

Секция 7

«ВОПРОСЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ, ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»

Содержание:

ФОРМИРОВАНИЕ ИНЖЕНЕРНОЙ КУЛЬТУРЫ У УЧАЩИХСЯ СРЕДСТВАМИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ «ФИЗИКА» ФГОС Абрамов С.М., Пронина И.И., Абрамова Е.Л	1036
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТНОГО КЕРАМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА (ККМ) МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ (РЭМ) Бузмаков А.А. Овечкин М.В.	1039
СОЗДАНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ДЕМОНСТРАЦИИ СПРАВЕДЛИВОСТИ ЗАКОНОВ ЭЛЕКТРОЛИЗА ФАРАДЕЯ КАК ПРИМЕР ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ПРОЕКТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИН ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОГО ЦИКЛА Викторов В.В.	1045
РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПОЗИТНОГО КЕРАМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА ИЗ ОРЕНБУРГСКИХ ГЛИН Воробьев И.В.	1048
РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В СПЕКАЕМОЙ КРЕМНЕЗЕМИСТОЙ КЕРАМИКЕ Гуньков В.В.	1052
ВЛИЯНИЕ БИВАКАНСИИ Pt В КРИСТАЛЛЕ Pt ₃ Al НА НЕЛИНЕЙНУЮ ЛОКАЛИЗОВАННУЮ МОДУ БОЛЬШОЙ АМПЛИТУДЫ Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В.	1055
ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОВЫШЕНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В КОМПОЗИТНОМ КЕРАМИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ НА АЛЮМОСИЛИКАТНОЙ МАТРИЦЕ Каныгина О.Н., Четверикова А.Г.	1062
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЖИМОВ ЗАПУСКА И ВРАЩЕНИЯ ИОННОГО РЕАКТИВНОГО ДВИГАТЕЛЯ ПОСРЕДСТВОМ ГЕНЕРАТОРА ВАН ДЕ ГРААФА Круссер Г.Ю., Комаревцев Д.Н.	1069
ЭВОЛЮЦИЯ ПЛОТНОСТИ КОГНИТИВНОГО ПОЛЯ В ПРОСТРАНСТВЕ ПОНЯТИЙ Кучеренко М.Г., Кучеренко М.А.	1076
СПЕКТРЫ ДИПОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ КЛАСТЕРОВ ИЗ ДВУХ ПРОВОДЯЩИХ НАНОЧАСТИЦ С ВЫРОЖДЕННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.	1084
ВЛИЯНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ НА ПРОЦЕССЫ ДЕЗАКТИВАЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ Кучеренко М.Г., Русинов А.П.	1091
ЭКСИТОН-ПЛАЗМОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ КВАНТОВАЯ НИТЬ – СФЕРИЧЕСКАЯ МЕТАЛЛОКОМПОЗИТНАЯ НАНОЧАСТИЦА» Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М.	1097
О ВВЕДЕНИИ ПОНЯТИЯ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА И ЗАКОНА ЕГО СОХРАНЕНИЯ В ПРОФИЛЬНЫХ КЛАССАХ СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ Перунова М.Н.	1107
НИРС КАК СРЕДСТВО РЕАЛИЗАЦИИ КОМПЕТЕНЦИЙ НА ПРИМЕРЕ БАКАЛАВРИАТА ПРОФИЛЯ ИДМБ Стрекаловская А.Д., Каныгина О.Н., Ретенер Н.С., Шишкин В.В., Сагындыкова А.К.	1112

<p>ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ В ОБЛАСТИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК У СТУДЕНТОВ, ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО СПЕЦИАЛИЗАЦИИ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ», ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ Четверикова А.Г., Узенбаев В.Г., Осипова Е.А., Дюсенов А.И.</p>	1117
<p>ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФРЕНКЕЛЕВСКИХ ЭКСИТОНОВ ПЛЕНКИ J-АГРЕГАТОВ С ПОВЕРХНОСТНЫМИ ПЛАЗМОНАМИ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКИ Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г., Курмангалеев К.С.</p>	1123
<p>ЭКСИТОН-ПЛАЗМОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «КВАНТОВАЯ ТОЧКА - МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОПРОВОЛОКА» Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г., Дмитриев А.Д.</p>	1130
<p>СБОРНИК ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ СО СПОРТИВНЫМ, БИОФИЗИЧЕСКИМ, ИСТОРИЧЕСКИМ И ТЕХНИЧЕСКИМ СОДЕРЖАНИЕМ Якупов Г.С.</p>	1138

ФОРМИРОВАНИЕ ИНЖЕНЕРНОЙ КУЛЬТУРЫ У УЧАЩИХСЯ СРЕДСТВАМИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ОБЛАСТИ «ФИЗИКА» ФГОС

Абрамов С.М., Пронина И.И., Абрамова Е.Л
Орский гуманитарно-технологический институт (филиал)
Оренбургский государственный университет, г. Орск

На современном этапе развития российского общества в существующих рыночных отношениях все большее значение начинает уделяться сфере инженерного образования и формированию инженерных кадров для устойчивого развития России, поскольку инженерное образование определяет развитие политических, экономических, социальных, научных и культурных процессов и фактически направлено на подъем экономики страны.

Проводимые экономические реформы привели к тому, что на рынке труда стали не востребованы многие инженерные специальности, а из-за сравнительно низкой зарплаты выпускники инженерных специальностей вузов вынуждены уходить в другие сферы или переучиваться и получать другие квалификации.

Сегодня во всем мире постепенно происходит размывание границ между дисциплинами и специальностями, а каждое серьезное научное исследование побуждает современного ученого использовать методы «смежных дисциплин» и помещать объект изучения в другое научное измерение. Соответственно, и инженер новой генерации должен быть таким же универсальным специалистом. Это принципиальная задача, формирующая основу алгоритма подготовки инженеров - специалистов нового поколения и требующая первоочередного решения.

В настоящее время, когда ЕГЭ по физике сдают только 25-30% выпускников школ и конкурс на инженерно-технические направления и специальности в 3 - 4 раза ниже, чем на все остальные, организовать новый этап индустриализации сложно.

Необходимым итоговым условием для подготовки научно-технической базы российской индустриализации должно стать массовое стремление потенциальных абитуриентов выбирать именно инженерные специальности. В связи с этим огромное внимание необходимо уделять проведению целенаправленной профориентационной работы среди выпускников общеобразовательных заведений и учащейся молодежи, которая должна опираться на глубокое знание всей системы основных факторов, определяющих формирование профессиональных намерений личности и пути ее реализации.

Мы считаем, что для возрождения механизмов массового вовлечения молодежи в процесс освоения инженерных специальностей целесообразно провести следующие мероприятия:

- реанимировать существовавшую в советский период разветвленную систему профессиональной ориентации молодежи (в том числе многочисленные школы и кружки научно-технического творчества и т.п.);
- расширить инженерные компетенции, предусматривающее

многоуровневое дополнительное профессиональное образование для инженеров;

– актуализировать содержание инженерного образования, внедрять современные педагогические технологии, ориентировать учащихся на практическую реализацию законченных проектов;

– разумно сочетать традиционные формы обучения с инновационными.

Как мы уже отмечали, в связи с начавшимся развитием производства, в стране осуществляется нехватка инженерных кадров и, следовательно, техническое образование вновь становится одним из приоритетных направлений государственной политики, которое должно обеспечить рост качества инженерного образования, решить вопросы трудоустройства выпускников инженерно-технических учебных заведений, ориентировать выпускников общеобразовательных учреждений на специальности физико-технического профиля, предоставить возможность для формирования инженерной культуры учащихся данных учебных заведений средствами предметных областей «Физика», «Математика и информатика», «Технология» и др. на всех ступенях обучения.

Таким образом, в организациях общего образования пропедевтика инженерной культуры выступает как реальный результат реализации ФГОС.

По нашему мнению, одним из направлений пропедевтики является курс физики, т.к. в одном из требований ФГОС последнего поколения отмечается необходимость приобретения практического опыта деятельности, предшествующей профессиональной, в основе которой лежит предмет физики.

Известно, что предмет «Физика» располагает многими возможностями для осуществления профессиональной ориентации на инженерные специальности, и опирающимися на различные методы и средства обучения физике. Это наиболее ярко прослеживается на первом курсе СПО, где изучается физика.

При изучении курса используются следующие методы обучения: объяснительно-иллюстративный, проблемное изложение, частично-поисковый (эвристический), деловые и ролевые игры, самостоятельная учебная работа студентов. Выбор методов обучения осуществляется в зависимости от содержания изучаемой темы и форм обучения. В качестве средств обучения выступают: рабочая программа; учебно-методическое пособие; методические рекомендации по организации самостоятельной работы; таблицы, схемы и графики, концентрирующие и обобщающие информацию.

Проанализировав курс физики, мы выделили ряд тем, базовые понятия которых лежат в основе профессиональной подготовки специальностей «Литейное производство цветных и черных металлов» и «Техническое обслуживание и ремонт автомобильного транспорта», востребованных в нашем городе (см. Таблицу 1.).

Таблица 1

Специальность	Тема и основные понятия курса физики
Литейное производство цветных и черных металлов	<ul style="list-style-type: none"> - Основы термодинамики. - Агрегатные состояния вещества и фазовые переходы: а) кристаллическое и аморфное состояние вещества; <li style="padding-left: 40px;">б) плавление и кристаллизация; <li style="padding-left: 40px;">в) деформация. - Электрический ток в жидкостях. - Электромагнитная индукция. Индукционные печи.
Техническое обслуживание и ремонт автомобильного транспорта	<ul style="list-style-type: none"> - Законы динамики. - Закон сохранения энергии - Законы постоянного тока. - Электромагнитная индукция.

Исходя из анализа преподавательской работы, можно выделить методы и методические средства, использование которых в учебном процессе позволяет формировать навыки и компетенции инженерной культуры:

- использование мультимедийных средств для активизации профориентацион- ной работы с учащимися на уроках физики;
- изготовление моделей технических устройств;
- осуществление межпредметных взаимодействий;
- написание рефератов, докладов по инженерно-технической тематике;
- проведение специализированных викторин;
- проведение олимпиад,
- проведение физических диктантов профессиональной направленности и др.

Немаловажное значение уделяется процессам моделирования малых узлов или частей какого-либо технического устройства. Положительную роль в этом играет взаимодействие с предметами «Инженерная графика», «Эстетика», «Математика» и др.

Итак, программа ФГОС по предметной области «Физика» дает возможность формировать инженерные компетенции, которые лягут в основу дальнейшего профессионального образования учащихся.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТНОГО КЕРАМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА (ККМ) МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ (РЭМ)

Бузмаков А.А. Овечкин М.В.

Оренбургский Государственный Университет, г. Оренбург

Растровый электронный микроскоп (РЭМ) — прибор класса «электронный микроскоп», предназначенный для получения изображения поверхности объекта с высоким (до 0,4 нм) пространственным разрешением, информации о составе, строении и некоторых других свойствах приповерхностных слоёв. Его работа основана на принципе взаимодействия электронного пучка с исследуемым объектом.

В настоящее время существует огромное число выпускаемых рядом фирм разнообразных конструкций и типов РЭМ, оснащенных детекторами различных типов. Вот один из них.

JSM-6000 Neoscope II – это новейший настольный растровый электронный микроскоп с вольфрамовым источником электронов. Имея стоимость, сопоставимую со стоимостью хороших световых микроскопов, он обладает намного большей глубиной фокуса и несравнимо лучшим разрешением. Как следствие этого, JSM-6000 может работать в диапазоне увеличений от $\times 10$ до $\times 60000$ крат. Программное обеспечение позволяет проводить высокоточные количественные измерения на изображениях.



Рисунок 1. Растровый электронный микроскоп JEOL JSM-6000

Дружественное программное обеспечение, простота управления, невысокая стоимость и низкие эксплуатационные расходы делают этот прибор очень привлекательным для использования в научно-образовательных целях, а также при проведении поточных серийных исследований на производстве.

Для элементного микроанализа используется энергодисперсионный рентгеновский спектрометр (ЭДРС) [1].

С помощью РЭМ JEOL JSM-6000 были сделаны фотографии с поверхности образца ККМ, спеченного из смеси: монтмориллонит и каолинитсодержащих глин в соотношении 60:40% с добавлением цеолита.

Температура спекания составляла 1030 °С 1 час.

