПАН связан с тем, что именно термостабилизированный ПАН проявляет газочувствительные свойства. Данный кластер получен в подпрограмме Chem3D программы Chemoffice 2010, позволяющий рассчитать химические структуры различной сложности, а также их визуализировать в пространстве [6, 16–17]. Расстояние между атомами двух сопряженных пентамеров ПАН в кластере составляет от 3.0 Å до 4.3 Å, а стерическая энергия кластера составляет 667.241 ккал/моль.

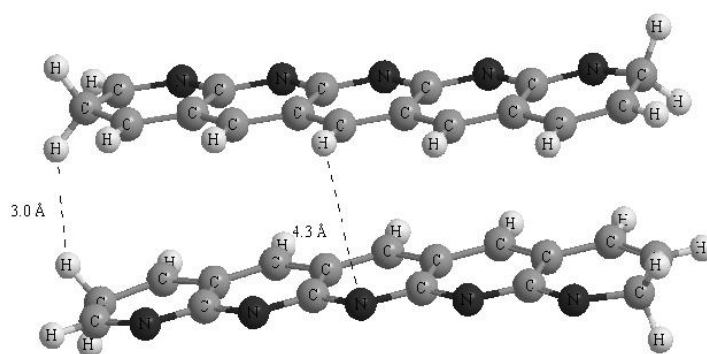


Рис. 2. Схема кластера термостабилизированного ПАН

На следующем этапе моделирования производилась оценка расположения молекул воды по отношению к кластеру ПАН. Для этого с помощью молекулярного моделирования в результате минимизации потенциальной энергии системы в модифицированной версии силового поля (MM2), разработанного Элинджером рассчитывалась стерическая энергия системы в подпрограмме Chem3D использовался метод молекулярного моделирования [11, 13, 18]. Молекула воды располагалась между двумя пентамерами ПАН в кластере (рис. 3, позиция 1), над краем кластера на расстояниях от 2 Å до 10 Å (позиции 2–12, рис. 3), над центром кластера на расстояниях от 2 Å до 10 Å (позиции 13–22, рис. 3). Наиболее выгодным расположением молекулы воды относительно кластера ПАН было на расстоянии 2,7 Å от центра кластера ПАН. Стерическая энергия системы при этом была минимальной и составляла 1461.43 ккал/моль, а энергия связи молекулы воды с кластером ПАН – 56,77 ккал/моль.

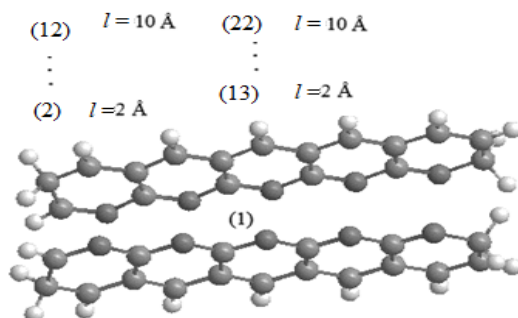


Рис. 3. Расположение молекулы воды при взаимодействии с поверхностью кластера ПАН

Последним этапом исследования явилось исследование взаимодействия кластера ПАН с молекулами газов (диоксид азота, метан, аммиак, оксид серы (II), сероводород, озон, монооксид углерода, оксид углерода (II), хлор) в присутствии молекулы воды. Для этого задавались различные варианты расположения молекул относительно кластера – рис. 4. Молекулы газа располагались внутри кластера (позиция 1, рис. 4), над серединой кластера на расстояниях от поверхности от 2 до 10 Å (позиции 2–12, рис. 4).