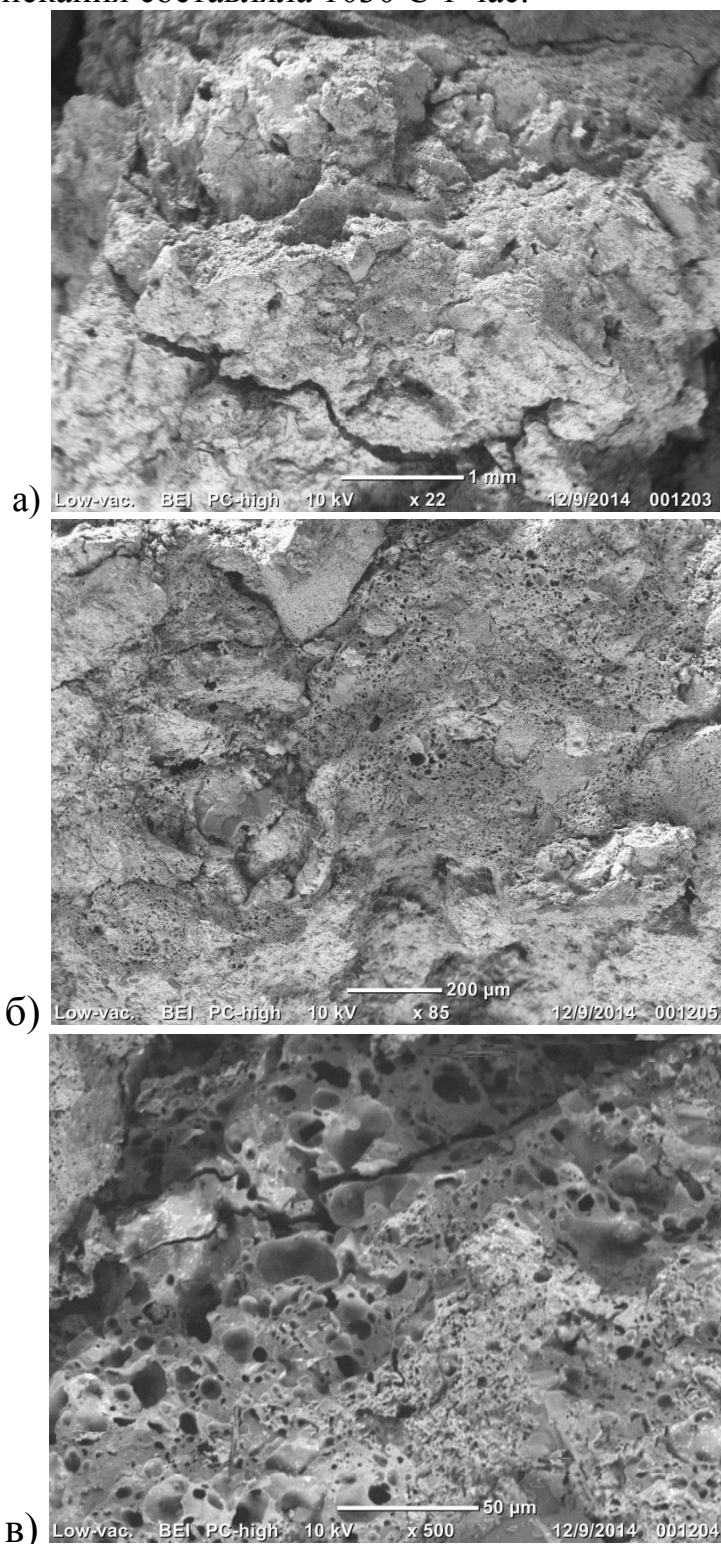


Рисунок 2. Микроструктура керамического образца ККМ при разных увеличениях (а,б,в)

На рисунке 2(а) видны характерные изломы. Пор, как таковых, при таком увеличении не видно. На рисунке 2(б) видны также изломы и поры. На рисунке 2(в) очень хорошо видны поры, и трещины. Особо крупные поры, их на рисунке около 10, размером 10–15 нм. Они имеют «каплевидную» форму.

Сделан спектральный микроанализ на химический состав (рисунок 3, таблица 1).

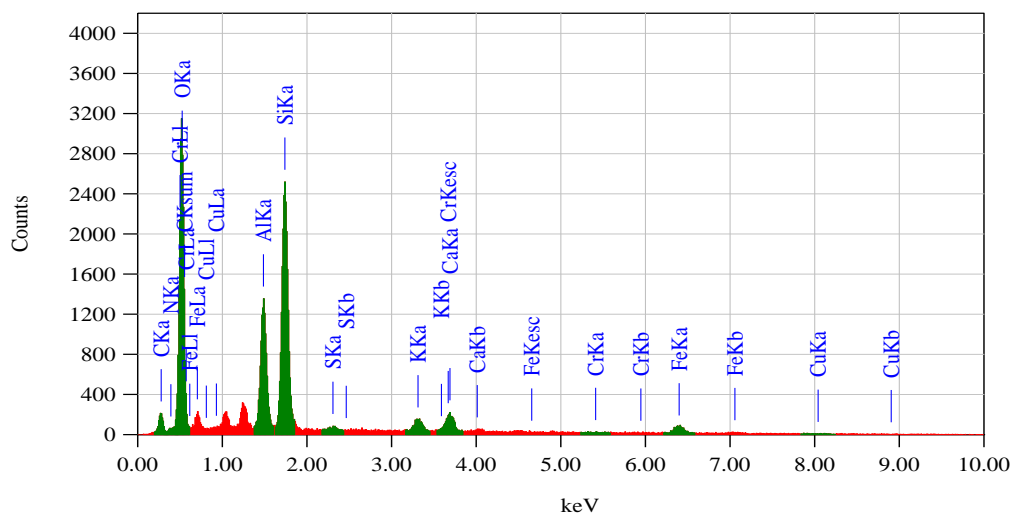


Рисунок 3. Спектральный микроанализ образца

Таблица 1–Элементарный состав ККМ на РЭМ JEOL JCM –6000

элемент	H	C	N	O	Al	Si	S
массовая доля, %	0	6,21	1,05	35,35	14,91	30,57	0,51

В таблице 2 представлен химический состав глин, содержащих монтмориллонит и каолинит.

Таблица 2– Химический состав керамики [2]

Глина	П.п.п.	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Na ₂ O	K ₂ O
К	9,61	57,46	4,90	0,53	11,00	8,21	2,93	2,04	3,04
М	7.08	55.90	9.51	0.86	18.63	0.72	2.05	1.90	3.24

Как видно, различными методами можно определить разные химические элементы. По моему мнению, более точным методом определения химического состава, является метод РЭМ.

Изучена микроструктура цеолита, который добавляли в глиняную смесь, как армирующий компонент, при разных увеличениях.

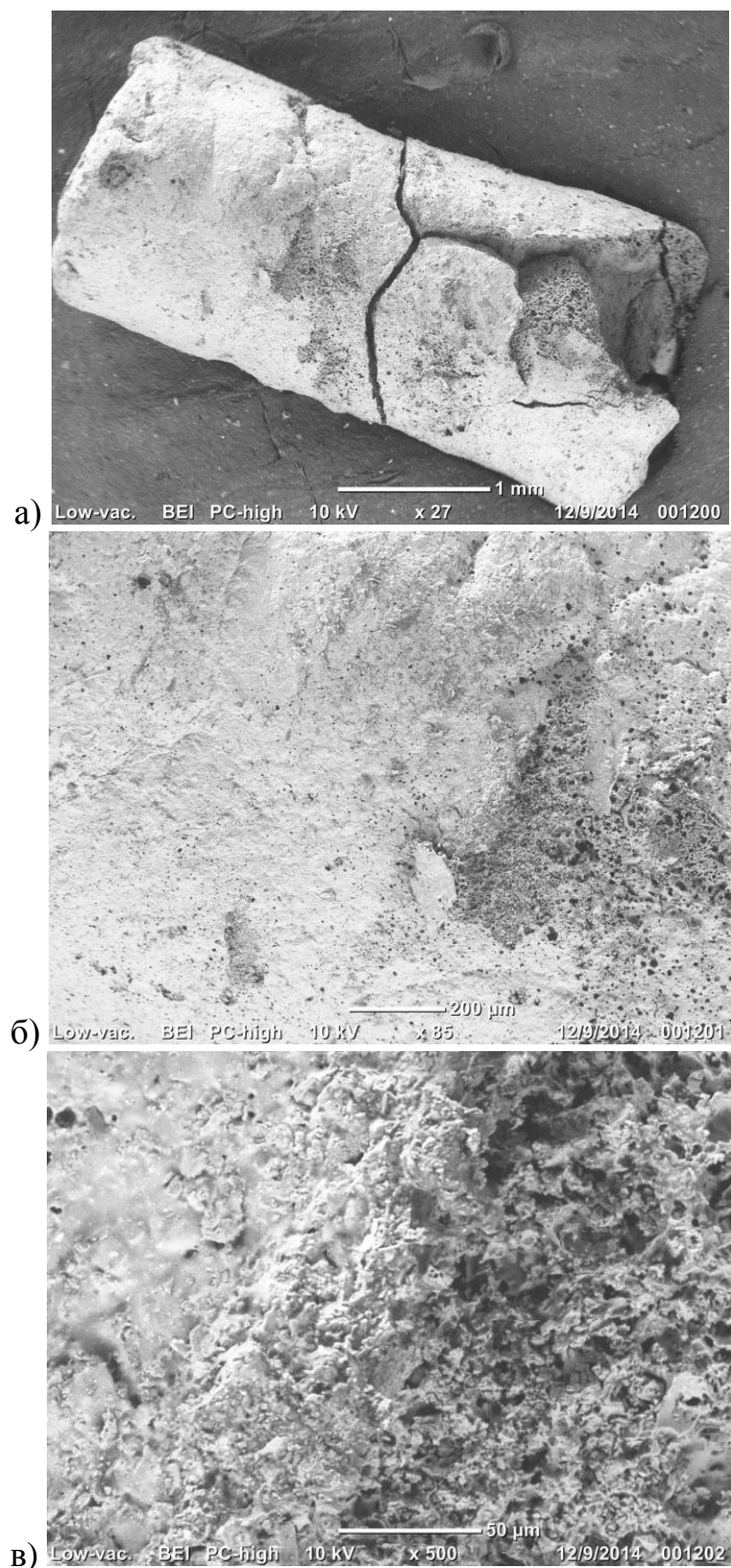


Рисунок 4. Микроструктура цеолита (а,б,в)

К рисунку 4:

а – общий вид гранулы цеолита,

б – типичный вид поверхности излома,

в – мелкодисперсионная однородная структура гранулы цеолита.

Был сделан элементный микроанализ цеолита. Примеры снимков, полученных с помощью ЭДРС (рисунок 5).

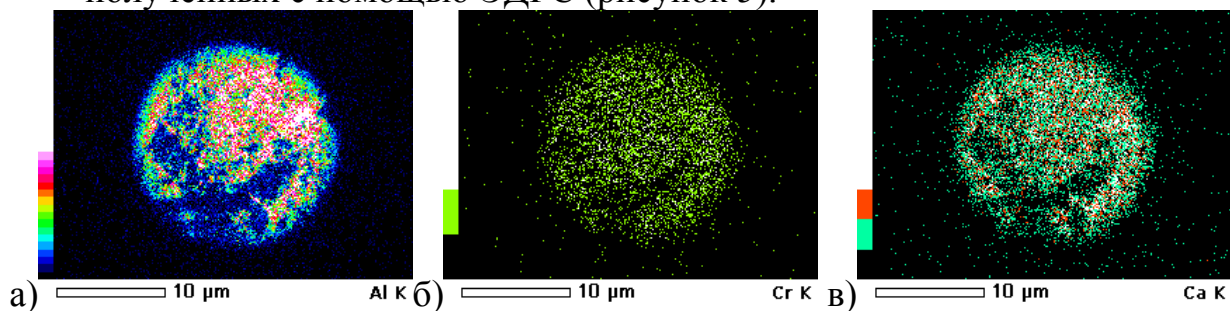


Рисунок 5. Элементный микроанализ цеолита (а,б,в)

Также как и для образца ККМ, проведен спектральный микроструктурный анализ на химический состав и для цеолита (рисунок 6).

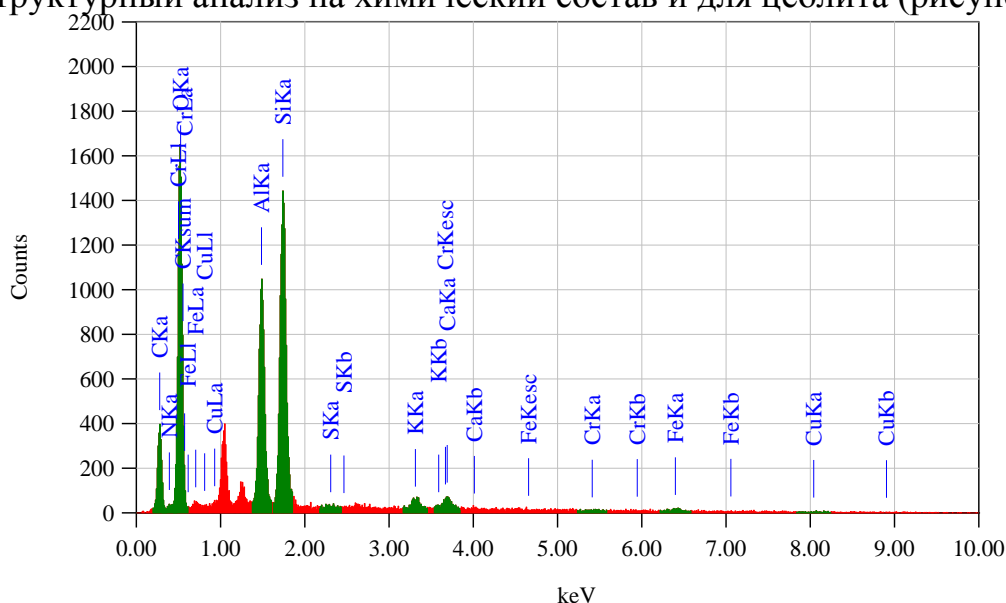


Рисунок 6. Спектральный микроструктурный анализ цеолита

Таблица 3—Элементный состав цеолита РЭМ (ЭДРС).

элемент	H	C	N	O	Al	Si	S	K	Ca
массовая доля, %	0	18,93	1,58	28,9	18,32	27,58	0,24	1,56	1,81

Вывод:

Применение РЭМ к композитным керамическим материалам, полученным из глин Оренбургской области, весьма целесообразно, поскольку РЭМ позволяет получить информацию о составе и структуре ККМ одновременно, которая (информация) не может быть получена другими методами.

Список литературы

1. Растровый электронный микроскоп (РЭМ) JEOL JCM-6000. Режим доступа: <http://www.arttool.ru> –20.11.2014.

2. *Каныгина, О.Н., Фракционные составы кирпичных глин Оренбуржья/Кравцова О.С., Четверикова А.Г., Кулеева А.Х., Сальникова Е.В., Волков Е.В., Шамбулатова А.Т. // Вестник ОГУ, 2011. - № 12. – С. 396-398.*

СОЗДАНИЕ ЛАБОРАТОРНОЙ УСТАНОВКИ ДЛЯ ДЕМОНСТРАЦИИ СПРАВЕДЛИВОСТИ ЗАКОНОВ ЭЛЕКТРОЛИЗА ФАРАДЕЯ КАК ПРИМЕР ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДА ПРОЕКТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИН ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОГО ЦИКЛА

Викторов В.В.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Современный этап развития науки и техники предъявляет повышенные требования к выпускникам технических специальностей университетов. В условиях постоянно обновляющейся производственной и научной базы современному выпускнику необходимо уметь самостоятельно формулировать задачи, самостоятельно искать способы их решения, и, если таковых нет, самостоятельно создавать алгоритмы решения актуальных задач [1]. Данная работа подготовлена в рамках применения метода проектов при обучении дисциплинам естественнонаучного цикла.

Целью данной работы было создание экспериментальной лабораторной установки для демонстрации справедливости законов электролиза Фарадея. Электролиз — физико-химический процесс, состоящий в выделении на электродах составных частей растворённых веществ или других веществ, являющихся результатом вторичных реакций на электродах, который возникает при прохождении электрического тока через раствор, либо расплав электролита [2]. Созданная нами установка представляет собой гальваническую ванну (см. рисунок 1).

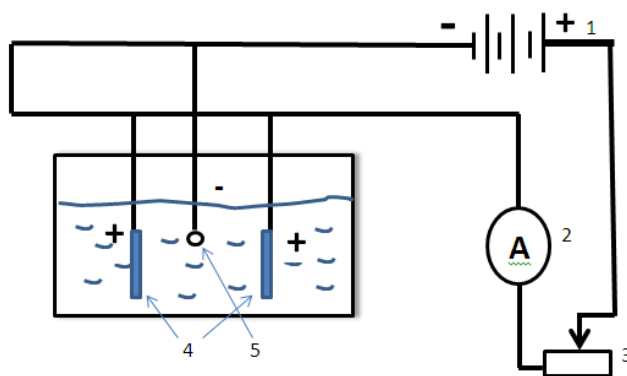


Рисунок 1. Схема электролитической установки

Цепь состоит из источника тока (1), с изменяющимся напряжением на 5В и на 12В. Амперметр (2) с реостатом (3). Две графитовые пластины (4), на которые подается «плюс», а «минус» на элемент над которым проводятся опыты (5). В качестве электролита использовался водный раствор медного купороса.

Нами были проведены опыты по изучению законов Фарадея. Первый закон гласит, что масса вещества m , выделяющегося на электроде, при прохождении электрического тока прямо пропорциональна значению q электрического заряда, пропущенного через электролит: $m = kq$, где k –

электрохимический эквивалент вещества, численно равный массе вещества, выделившегося при прохождении через электролит единицы количества электричества. При пропускании через электролит постоянного тока I в течение секунды $q = It$, $m = kIt$ [3].

В соответствии со вторым законом Фарадея для данного количества электричества (электрического заряда) масса химического элемента, осаждённого на электроде, прямо пропорциональна эквивалентной массе элемента. Эквивалентной массой вещества является его молярная масса, делённая на целое число, зависящее от химической реакции, в которой участвует вещество.

Мы рассматривали осаждение меди на электрод, в качестве которого использовалась медная пластина. Первый опыт заключался в определении зависимости изменения массы монеты от подаваемой силы тока в течение 30 минут. Нами были получены результаты, которые были представлены в виде графика:

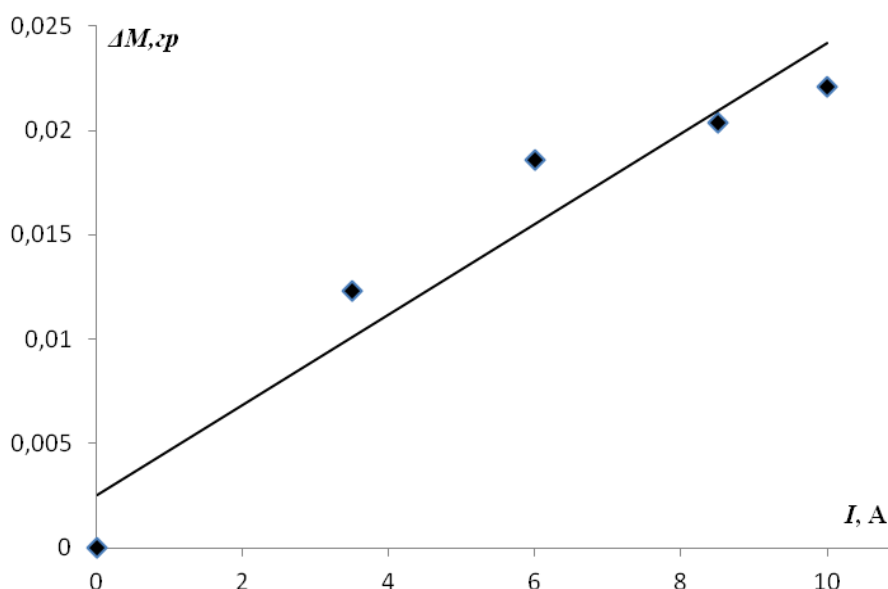


Рисунок 2. Зависимость массы осажденного вещества от силы тока

Как видно на графике, зависимость массы осажденного вещества от силы тока линейная, что демонстрирует справедливость законов Фарадея.

Второй опыт заключался в том, что мы рассматривали изменение массы электрода через разные промежутки времени, при одной и той же силе тока 9А. Также по конечным результатам был построен график (рисунок 3).

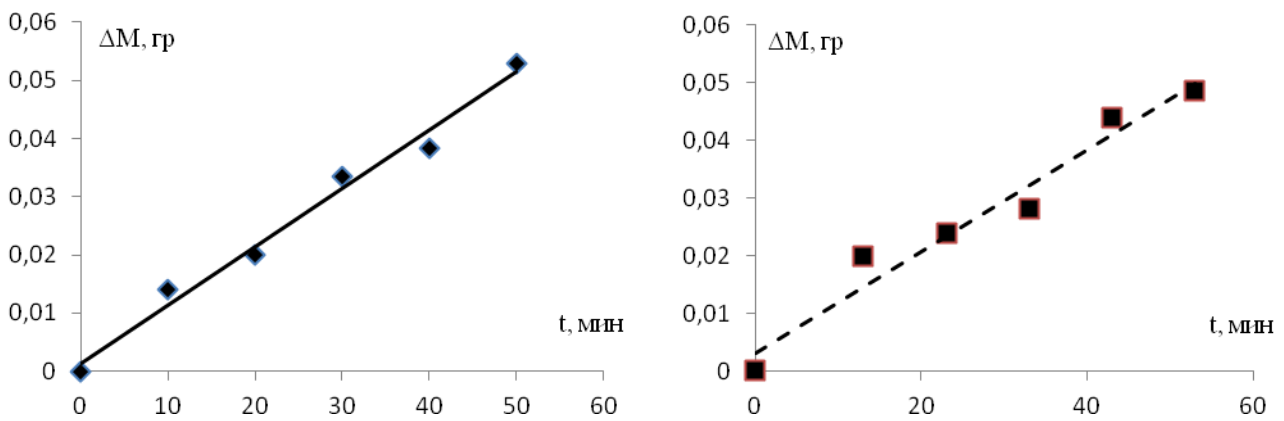


Рисунок 3. Зависимости изменения массы от времени

На рисунке 3 слева изображен график, полученный при первом измерении массы спустя 10 минут от начала опыта, интервал измерения – 10 минут. Справа на рисунке 3 изображены результаты аналогичного опыта, отличающегося первым временем измерения: 13 минут от начала опыта, шаг измерения так же равен 10 минут. Приведем оценку погрешности измерения массы. Опыты были проделаны на лабораторных весах с точностью до 0,0001 г. Погрешность равна $\Delta M = \pm 0,00005$ г.

Как видно из графиков, изменение массы зависит от времени протекания реакции. Мы видим, что при разном контрольном времени, изменение массы отличается незначительно. Обобщая вышесказанное, можно сделать вывод о воспроизводимости результатов опыта.

Подводя итог, можно сделать вывод, что созданная нами лабораторная установка позволяет демонстрировать справедливость законов электролиза Фарадея. Данная установка может успешно применяться как для проведения демонстраций на лекционных занятиях по физике и химии, так и для проведения лабораторных работ.

Список литературы

1. Гуньков В.В. Об оценке эффективности развития научно-исследовательского потенциала при изучении физики (на примере Оренбургского университета) / В.В. Гуньков // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2014. – №2. – С.79-85.
2. Андреев И.Н. Лекционный курс «Введение в электрохимические технологии» / И.Н. Андреев – Казань: КГТУ, 2006. – 78 с.
3. Савельев И.В. Курс общей физики. В 5-и тт. Том 2. Электричество и магнетизм / И.В. Савельев - Лань, 2011.

РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ КОМПОЗИТНОГО КЕРАМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА ИЗ ОРЕНБУРГСКИХ ГЛИН

Воробьев И.В.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Керамический композитный материал (ККМ) на основе полиморфных и полидисперсных глин требуют для своего исследования новых подходов. Одним из таких является попытка использования метода рентгенофлуоресцентный анализ.

Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) — один из современных спектроскопических методов исследования вещества с целью получения его элементного состава. С помощью него могут анализироваться различные элементы от бериллия (Be) до урана (U).[1] Метод РФА основан на сборе и последующем анализе спектра, полученного путём воздействия на исследуемый материал рентгеновским излучением. При облучении атом переходит в возбуждённое состояние, заключающееся в переходе электронов на более высокие энергетические уровни. В возбуждённом состоянии атом пребывает крайне малое время, порядка одной микросекунды, после чего возвращается в спокойное положение (основное состояние). При этом электроны с внешних оболочек либо заполняют образовавшиеся вакантные места, а излишек энергии испускается в виде фотона, либо энергия передается другому электрону из внешних оболочек (оже-электрон). При этом каждый атом испускает фотон с энергией строго определённого значения, например железо при облучении рентгеновскими лучами испускает фотоны $K\alpha = 6,4$ кэВ. Далее соответственно по энергии и количеству квантов судят о строении вещества.

В качестве источника излучения могут использоваться как рентгеновские трубки, так и изотопы каких-либо элементов. Поскольку каждая страна имеет свои требования к ввозу и вывозу излучающих изотопов, в производстве рентгенофлуоресцентной техники в последнее время стараются использовать, как правило, рентгеновскую трубку. Трубки могут быть как с родиевым так и с медным, молибденовым, серебряным или другим анодом. Анод трубки, в некоторых случаях, выбирается в зависимости от типа задачи (элементов, требующих анализа), для решения которой будет использоваться данный прибор. Для разных групп элементов используются различные значения силы тока и напряжения на трубке. Для исследования лёгких элементов вполне достаточно установить напряжение 10 кВ, для средних 20-30 кВ, для тяжелых — 40-50 кВ. В нашем случае использовалось напряжение на трубки 40кВ. После возбуждения спектр регистрируется на специальном детекторе. Чем лучше спектральное разрешение детектора, тем точнее он сможет отделять друг от друга фотоны от разных элементов.[2]

Для рентгенофлуоресцентного анализа использовался Рентгенофлуоресцентный спектрометр СПЕКТРОСКАН МАКС-G



Рисунок 1. Рентгенофлуоресцентный спектрометр СПЕКТРОСКАН МАКС-G

Рентгенофлуоресцентный спектрометр СПЕКТРОСКАН МАКС-G предназначен для определения содержания химических элементов в различных веществах, находящихся в твердом, порошкообразном или растворенном состояниях, а также нанесенных на поверхности и осажденных на фильтры.