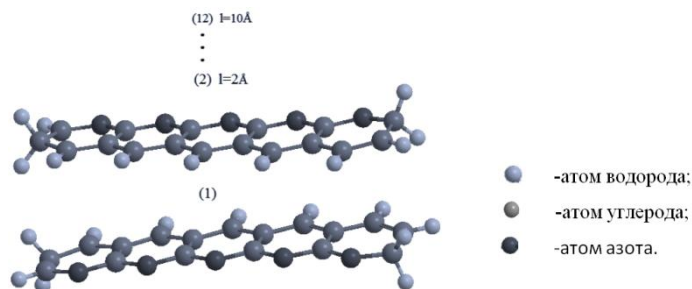


Рис. 4. Расположение молекул газа относительно поверхности кластера ПАН

Для установления особенностей взаимодействия кластера ПАН с молекулами газов согласно методике, описанной в [6], проводились расчеты стерической энергии ( $E^s$ ) системы: «кластер ПАН – молекула воды – молекула газа». На основании этого рассчитывалась энергия образования связи между кластером и молекулой газа ( $\Delta E^s$ ), как разница энергий системы при расстоянии между молекулой и кластером в наибольшем удалении и в точке энергетического минимума. Кроме того, в точке энергетического минимума оценивалось расстояние ( $l_{\min}^s$ ) между молекулой газа и поверхностью кластера и расстояние между молекулами газа и воды ( $L$ ). Результаты расчетов приведены в табл. 1.

**Обсуждение результатов.** По итогам молекулярного моделирования и проведенных квантово-химических расчетов, установлено значительное влияние присутствия молекул воды на процессы адсорбции неорганических газов на поверхности пленок ПАН. Молекулярное моделирование показало, что наиболее энергетически выгодным расположением молекулы воды относительно кластера ПАН, (в отсутствии молекул газов), является ее нахождение над поверхностью середины кластера на расстоянии 2.7 Å (1461.4 ккал/моль) – рис. 3. Следует отметить высокую энергию связи молекул воды, адсорбированной на поверхности кластера ПАН – 56,77 ккал/моль. Такая величина может свидетельствовать об образовании хими-

ческой связи, однако рассчитанное расстояние между молекулой воды и поверхностью кластера (2.7 Å) не позволяют утверждать, что химическая связь образовалась. Объяснить высокое значение энергии связи возможно с точки зрения существования электростатических сил притяжения между полярной молекулой воды (дипольный момент 1,84 D [19]) и поверхностью кластера ПАН. В работе [20] показано, что энергия взаимодействия между сильно полярными молекулами и поверхностью твердого тела может достигать 50 ккал/моль.

Таблица 1

**Термодинамические параметры системы  
«кластер ПАН – молекула воды – молекула газа»**

Молекула газа	Дипольный момент, D,	E', ккал/моль	ΔE', ккал/моль	I <sub>min</sub> , Å	L, Å
NO <sub>2</sub>	0,3	2214,6	<b>3,7</b>	4	4,2
Cl <sub>2</sub>	0,2	<b>1473,2</b>	3,2	3,7	3,1
NH <sub>3</sub>	1,4	2293,3	<b>4,2</b>	3,4	1,7
CH <sub>4</sub>	0	2012,7	0,6	6	4
SO <sub>2</sub>	1,6	1671,3	0,2	4	1,9
H <sub>2</sub> S	0,9	2145,6	<b>16,3</b>	4	2,6
CO	0,1	<b>1457,1</b>	0,9	4	3,8
O <sub>3</sub>	0,5	2839,4	1,8	3,2	3,8
CO <sub>2</sub>	0	<b>1479,6</b>	1,9	3,2	3,3

Энергетически невыгодным расположением молекулы воды относительно кластера оказалось расположение молекулы воды между двумя слоями внутри кластера. В этом случае стерическая энергия системы составляла 1845,94 ккал/моль. Это может свидетельствовать о невозможности диффузии молекул воды в структуру ПАН.

Из табл. 1 видно, что между молекулой воды и молекулой аммиака (дипольный момент 1,4 D), а также молекулой воды и молекулой оксида серы (дипольный момент 1,6 D), над поверхностью кластера ПАН возможно сильное взаимодействие, так как расстояния между молекулами становятся маленькими и сравнимыми с их радиусами [20].

Так, согласно табл. 1 для всех рассмотренных газов, расстояния между молекулами газов и поверхностью ПАН не превышают 3,2 Å. Минимальное значение стерической энергии E' характерно для взаимодействия кластера ПАН с молекулами угарного газа (E' = 1457,1 ккал/моль). Это позволяет сделать вывод о более высокой газочувствительности ПАН по отношению к угарному газу в присутствии молекул воды. Невысокие значения стерической энергии характерны также для взаимодействия с ПАН молекул хлора (E' = 1473,2 ккал/моль) и углекислого газа (E' = 1479,6 ккал/моль).