Спектрометр СПЕКТРОСКАН МАКС-G может применяться в различных отраслях науки и техники для анализа элементного состава вещества, а также для экологического контроля окружающей среды.

Данный метод был выбран для исследования КKM на основе оренбургских глин, так как он более точный и менее энергозатратным чем химический анализ. Главным преимуществом рентгенофлуоресцентного анализа для определения химического состава является то, что в отличие от химического анализа не происходит никакого изменения в анализируемом веществе, человеческий фактор при анализе сводится к минимуму, что позволяет получить более точные результаты.

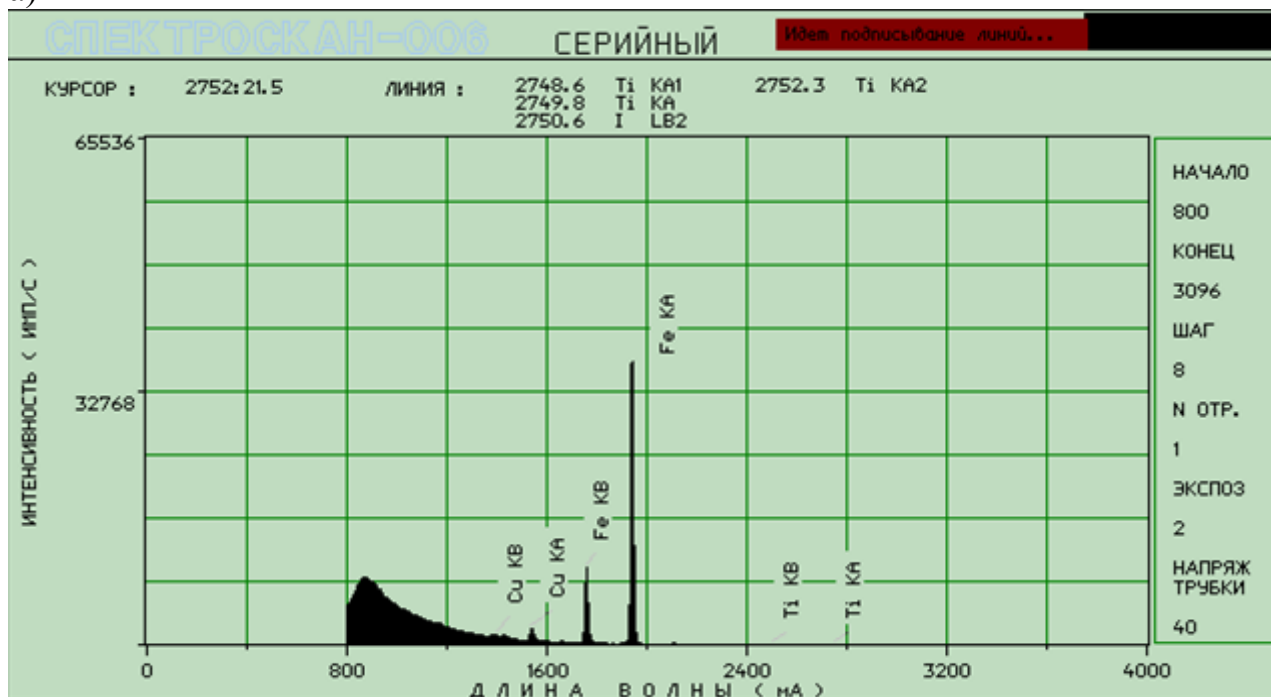
РФА	Хим.анализ
Fe	SiO ₂
Cu	Fe ₂ O ₃
Ti	TiO ₂
Zn	Al ₂ O ₃
Mg	CaO
Ni	MgO
Mg	Na ₂ O
	K ₂ O

Таблица 1.Элементы полученные методами РФА и химического анализа[3].

В результате рентгенофлуоресцентного анализа были получены

следующие спектры отражения образцов ККМ (Рисунок 2) после сушки и обжига при 1000°C.

а)



б)

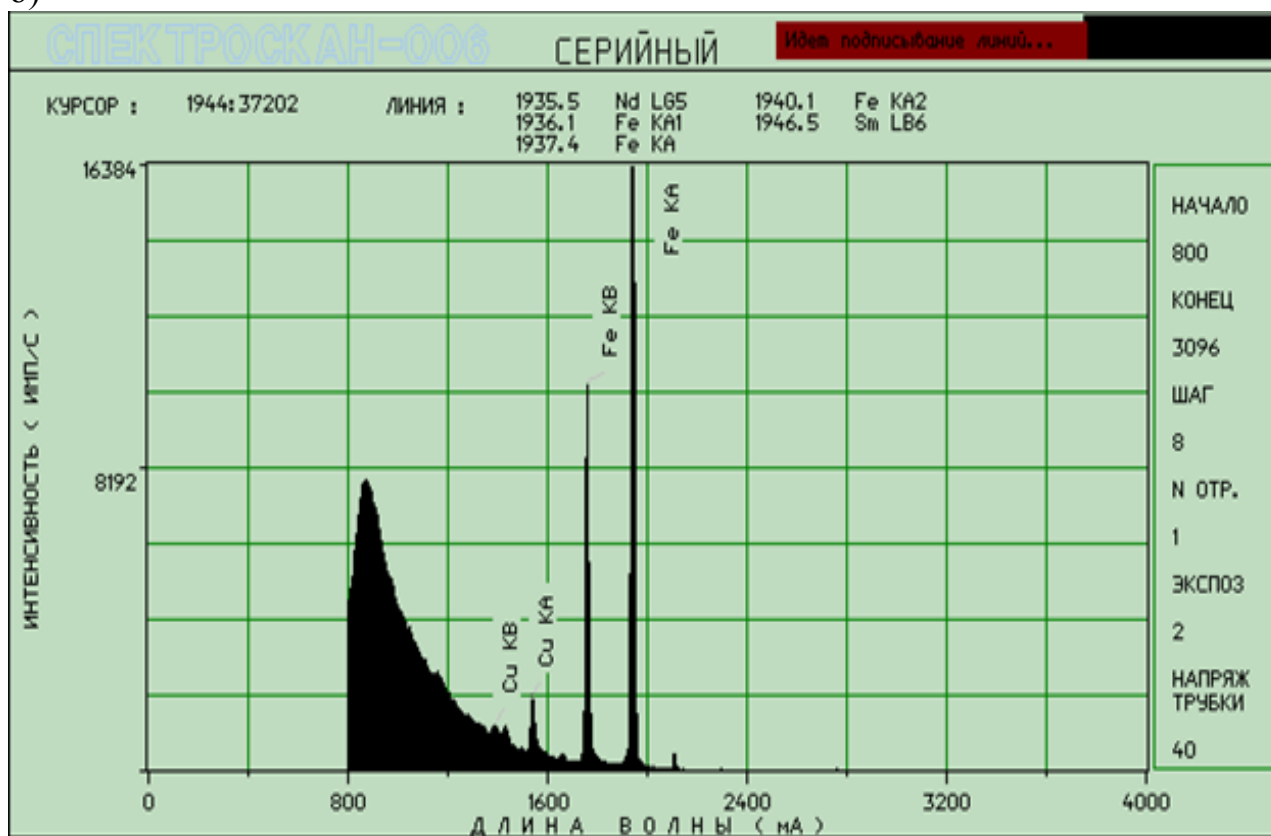


Рисунок 2. Содержание металлов в ККМ после сушки (а) и обжига при температуре 1000°C.

Видно, что в глинах содержатся в достаточном количестве Fe, Cu.

t	$\Sigma h(\text{Fe})_{\text{имп/с}}$	$\Sigma h(\text{Cu})_{\text{имп/с}}$
160°	47789	4840,6
700°	58436,2	3993,6
800°	55424	3404,8
900°	52565,2	3328
1000°	48725,2	2817

Таблица 2. Зависимость количества металла от температуры термообработки.

Вывод:

Метод рентгенофлуоресцентного анализ необходим для более достоверной информации о содержащихся в керамических ККМ металлах и вариации их содержания зависящая от температуры воздействия.

Список литературы

1. Рентгенофлуоресцентный анализ. Электронный режим:
<http://ru.wikipedia.org> – 2.12.214
2. X-Ray Fluorescence. Электронный режим:
http://serc.carleton.edu/research_education/geochemsheets/techniques/XRF.html - 8.12.2014
3. Каныгина, О.Н., Фракционные составы кирпичных глин Оренбуржья / Кравцова О.С., Четверикова А.Г., Кулеева А.Х., Сальникова Е.В., Волков Е.В., Шамбулатова А.Т. // Вестник ОГУ, 2011. - № 12. – С. 396-398.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В СПЕКАЕМОЙ КРЕМНЕЗЕМИСТОЙ КЕРАМИКЕ

Гуныков В.В.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Описан метод расчета температурных полей в спекаемом керамическом образце цилиндрической формы, имеющем неоднородный состав. Модерирование неоднородности проводилось методом элементарной ячейки. Рассмотренный метод отличается простотой реализации и позволяет учитывать фазовые превращения среды.

Ключевые слова: температурное поле, неоднородная среда, керамика, теплопроводность.

Исследуемый образец имеет форму цилиндра, высота которого $h = 10$ мм, радиус $R = 50$ мм. Изготовлен из смеси SiO_2 и Al_2O_3 с включениями зерен SiC.

В процессе обжига образец помещается в печь, температура которой постоянна в течение длительного времени. Таким образом, температура на поверхность образца принимается равной температуре печи.

Моделирование тепловых полей осуществляется с помощью уравнения теплопроводности. Так как исследуемый образец является цилиндром, для записи уравнения теплопроводности использовались цилиндрические координаты. Образец задавался областью пространства

$$D_3: r \in [0, R], z \in \left[-\frac{h}{2}, \frac{h}{2}\right], \varphi \in [0, 2\pi]$$

Температура в каждой точке образца в данный момент времени описывалась функцией, зависящей от четырех переменных $u(r, \varphi, z, t)$. Эта функция удовлетворяет классическому уравнению теплопроводности

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2},$$

с начальными и граничными условиями:

$$u(r, \varphi, z, 0) = T_0 \text{ для } \forall r, \varphi, z \in D_3,$$

$$u(R, \varphi, z, t) = u\left(r, \varphi, \frac{h}{2}, t\right) = u\left(r, \varphi, -\frac{h}{2}, t\right) = T_1 \text{ для } t > 0.$$

где T_0 – начальная температура, T_1 – температура обжига, равная температуре печи.

Используя соображения симметрии, можно существенно упростить задачу, сократив необходимый для ее решения объем вычислений. Во-первых,

учитывая осевую симметрию образца, уравнение можно привести к виду, не зависящему от угла φ , то есть искомая функция будет зависеть только от трёх переменных: $u(r, z, t)$. Во-вторых, воспользовавшись симметрией относительно плоскости $z = 0$, можем рассматривать только область $z > 0$. Таким образом, задача принимает вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2},$$

$$\text{в области } D_2: r \in [0, R], z \in \left[0, \frac{h}{2}\right],$$

начальные и граничные условия:

$$u(r, z, 0) = T_0 \text{ для } \forall r, z \in D_2,$$

$$u(R, z, t) = u\left(r, \frac{h}{2}, t\right) = T_1,$$

$$\left. \frac{\partial u(r, z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial u(r, z, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0.$$

Задача решалась методом сеток. На рисунке 1 изображены изотермы в осевом сечении цилиндрического образца. Для наглядности осевое сечение восстановлено полностью, в то время как моделирование производилось лишь для D_2 . Данные моделирования согласуются с результатами экспериментов [1].

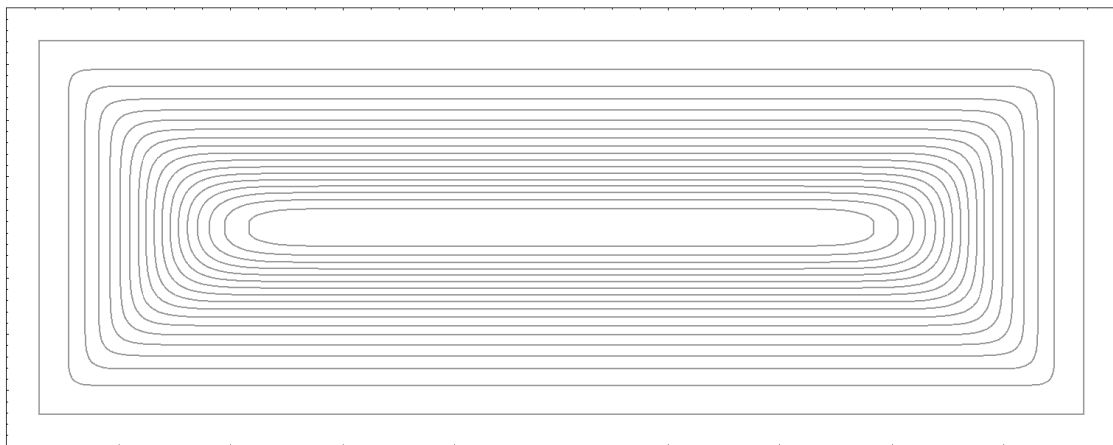


Рисунок 1 - Осевое сечение цилиндрического керамического образца, обжигаемого при постоянной температуре

Следующим этапом развития модели было описание изотерм образца с включениями. Для простоты включения описывались концентрическими кольцами квадратного сечения. Аналогичный способ имитации теплопроводности неоднородных структур широко применяется и описан, например, в [2]. Отличие нашего метода состоит в том, что мы используем не прямоугольные параллелепипеды, а кольца. Пример осевого сечения образца представлен на рисунке 2. Изотермы для этого образца изображены на рисунке 3. Следует обратить внимание, что далее изображается не полное осевое

сечение, а лишь та часть, которая непосредственно моделировалась. Для восстановления полного изображения осевого сечения необходимо воспользоваться соображениями симметрии.

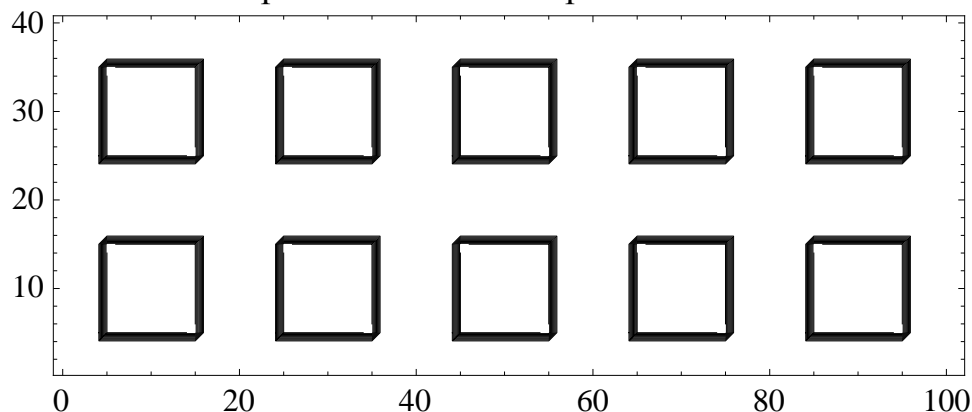


Рисунок 2 - Изображение эффективного сечения образца с включениями

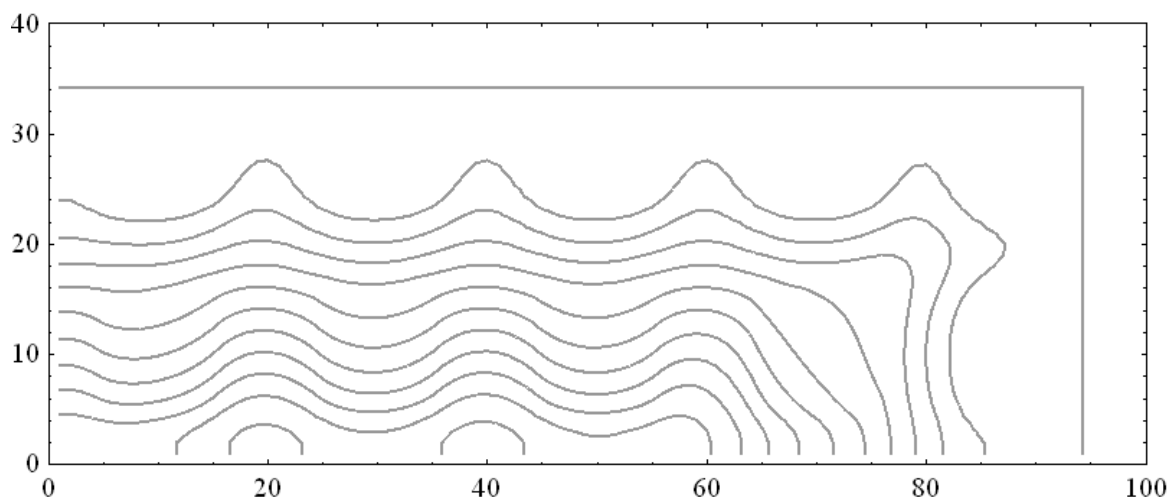


Рисунок 3 - Изотермы в объеме образца, представленного на рисунке 2

Полученные изотермы, очевидно, не отражают абсолютно точно реальной картины, поскольку в экспериментальном образце включения имеют размеры, значительно меньшие по сравнению с размерами образца. Полученные нами изотермы отражают динамику распространения тепловой энергии от поверхности цилиндрического образца к его центру. Они так же удовлетворительно согласуются с результатами, представленными в [1].

Список литературы

1. Четверикова, А.Г. Разрушение керамических материалов со сложным составом под действием термических напряжений / А.Г. Четверикова, О.Н. Каныгина // Вестник Кыргызско-Российского славянского университета. – 2007. - Т. 7. - №8. – С.18-22
2. Дульнев, Г. Н. Процессы переноса в неоднородных средах / Г. Н. Дульнев, В. Н. Новиков. - М.: Энергия, 1991. – 221 с.

ВЛИЯНИЕ БИВАКАНСИИ Pt В КРИСТАЛЛЕ Pt₃Al НА НЕЛИНЕЙНУЮ ЛОКАЛИЗОВАННУЮ МОДУ БОЛЬШОЙ АМПЛИТУДЫ

Захаров П.В., Ерёмин А.М., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В.
Алтайская государственная академия образования
им. В.М. Шукшина, г. Бийск
Алтайский государственный технический университет
им. И.И. Ползунова, г. Барнаул
Кузбасский государственный технический университет
им. Т.Ф. Горбачева, г. Новокузнецк

Методом молекулярной динамики в работе исследуются взаимодействия нелинейной локализованной моды большой амплитуды с бивакансией Pt в кристалле Pt₃Al. Выявлены зависимости времени жизни нелинейной локализованной моды от начальной температуры модельного кристалла, а также расстояния до внедрённой бивакансии Pt в плоскости (111) кристалла.

Введение. В середине прошлого века активно изучались возбуждения, носителями которых являлись точечные дефекты, например, атомы замещения или атомы вблизи вакансий или вакансионных комплексов [1]. В данный момент локализованные колебания активно изучаются многими исследователями, но вектор исследований сместился в направлении возможности локализации колебаний в бездефектных кристаллах. Такие локализованные колебания называются дискретными бризерами (ДБ) [2].

Возможность локализации энергии в бездефектных дискретных упорядоченных структурах, которая впервые предсказана авторами работы [3], получила экспериментальное подтверждение. Дискретные бризеры были обнаружены в различных областях: в нелинейной оптике [4, 5], джозефсоновских сверхпроводящих контактах [6], в аниферромагнетиках [7]. Возможность возбуждения ДБ в трехмерном кристалле со структурой NaCl исследовалась методом молекулярной динамики в работах [8 - 11].

Активно изучается возможность существования ДБ в кристаллах с составом A₃B [12-16]. В указанных работах подчеркивается важность таких процессов в кристаллах и возможность их влияние на структуру и свойства кристалла.

Также одним из актуальных направлений исследования является изучение солитонных объектов в различных средах, к которым относится дискретный бризер, и процессов связанных с их движением и взаимодействием с другими объектами среды существования солитонов. Такие задачи, рассматриваемые в кристаллических телах имеют прямое отношение к проблемам пластичности и прочности твердых тел. При этом важное значение имеет понятие точечных топологических солитонов, которые представляют собой вакансии, атомы замещения, краудионы и межузельные атомы [17 - 19].

Описание модели и методика эксперимента. В данной работе методом

молекулярной динамики изучается взаимодействие нелинейной локализованной моды – дискретного бризера в кристалле Pt_3Al с внедренной бивакансией Pt.

Рассматриваемая модель представляла собой объемный кристалл стехиометрии A_3B (рис. 1), атомы которого взаимодействовали посредством парного потенциала Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (e^{-\alpha r_{ij}} - 2),$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами.

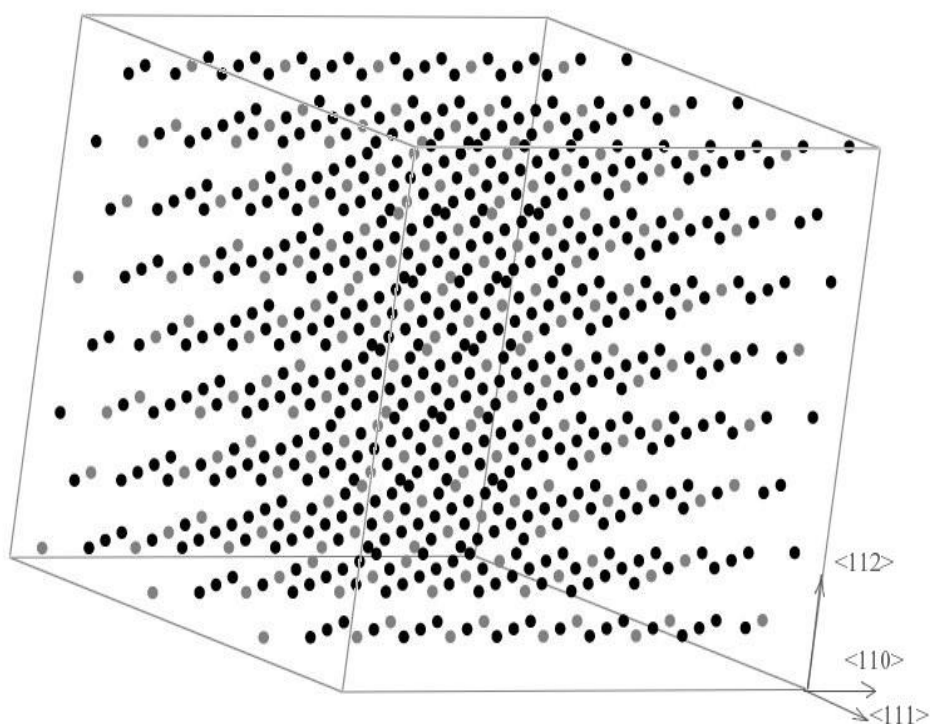


Рис. 1. Трехмерная расчетная ячейка Pt_3Al , содержащая 7198 атомов. Серым цветом обозначены атомы Al, черным – Pt.

Как показано в работах [14,16] возбуждение ДБ наблюдалось при отклонении атома алюминия вдоль направления $[100]$, или под углом не больше, чем 5 градусов к указанному направлению. При начальном отклонении атома на 0.7 \AA максимальная кинетическая энергия атома несущего нелинейную локализованную моду имеет значение около 5 эВ, частоты колебаний ДБ в этом случае могут лежать в широком диапазоне в зависимости от параметров потенциала и решетки, в данном случае возбуждались колебания с периодом 0,08 пс

Результаты и обсуждение. Для изучения процессов, возникающих при взаимодействии нелинейной локализованной моды с вакансией Pt в Pt_3Al нами проводились эксперименты при отклонении атома Al вдоль направления $[100]$

на величину $0,7 \text{ \AA}$ вблизи внедренной бивакансии Pt в плоскости (111) (рис. 2). Начальная температура эксперимента 0 K .

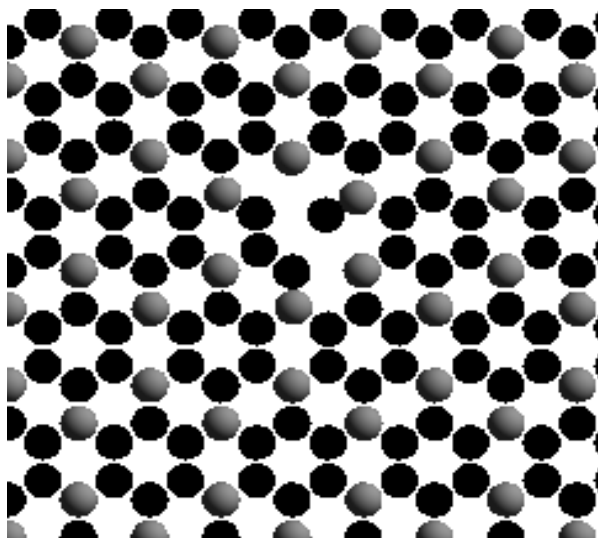


Рис. 2. Начальная конфигурация расположения бивакансии Pt в плоскости (111) модельного кристалла Pt₃Al (чёрным цветом показаны атомы Pt, серым атомы Al).

На рис. 3 показана зависимость времени жизни нелинейной локализованной моды от расстояния до внедрённой бивакансии Pt.