Важным с точки зрения взаимодействия между молекулой газа и ПАН является энергия связи. Максимальные значения ΔE' характерны для взаимодействия молекул сероводорода (ΔE' = 16,3 ккал/моль). Это может говорить о возможном взаимодействии молекул сероводорода с ПАН, но при температурах выше комнатной, так как стерическая энергия системы «кластер ПАН – молекула воды – молекула сероводорода» достаточно высока (E' = 2145,6 ккал/моль).

Анализ полученных результатов также показал отсутствие газочувствительности ПАН к озону. Это следует из высокого значения стерической энергии (E' = 2839,4 ккал/моль) и низкого значения энергий связи (ΔE' = 1,8 ккал/моль).

**Заключение.** Таким образом, методом молекулярного моделирования и квантово-химических расчетов показано, что молекула воды за счет своего высокого дипольного момента обладает большой энергией связи с поверхностью кластера полиакрилонитрила. В присутствии молекул воды пленки полиакрилонитрила могут обладать максимальной газочувствительностью к молекулам угарного газа, а также хлора и углекислого газа. Анализ полученных результатов показал отсутствие газочувствительности полиакрилонитрила к озону.

Авторы статьи благодарят руководство НОЦ “Микросистемная техника и мультисенсорные мониторинговые системы” Южного Федерального университета за возможность проводить исследования, а сотрудников кафедры техносферной безопасности и химии доцента Н.К. Плугогаренко и доцента Т.В. Семенистую – за полезные дискуссии, проводимые при планировании теоретических исследований.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Петров В.В., Семенистая Т.В.* Металлосодержащий полиакрилонитрил: состав, структура, свойства. – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2015. – 169 с.
2. *Семенистая Т.В., Петров В.В., Бедная Т.А.* Энергоэффективные сенсоры газов на основе нанокомпозитных органических полупроводников. – Таганрог: Изд-во ЮФУ, 2013. – 120 с.
3. *Семенистая Т.В., Петров В.В., Ладыгина А.А.* Энергоэффективные датчики газа на основе нанокомпозитных материалов металлосодержащего полиакрилонитрила // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2014. – № 4 (153). – С. 219-229.
4. *Волькенштейн М.В.* Конфигурационная статистика полимерных цепей. – М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1959. – 466 с.
5. *Игнатов С.К.* Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности. Часть 1. Обзор современных методов электронной структуры и теории функционала плотности. – Нижний Новгород, ННГУ, 2007. – 84 с.
6. *Avilova M.M., Petrov V.V.* A Study of Gas-Sensitive Properties of Cobalt-Modified Polyacrylonitrile Films by the Methods of Molecular Modeling and Quantum Chemistry // Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2017. – Vol. 11, No. 4. – P. 618-623.
7. *Земцов Л.М., Карпачева Г.П.* Химические превращения полиакрилонитрила под действием некогерентного инфракрасного излучения // Высокомолекулярные соединения. – 1994. – Т. 3, № 6. – С. 919-924.
8. *Bakshi A.K., Bhalla. G.* Electrically conducting polymers: Materials of the twenty-first century // J. of Scientific & industrial Research. – 2004. – Vol. 63. – P. 715-728.
9. *Jing M., Wang C., Wang Q, et al.* Chemical structure evolution and mechanism during pre-carbonization of PAN-based stabilized fiber in the temperature range of 350–600 °C // Polymer Degradation and Stability. – 2007. – Vol. 92. – P. 1737-1742.
10. *Кларк Т.* Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990. – 382 с.
11. *Hoenberg P., Kohn W.* Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. – 1964. – Vol. 136. – B864-B871.
12. *Parr R.G., Yang W.* Density Functional Theory of Atoms and Molecules. – Oxford: Oxford University Press, 1989. – 352 p.
13. *Куттель Ч.* Квантовая теория твердых тел. – М.: Наука, 1967. – 491 с.
14. *Anikeev N.A.* Theoretical studies of the structure of the metal – carbon composites on the base of acryle – nitrile nanopolymer // Journal of nano and electronic physics. – 2014. – Vol. 6, No. 3. – P. 03035-03036.
15. *Аникеев Н.А.* Металлоуглеродные нанокомпозиты на основе пиролизованного полиакрилонитрила // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2014. – № 2 (66). – С. 144–142.
16. *Дашевский В.Г.* Конформационный анализ органических молекул. – М.: Химия, 1982. – 347 с.