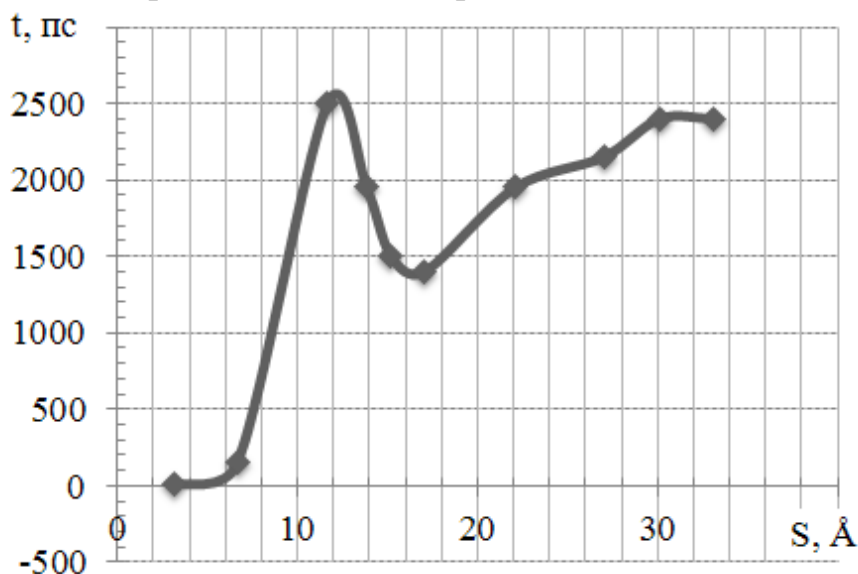


Рис. 3. Зависимость времени жизни нелинейной локализованной моды от расстояния до внедрённой бивакансии Pt (ось абсцисс – расстояние S в Å от бивакансии Pt до атома Al, где осуществлялось возбуждение ДБ; ось ординат – время жизни t нелинейной локализованной моды в пикосекундах).

Как видно из рис. 3 бивакансия Pt существенно влияет на время жизни ДБ. Время жизни ДБ уменьшается при приближении к бивакансии. Но на некотором расстоянии от бивакансии Pt наблюдается резкое увеличение времени жизни ДБ (см. рис. 4).

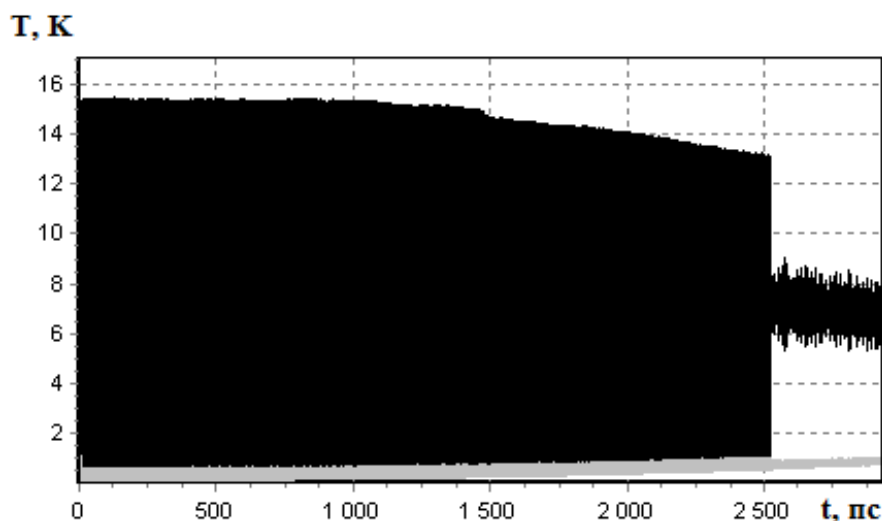


Рис. 4. Температурные кривые подрешеток Al (черным цветом графика) и Pt (серый цвет графика).

Предполагается, что существует некоторая область, окружающая бивакансию Pt в которой время жизни ДБ максимально. Возможной причиной увеличения времени жизни высокоамплитудной локализованной моды может быть локальное уширение запрещенной зоны в фоновом спектре модельного кристалла. Об этом свидетельствует пик на графике рис. 3. Также к возможным причинам полученной аномалии можно отнести тот факт, что в данной области ДБ имеет более широкий профиль, т.е. большее количество атомов вовлечено в процесс согласованных колебаний.

График зависимости времени жизни ДБ в модельном кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt от начальной температуры кристалла приведен на рис. 5. В данном случае температура эксперимента варьировалась от 0 К до 170 К. Характерным является то, что при нулевой начальной температуре время жизни ДБ составляет 2500 пс, а при повышении до 3 К – 540 пс.

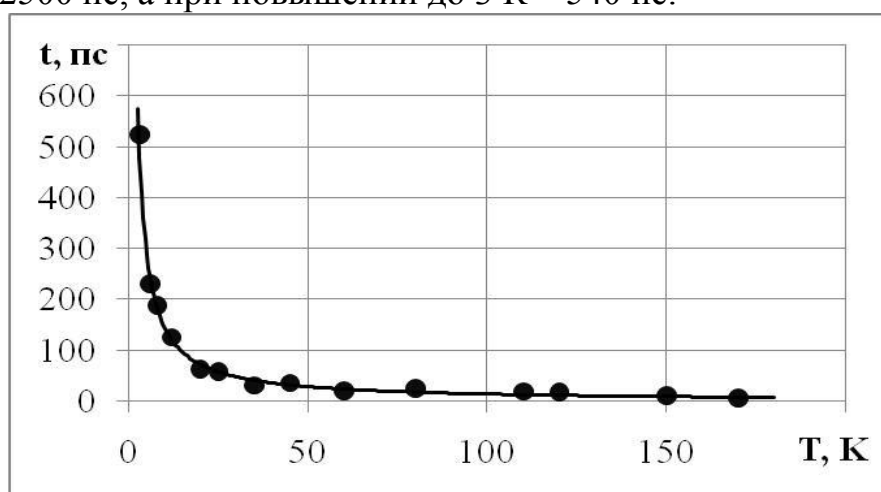


Рис. 5. Зависимость времени жизни дискретного брызера в модельном кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt от начальной температуры кристалла.

Из рис. 5 видно, что незначительное повышение температуры модельной ячейки сплава Pt_3Al с бивакансией Pt приводит к существенному уменьшению

времени жизни ДБ. Решающим фактором, обуславливающим это, является то, что атомы, окружающие основной атом, на котором происходит локализация колебаний, не совершают согласованных с ним колебаний. Чем выше начальная температура ячейки, тем меньшее количество атомов входят в состав ДБ, делая его профиль более узким и соответственно менее устойчивым к воздействиям со стороны других атомов кристалла. Таким образом проявляется роль способности системы к самоорганизации на начальных этапах формирования ДБ, в виде вовлечения атомов в согласованные колебания с частотой, входящей в запрещенную зону фононного спектра модельного кристалла.

Начиная с температуры 170 К нелинейная локализованная мода в кристалле Pt_3Al с бивакансией Pt становится сравнительно неустойчивой и быстро разрушается (см. рис. 6).

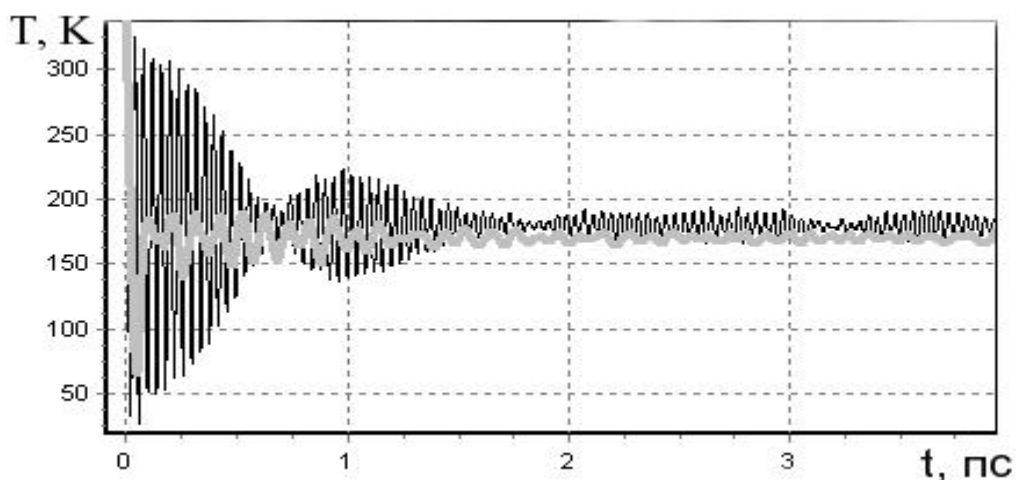


Рис. 6. Температурные кривые подрешеток Al (черным цветом графика) и Pt (серым цветом графика) при температуре 170 К.

Таким образом, методом молекулярной динамики установлено, что бивакансия Pt в сплаве Pt_3Al оказывают существенное влияние на нелинейные локализованные моды в случае близкого к ним расположения. Воздействие проявляется в разрушение высокоамплитудных локализованных колебаний с последующим рассеиванием энергии по кристаллу. Однако стоит отметить, что в процессе деградации колебаний большой амплитуды, рассеивание преимущественно происходит в подрешетку Al, где энергии остается локализованной за счет наличия запрещенной зоны в фононном спектре кристалла Pt_3Al в течение продолжительного времени.

Список литературы

1. Марадудин, А. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении / А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс: М., Мир. - 1965. - 384 с.
2. Flach, S. Discrete breathers advances in theory and application / S. Flach, A.V. Gorbach // Phys. Rep. - 2008. - 467. - P. 1 - 116.
3. Sievers, A.J. Intrinsic Localized Modes in Anharmonic Crystals / A.J. Sievers, S. Takeno // Phys. Rev. Lett. - 1988. - v. 61. - № 8. - P. 970 - 973.

4. Eisenberg, H.S. *Discrete Spatial Solitons in Waveguide Arrays* / H.S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, R. Boyd, J.S. Aitchison // *Phys. Rev. Lett.* - 1998. - V. 81. - P. 3383.
5. Kivshar, Yu.S. *Optical solitons* / Yu.S. Kivshar, G.P. Agrawal // *Academic Press. Amsterdam.* - 2003. - 540 p.
6. Miroshnichenko, A.E. / A.E. Miroshnichenko, S. Flach, M.V. Fistul, Y. Zolotaryuk, J.B. Page // *Phys. Rev.* - 2001. – E. 64. - P. 600 - 601.
7. Schwarz, U.T. *Experimental Generation and Observation of Intrinsic Localized Spin Wave Modes in an Antiferromagnet* / U.T. Schwarz, L.Q. English, A.J. Sievers // *Phys. Rev. Lett.* - 1999. - V. 83. - P. 223.
8. Kiselev, S.A. / S.A. Kiselev, A.J. Sievers // *Phys. Rev.* - 1997, B. 55, 5755.
9. Дмитриев, С.В., Хадеева Л.З. Характеристики целевых дискретных бризеров в кристаллах со структурой NaCl / С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева // *Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика.* - 2010. - т. 18. - № 6. - С. 85 - 92.
10. Khadeeva, L.Z. *Discrete breathers in crystals with NaCl* / L.Z. Khadeeva, S.V. Dmitriev // *Phys. Rev.* - 2010. – B. 81. - 214306.
11. Дмитриев, С.В. Целевые дискретные бризеры в двухкомпонентном двумерном кристалле в состоянии теплового равновесия / С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева // *ФТТ.* - 2011. - т. 53. - №7. – С. 1353 - 1358.
12. Захаров, П.В. О влиянии температуры на устойчивость колебаний атома, несущего локализованную моду в трехмерном упорядоченном сплаве / П.В. Захаров // *Образование, наука, инновации – вклад молодых исследователей: материалы III (XXXV) Международной научно-практической конференции.* – Кемерово: ООО «ИНТ», 2008, вып. 9, Т. 1, С. 455 - 456.
13. Медведев, Н.Н. Локализованные колебательные моды в двумерной модели упорядоченного сплава Pt₃Al / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, О.В. Пожидаева // *ПЖТФ.* - 2011. - т. 37. - вып. 3. - С.7 - 15.
14. Медведев, Н.Н. О локализации энергии нелинейных и линейных колебаний атомов в модельной кристаллической решетке состава A₃B / Н.Н. Медведев, М.Д. Старостенков, П.В. Захаров, А.В. Маркидонов // *Письма о материалах.* – т. 3. – вып. 1. - 2013. - С. 34 - 37.
15. Medvedev, N.N. *Discrete breathers on the 3D model of Pt₃Al with L12 order* / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov // *Изв. Вузов. Физика.* – 2012. – Т.55. (11-3). - С. 113 - 116.
16. Medvedev, N.N. *Energy Localization on the sublattice of Pt₃Al with L₁₂ order* / N.N. Medvedev, M.D. Starostenkov, M.E. Manley // *Journal of Applied Physics.* - 2013. - V.114. - P. 213506(4).
17. Полетаев, Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах / Г.М. Полетаев // *Дисс. на соискание уч. степ. д. ф.-м. н. Барнаул.* - 2008. - 412 с.
18. Тетельбаум, Д.И. Эффект дальнего действия при малоинтенсивном облучении твердых тел / Д.И. Тетельбаум, Е.В. Курильчик, Ю.А. Менделева // *Поверхность. Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования.* –

2009. - № 3. – С. 94 - 103.

19. Захаров, П.В. Кооперативные явления при взаимодействии динамических и топологических солитонов с дефектами в различных модельных кристаллических решетках на основе ГЦК структуры / П.В. Захаров // Дисс. на соискание уч. степ. к. ф.-м.н. Барнаул. - 2012. - 165 с.

«Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта 14-08-90416 Укр_а».

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПОВЫШЕНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ В КОМПОЗИТНОМ КЕРАМИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛЕ НА АЛЮМОСИЛИКАТНОЙ МАТРИЦЕ

Каныгина О.Н., Четверикова А.Г.
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Согласно проведенным авторами исследованиям [1-5], армирование кремнеземистой керамической массы дисперсными частицами карбида кремния SiC можно считать эффективным средством повышения термомеханических характеристик композитных керамических материалов (ККМ) с расширенной областью применения. Абразивные порошки SiC - отходы производства полупроводникового кремния - являются ценным техногенным сырьем для создания ККМ. Результаты введения частиц карбида кремния в глиняную керамическую массу существенно зависят от многих факторов: химических и минералогических составов самой глины, режимов обжига, дисперсности фазового состава армирующих частиц.

В данной работе обобщены и проанализированы эффекты упрочнения ККМ с точки зрения теплофизических и структурных изменений в системе глина-SiC, происходящих в процессе синтеза композиционного керамического материала.

В работах [3-6] изучено влияние армирования частицами SiC керамической массы, представляющей собой нативную каолинит содержащую глину средней огнеупорности состава: SiO₂ - 66, Al₂O₃ - 30, TiO₂ - 1, Fe₂O₃ - 1, CaO - 0,3, MgO - 1, K₂O - 1 (масс. %), на термомеханические свойства полученного ККМ. Путем экспериментального подбора установлен оптимальный интервал содержания армирующих частиц от 15 до 25% (масс.). Вариация температуры обжигов в широком диапазоне от 1050 до 1400 °С при постоянной скорости нагрева 5 К/мин с выдержкой в течение 3 часов при максимальной температуре позволила получить общую картину изменения значений модуля упругости E (170 -350 МПа) и прочности на сжатие $\sigma_{сж}$ (40-80 МПа). Значения модуля упругости и прочности на сжатие различаются в 2 раза, что свидетельствует о сложности и многофакторности процессов, протекающих при синтезе ККМ. На рисунке 1 приведены значения коэффициентов спекания n и модулей упругости E для всего экспериментального комплекса исследований.

Согласно современным представлениям [7, 8], о кинетике синтеза керамики можно судить по значениям коэффициентов спекания n, определяемых через изменения кажущейся плотностей спекаемой керамики:

$$n = \rho_1 / 2(\rho_1 - \rho_2),$$

где ρ_1 и ρ_2 - кажущиеся плотности в начале и конце спекания, соответственно.

Синтез керамики начинается при условии $n \sim 1$. Оптимальными можно

считать условия спекания и формирования твердофазного каркаса при значениях $1 \leq n \leq 1,5$. К этой области относится фазовое пространство, включающее содержание частиц SiC от 15 до 25% (13 – 21 % по объему) и температуры обжига в интервале 1150 – 1300 °С. На механические свойства ККМ влияют дисперсность частиц абразивных порошков SiC, их фазовый состав и способность к полиморфным превращениям в заданном интервале температур. Известно, что карбид кремния имеет семь гексагональных политипов и кубическую модификацию [9]. Три из семи политипов термодинамически устойчивы вплоть до 1500-1700 °С, остальные метастабильны, т.е. способны к экзотермическим полиморфным превращениям при температурах выше 1000°С. Рентгенофазовый анализ карбидных порошков показал, что при температурах выше 1050С полиморфные превращения претерпевает около 0,3-0,4 объема всего SiC.

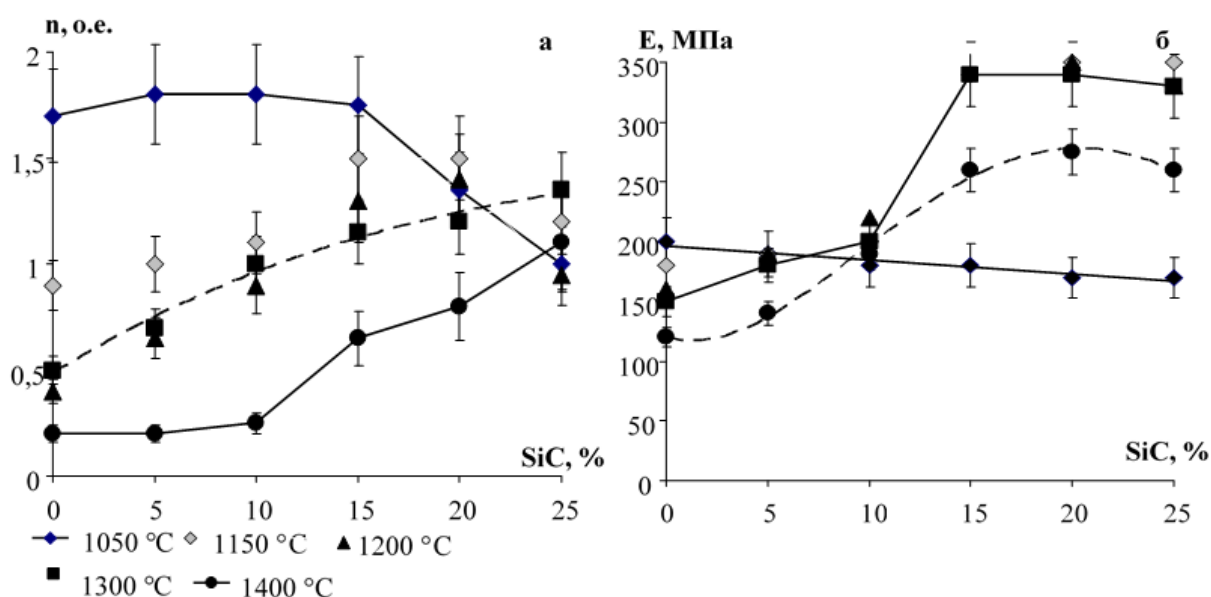


Рисунок 1 - Зависимости значений модуля упругости E (а) и коэффициентов спекания n (б) от содержания частиц SiC и температуры обжига

Известно [10], что для оптимальных процессов твердо-жидкофазного спекания требуется около 0,05-0,06 относительного объема жидкой фазы. В нашем случае для качественного спекания объемная доля частиц карбида кремния должна рассчитываться как $V=K/\alpha$, где α - объемная доля частиц, претерпевших полиморфные превращения, K – объемная доля образующейся жидкой фазы. Количество жидкой фазы увеличивается с повышением температуры обжига от 0,04 (1050 °С) до 0,2 (при 1400 °С). Очевидно, что граничные температуры обжига – 1050 и 1400 °С не обеспечивают оптимальных структур в ККМ: в первом случае происходит неполное спекание, активность которого существенно снижается с ростом содержания тугоплавких частиц SiC. При 1400 °С глинистая матрица закипает, образуется структура с крупными пористыми кластерами размерами в сотни микрометров, неравномерно распределенными по объему образца.

Это подтверждается анализом механических свойств синтезированных образцов по значениям модуля упругости E (рисунок 1,б). Повышение механической прочности в 1,5-2 раза наблюдается при содержании армирующих частиц в количестве 15 – 25 %; максимальный эффект упрочнения – после обжигов при температурах 1150 – 1300 °С. Отмечено также, что повышение содержания армирующих частиц до 25 % практически не влияет на механические свойства образцов.

По результатам первой серии экспериментальных исследований механических свойств была выбрана область фазового пространства: содержание частиц SiC принадлежит интервалу 15-25 % (масс.), а температура синтеза - 1150 – 1300 °С. Образцы ККМ, синтезированные при 1300°С, показали невысокую относительную термостойкость (менее 0,9) и были исключены из дальнейшего рассмотрения. Определение относительной термостойкости R состояло из термоциклирования навески монофракционного материала путем нагревания ее в течение фиксированного времени и резкого охлаждения в воде. После чего определялась потеря массы вещества исходной. Значение показателя относительной термостойкости рассчитывали по формуле [11]:

$$R = \frac{m_2}{m_1} \cdot 100\% ,$$

где m_1 - масса исходной навески монофракционного материала; m_2 - масса материала этой же фракции после термоциклирования.

Для 7 термоциклов показатель относительной термостойкости по трем сериям экспериментов изменялся в пределах от 0,95 до 0,99 в зависимости от температуры обжига и содержания частиц карбида кремния. Результаты второй серии экспериментов приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Термомеханические свойства образцов ККМ

Параметр	Режимы спекания композиционного материала					
	1150		1200		1250	
$T, ^\circ\text{C}$						
V (SiC), масс.%	1	2	1	2	1	2
	5	0	5	0	5	0
$E, \text{МПа}$	3	3	3	3	3	3
	40	30	50	40	40	20
$\sigma_{\text{сж}}, \text{МПа}$	6	7	8	7	8	6
	0	0	0	0	0	0
$R, \%$	9	9	9	9	9	9
	5	8	9	9	9	8

Оптимальное сочетание термомеханических свойств ККМ достигается при режиме спекания 1200 °С, 3 часа в воздушной среде со скоростью нагрева 5 град/мин. При 1200 °С в армированной и неармированной керамике формируются многофазные структуры, включающие в себя поры (газовую фазу), кристаллические и аморфные твердые фазы. Количественный состав этих фаз и характер их распределения в объеме материала определяет его

функциональные свойства.

Процессы твердофазного взаимодействия между частицами карбида кремния и глиной в процессе спекания исключены, однако частицы SiC активируют процессы фазовых превращений при твердофазном спекании за счет локального разогрева массы. На начальной стадии жидкофазного спекания они стимулируют образование жидкой фазы на поверхности карбидных частиц. Эффект армирования глины частицами SiC определяется интенсивностью следующей последовательности процессов: полиморфные превращения с экзотермическим эффектом → локальный разогрев ближайших слоев, окружающих частицы → образование жидкой фазы с невысокой вязкостью при плавлении низкотемпературных эвтектик кремнеземистой керамической массы → развитие стадии жидкостного спекания → повышение скорости фазовых превращений в глинистой матрице.

Составы и толщина прослоек жидких фаз, образующихся за счет экзотермических полиморфных превращений SiC, могут существенно изменяться в зависимости от температуры спекания и во многом определять прочность и характер разрушения керамического материала. Результаты экспериментального исследования температурной зависимости коэффициентов теплопроводности k керамических образцов, содержащих частицы SiC в количествах 0, 20 и 25% приведены на рисунке 2.

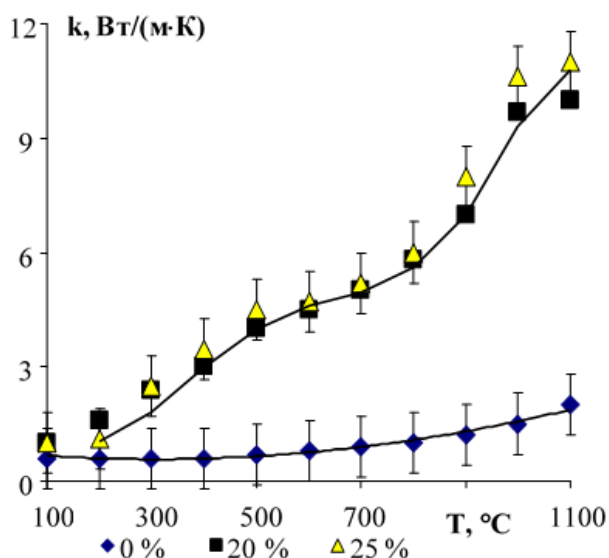


Рисунок 2 - Температурная зависимость коэффициентов теплопроводности k для образцов без карбидных частиц и образцов, содержащих 20 и 25 % SiC

С увеличением температуры теплопроводность армированных образцов растет быстрее, чем для образцов без карбидных частиц; при 1000 – 1100 °C значения k для ККМ выше в 5 – 6 раз. Это принципиально изменяет кинетику синтеза – скорости фазовых превращений и преобразований в поровом пространстве, что и подтверждается резким улучшением термомеханических свойств. При этом необходимо отметить, в диапазоне температур 1000-1100 °C значения k возрастают скачком в 1,5 раза за счет экзотермических полиморфных превращений и образования жидких прослоек.

Интересно проследить влияние карбидных частиц на тепло- и температуропроводность во время выдержки при высокой температуре. Такие исследования были проведены экспериментально путем измерений разницы температур на поверхности и в центре образцов диаметром 50 мм, выдерживаемых при 1000 °C в течение 60 минут. На рисунке 3 приведены результаты расчета коэффициентов

температуропроводности α по формуле:

$$a = k/\rho c,$$

где ρ и c – значения плотности и удельной теплоемкости образцов для данных случаев можно считать одинаковыми.