17. Рафигов С. Р., Павлова С. А., Твердохлебова И. И. Методы определения молекулярных весов и полидисперсности высокомолекулярных соединений. – М.: Изд-во АН СССР, 1963. – 336 с.
18. Авилова М. М., Петров В. В. Исследование взаимодействия неорганических газов с поверхностью кобальтсодержащего полиакрилонитрила в присутствии молекул воды // Химическая безопасность. – 2017. – Т. 1, № 2. – С. 108-116.
19. Справочник химика / под ред. Б.П.Никольского. – М., Л.: Химия, 1982. – Т. 1. – С. 1072.
20. Петров В.В. Исследование особенностей взаимодействия молекул газов с поверхностью оксидных газочувствительных материалов // Нано- и микросистемная техника. – 2007. – № 1. – С. 24-27.

## REFERENCES

1. Petrov V.V., Semenistaya T.V. Metallsoderzhashchiy poliakrilonitril: sostav, struktura, svoystva [Metal-containing polyacrylonitrile: composition, structure, properties]. Taganrog: Izd-vo SFedU, 2015, 169 p.
2. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Bednaya T.A. Energoeffektivnye sensory gazov na osnove nanokompozitnykh organicheskikh poluprovodnikov [Energy-efficient gas sensors based on nanocomposite organic semiconductors]. Taganrog: Izd-vo SFedU, 2013, 120 p.
3. Semenistaya T.V., Petrov V.V., Ladygina A.A. Energoeffektivnyye datchiki gaza na osnove nanokompozitnykh materialov metallsoderzhashchego poliakrilonitrila [Power-efficient gas sensors based on nanocomposite materials metal-containing polyacrylonitril], Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2014, No. 4 (153), pp. 219-229.
4. Vol'kenshteyn M.V. Konfiguratsionnaya statistika polimernykh tsepey [Configuration statistics of polymer chains]. Moscow; Leningrad: Izd-vo AN SSSR, 1959, 466 p.
5. Ignatov S.K. Kvantovo-khimicheskoye modelirovaniye molekulyarnoy struktury, fiziko-khimicheskikh svoystv i reaktsionnoy sposobnosti. Chast' 1. Obzor sovremennykh metodov elektronnoy struktury i teorii funktsionala plotnosti [Quantum-chemical modeling of molecular structure, physico-chemical properties and reactivity. Part 1. Review of modern methods of electronic structure and density functional theory]. 2007: Nizhniy Novgorod, NNGU, 84 p.
6. Avilova M.M., Petrov V.V. A Study of Gas-Sensitive Properties of Cobalt-Modified Polyacrylonitrile Films by the Methods of Molecular Modeling and Quantum Chemistry, *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2017, Vol. 11, No. 4, pp. 618-623.
7. Zemcov L.M., Karpacheva G.P. Khimicheskie prevrashcheniya poliakrilonitrila pod deystviyem nekogerentnogo infrakrasnogo izlucheniya [Chemical transformations of polyacrylonitrile under the influence of incoherent infrared radiation], *Vysokomolekulyarnye soedineniya* [High-molecular compounds], 1994, Vol. 36, No. 6, pp. 919-924.
8. Bakshi A.K., Bhalla. G. Electrically conducting polymers: Materials of the twenty-first century, *J. of Scientific & industrial Research*, 2004, Vol. 63, pp. 715-728.
9. Jing M., Wang C., Wang Q., et al. Chemical structure evolution and mechanism during pre-carbonization of PAN-based stabilized fiber in the temperature range of 350–600 °C, *Polymer Degradation and Stability*, 2007, Vol. 92, pp. 1737-1742.
10. Klark T. Komp'yuternaya khimiya [Computer chemistry]. Moscow: Mir, 1990, 382 p.
11. Hoenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, 1964, Vol. 136, B864-B871.
12. Parr R.G., Yang W. Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford: Oxford University Press, 1989, 352 p.
13. Kittel' Ch. Kvantovaya teoriya tverdykh tel [Quantum theory of solids]. Moscow: Nauka, 1967, 491 p.
14. Anikeev N.A. Theoretical studies of the structure of the metal – carbon composites on the base of acryle – nitrile nanopolymer, *Journal of nano and electronic physics*, 2014, Vol. 6, No. 3, pp. 03035-03036.
15. Anikeev N.A. Metallouglerodnye nanokompozity na osnove pirolizovannogo poliakrilonitrila [Metallocarbon nanocomposites based on pyrolyzed polyacrylonitrile], *Izvestiya vuzov. Materialy ehlektronnoy tekhniki* [Materials of Electronics Engineering], 2014, No. 2 (66), pp. 144-142.
16. Dashevskij V.G. Konformatsionnyy analiz organicheskikh molekul [Conformational analysis of organic molecules]. Moscow: Himiya, 1982, 347 p.

17. Rafikov S.R., Pavlova S.A., Tverдохлебова I.I. Metody opredeleniya molekulyarnykh vesov i polidispersnosti vysokomolekulyarnykh soedineniy [Methods for determination of molecular weights and polydispersity of high molecular compounds]. Moscow: Izd-vo AN SSSR, 1963, 336 p.
18. Avilova M.M., Petrov V.V. Issledovaniye vzaimodeystviya neorganicheskikh gazov s poverkhnost'yu kobal'tsoederzhashchego poliakrilonitrila v prisutstvii molekul vody [Investigation of the interaction of inorganic gases with the surface of cobalt-containing polyacrylonitrile in the presence of water molecules], *Khimicheskaya bezopasnost'* [Chemical safety], 2017, Vol. 1, No. 2, pp. 108-116.
19. Kurs fizicheskoy khimii [Chemical Handbook], under the General edition Gerasimova A.I. In 2 vol. Vol. 1. Moscow: Himiya, 1964, 624 p.
20. Petrov V.V. Issledovanie osobennostey vzaimodeystviya molekul gazov s poverkhnost'yu oksidnykh gazochuvstvitel'nykh materialov [Investigation of the features of the interaction of gas molecules with the surface of oxide gas sensitive materials], *Nano- i mikrosistemnaya tekhnika* [Nano-and Microsystem technology], 2007, No. 1, pp. 24-27.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор О.А. Агеев.

**Петров Виктор Владимирович** – Южный федеральный университет; e-mail: vvp2005@inbox.ru; 347922 г. Таганрог, ул. Чехова, 2; тел.: 88634371624; кафедра техносферной безопасности и химии; д.т.н.; профессор.

**Авилова Марта Маисовна** – e-mail: larina7566@yandex.ru; тел.: 89188561396; кафедра техносферной безопасности и химии.

**Petrov Viktor Vladimirovich** – Southern Federal University; e-mail: vvp2005@inbox.ru; 2, Chekhov street, Taganrog, 347922, Russia; phone: +78634371624; the department of technospheric security and chemistry; dr. of eng. sc.; professor.

**Avilova Marta Maisovna** – e-mail: larina7566@yandex.ru; phone: +79188561396; the department of technospheric security and chemistry.

УДК 621.3.049.77: 53.087.92

DOI 10.23683/2311-3103-2018-2-54-67

**Ло Ван Хао, Т.Г. Нестеренко**

### **АНАЛИЗ ЭФФЕКТА ПАРАЗИТНОЙ ЕМКОСТИ В РЕЖИМЕ ДВИЖЕНИЯ МИКРОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОГО ГИРОСКОПА\***

*Наиболее эффективным методом идентификации динамических характеристик резонансной структуры микроэлектромеханического гироскопа (ММГ) является экспериментальное определение его частотных характеристик в двух режимах работы: в режиме движения и режиме чувствительности. В режиме движения механическая резонансная структура гироскопа возбуждается электростатической силой путем подачи на электроды возбуждения гармонического сигнала и на выходе определяется информационная емкость реакция. Однако выходной сигнал обычно искажается прохождением сигнала возбуждения к информационному сигналу через паразитные электрические компоненты, параллельные с идеальной структурой электромеханического резонатора. Из-за этого точная оценка параметров динамической системы ММГ затруднена. Актуальной задачей является поиск параметров существующих паразитных компонентов и способа снижения негативных эффектов, которые оказывают влияние на характеристику ММГ. В данной*

\* Работа выполнена в Томском политехническом университете при финансовой поддержке Минобрнауки России, ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы», Соглашение N 14.578.21.0232, уникальный идентификатор RFMEFI57817X0232.