При температуре обжига $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ температуропроводность армированных образцов во время выдержки растет быстрее примерно в 5 раз, что обеспечивает большую полноту спекания, формирование структуры с оптимальными термомеханическими свойствами.

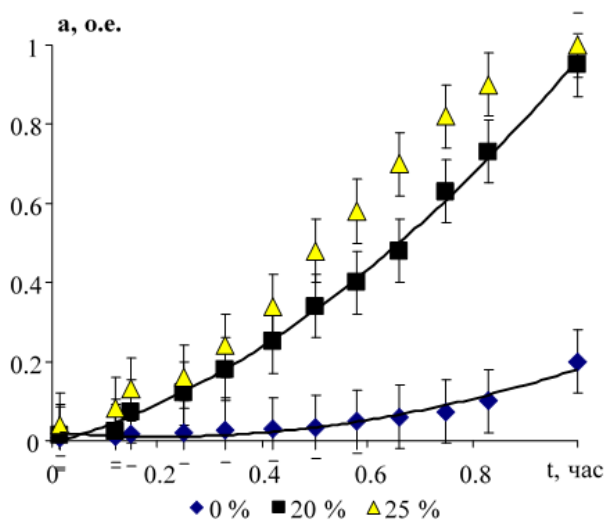


Рисунок 3 - Временные зависимости нормированных значений коэффициентов температуропроводности α для образцов без карбидных частиц и образцов, содержащих 20 и 25 % SiC

Микроструктуру ККМ оптимального состава удобно рассматривать как ячейку, в которой частицы SiC распределяются статистически однородно в непрерывной алюмосиликатной матрице.

При спекании традиционной и армированной керамик формируются принципиально различающиеся типы структурных микроячеек. Первая состоит из 3 элементов: газовых пор, кристаллических фаз и стеклофазы. Сторона такой кубической ячейки составляет около 50 мкм. В микроячейке армированной керамики содержится 5 элементов - пора, частица SiC , кристаллические фазы и два типа аморфных фаз. Одна аморфная фаза образуется в глинистой матрице, вторая обволакивает частицы и участвует в создании прочных межфазных границ.

Более мелкие элементы структуры второй микроячейки затрудняют распространение трещин и способствуют диссипации энергии при их ветвлении, что и приводит к резкому увеличению прочности.

В процессе спекания керамики без добавок диссипация межфазной поверхностной энергии происходит путем уменьшения суммарной площади границ раздела вследствие коалесценции, а в армированной керамике – за счет залечивания пор. Согласно современным представлениям [12,13], система, состоящая из частиц глинистых минералов и карбида кремния, в процессе спекания превращается в систему, поведение которой заключается в изменении структуры, проходит через последовательность устойчивых и неустойчивых состояний, определяемых путями эволюции структуры твердого каркаса и порового пространства. Смена доминирующих теплофизических процессов спекания объясняется структурными изменениями, происходящими при высоких температурах в армирующих карбидных частицах, на наноуровне – полиморфными превращениями элементарных ячеек нестабильных

модификаций.

Выводы.

1. Максимальные термомеханические свойства ККМ на основе каолинит содержащей глины средней огнеупорности наблюдаются при армировании ее дисперсными частицами SiC в количестве 15 - 20% (масс.). При содержании 20 и 25% частиц SiC теплофизические свойства массы при температурах синтеза практически одинаковы, значения модуля упругости начинают снижаться и, судя по коэффициентам n , определяющих кинетику спекания, структурные превращения замедляются.

2. Оптимальной температурой синтеза ККМ с указанным выше содержанием частиц SiC можно считать 1200⁰С, при которой доминируют процессы полиморфных превращений в частицах карбида кремния, стимулирующие фазовые превращения в самой глинистой матрице и образование порового пространства с однородным распределением мелких пор (до 5 мкм) в объеме образцов.

3. Основным фактором, обеспечивающим повышение механической прочности образцов ККМ, является экзотермическое полиморфное превращение в частицах SiC, способствующее локальному разогреву алюмосиликатной матрицы и формированию жидкофазных прослоек, равномерно распределяемых в объеме. При этом расстояния между частицами не превышают 2 средних размеров частиц.

Список литературы

1. Каныгина, О.Н. Прочность и кинетика разрушения армированной кремнеземистой керамики / О.Н. Каныгина, Т.А. Котляр, А.Г. Четверикова // Сб. статей по материалам Первой межд. конференции «Деформация и разрушение материалов». – М.: ИМЕТ им. Байкова, 2006. - С.391-393 .

2. Кайрыев, Н.Ж. Температурные поля в спекаемой кремнеземистой керамике, армированной частицами SiC / Н.Ж. Кайрыев, О.Н. Каныгина, А.Г. Четверикова, Т. А. Котляр // Проблемы моделирования и развития технологии получения керамики: Материалы международного семинара. – Бишкек, 2005. - С.63-66. ISBN 9967-05-155-3

3. Каныгина, О.Н. Влияние содержания и типов карбида кремния на структуру и дефектность кремнеземистой керамики / О.Н. Каныгина, Т.А. Котляр // Дефектоскопия. - РАН. - 2005. - №8. - С. 93-98.

4. Четверикова, А.Г. Разрушение керамических материалов со сложным составом под действием термических напряжений / О.Н. Каныгина, А.Г. Четверикова // Вестник Кыргызско-Российского славянского университета. – 2007. – Т.7. - №8. – С. 18-22.

5. Котляр, Т.А. Влияние карбида кремния на теплофизические и прочностные свойства кремнеземистой керамики : дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.14 / Котляр Татьяна Анатольевна. – Бишкек, 2000. – 144 с.

6. Каныгина, О.Н. Спекание кремнеземистой керамики, армированной частицами Si / О.Н. Каныгина, Т.А. Котляр, В.М. Лелевкин // Вестник Кыргызско-Российского славянского университета. - 2005. - Т. 5 - №1. - С. 52-

57.

7. Лотов, В.А. Параметр для оценки спекания керамических материалов / В.А. Лотов, Ю.И. Алексеев // *Стекло и керамика*. – 1998. - №7. - С. 26-30.

8 Лотов, В.А. Взаимосвязь изменений линейных размеров и объемного фазового состава керамики при спекании / В.А. Лотов // *Стекло и керамика*. - 2005. - №1. - С. 19-22.

9. Карбид кремния. Обзор – Киев : Гостехиздат УССР - 1963. - 315 с.

10. Шиманский, А.Ф. Физическая химия композиционных и керамических материалов : курс лекций / А.Ф. Шиманский. - Красноярский государственный университет. Химический факультет, 2008. - 57 с.

11. Термостойкость плавленого корунда [Электронный ресурс] / В.А. Перепелицын, И.В. Кормина, Л.А. Карпец, А.С.Зубов // *Новые огнеупоры*. – 2004. - Режим доступа : http://www.dinur.ru/publikacii_v_smi/10000676.

12. Беляков, А.В. Эволюция структуры при спекании керамики на основе оксида алюминия с эвтектической добавкой / А.В. Беляков, Е.С. Лукин, А.Н. Макаров // *Стекло и керамика* - 2002. №4. – С. 17-20.

13. Бакунов, В.С. Технология керамики с позиций синергетики (обзор) / В. С. Бакунов, А.В. Беляков // *Стекло и керамика*, 2005. - № 3. – С. 10 – 13.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЖИМОВ ЗАПУСКА И ВРАЩЕНИЯ ИОННОГО РЕАКТИВНОГО ДВИГАТЕЛЯ ПОСРЕДСТВОМ ГЕНЕРАТОРА ВАН ДЕ ГРААФА

Круссер Г.Ю., Комаревцев Д.Н.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Введение

Ионные реактивные двигатели нашли широкое применение в космических аппаратах для разгона их в открытом космосе. Этому типу двигателя в настоящее время принадлежит рекорд негравитационного ускорения космического аппарата в космосе — «Deep Space 1» смог увеличить скорость на 4,3 км/с, израсходовав 74 кг ксенона. Однако механизм работы таких двигателей крайне мало изучен. Они обладают бóльшим КПД по сравнению с химическими и ядерными ракетными двигателями, поэтому можно считать, что ионный двигатель – двигатель будущего. Изучение данной темы позволит сделать шаг в развитии потенциала ионных двигателей. Кроме того, созданная лабораторная установка может быть использована в учебном процессе, что будет способствовать повышению научно-исследовательского потенциала следующих поколений студентов [1].

Постановка целей

- Исследование модели ионного двигателя;
- Выбор оптимальной формы ионной вертушки по критерию КПД.

Исследование

1. Разработка генератора Ван де Граафа

Для запуска ионной вертушки требуется высоковольтный источник постоянного или переменного напряжения. Было решено использовать генератор Ван де Граафа. Его преимущество заключается в том, что он способен выдавать очень большие электростатические потенциалы при относительной простоте конструкции.

Генератор Ван де Граафа — генератор высокого напряжения, принцип действия которого основан на электризации движущейся диэлектрической ленты. Это устройство является электростатическим генератором с гибким диэлектрическим транспортёром зарядов. Впервые был разработан американским физиком Робертом Ван де Граафом в 1929 году.

Простой генератор Ван де Граафа, схема которого представлена на рисунке 1, состоит из диэлектрической ленты (4), вращающейся на роликах (3) и (6), верхний ролик диэлектрический, а нижний металлический и заземлен. Верхний ролик вместе с лентой заключён в металлическую сферу (1). Два электрода (2) и (5), в виде щеток, находятся на небольшом расстоянии от ленты сверху и снизу, причём электрод (2) соединён с внутренней поверхностью сферы (1). Через щетку (5) воздух ионизируется от источника напряжения (7), образующиеся положительные ионы под действием силы Кулона движутся к заземлённому (6) ролику и оседают на ленте, движущаяся лента переносит заряд внутрь сферы (1), где он снимается щёткой (2), под действием силы

Кулона заряды выталкиваются на поверхность сферы и поле внутри сферы создается только дополнительным зарядом на ленте. Таким образом на внешней поверхности сферы накапливается электрический заряд. Возможность получения высокого напряжения ограничена коронным разрядом, возникающим при ионизации воздуха вокруг сферы. Модель генератора Ван де Граафа, собранная автором, представлена на рисунке 2.

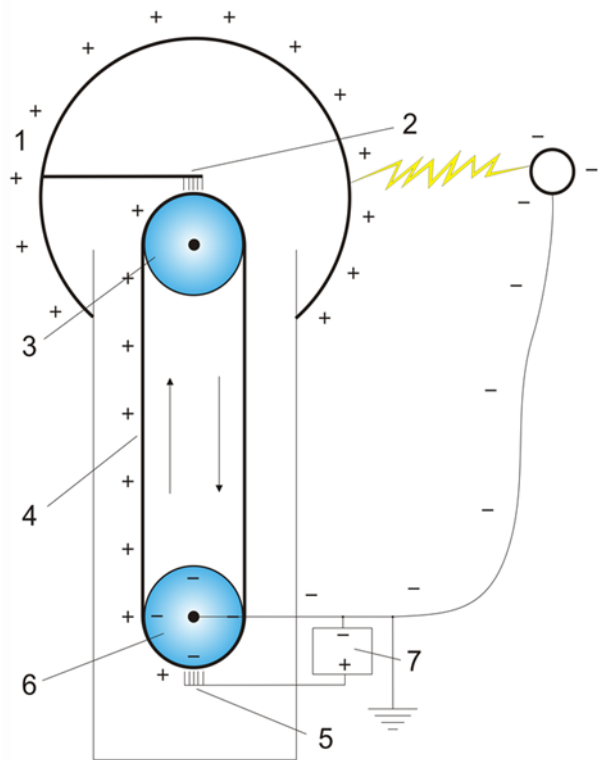


Рисунок 1 – Схема генератора Ван де Граафа

Рисунок 2 – Действующая модель генератора Ван де Граафа

Определим основные характеристики разработанного генератора:

Нахождение максимального заряда сферы [2]:

$$q_m = 8\pi R \times \sqrt{\varepsilon_0 R \times \Delta R \times \sigma_{(pr)}} \quad (1)$$

$$q_m = 8\pi \cdot 0.1 \times \sqrt{8.85 \times 10^{-12} \cdot 3 \times 10^{-4} \cdot 600 \times 10^6} = 3.172 \times 10^{-3} \text{ Кл}$$

Определение максимального потенциала проводящей сферы:

Напряженность поля на поверхности шара высчитывается по формуле:

$$E = \frac{\varphi}{R} \quad (2)$$

где φ – потенциал шара, R – его радиус, E – напряженность поля. Если $R=10$ см, а напряженность для воздуха при атмосферном давлении равно 30кВ/см , то шар можно зарядить до $\varphi = E \times R = 300 \text{ кВ}$.

2. Исследование модели ионного двигателя

В качестве модели ионного двигателя в исследовании использовалась ионная вертушка. Ионная вертушка – это лабораторное устройство, ставшее предметом споров на протяжении двух столетий. В учебной физической

лаборатории иногда демонстрируют вертушку, которая приводится в движение подключением ее к высоковольтному источнику напряжения. Вращение вертушки обуславливается тем, что воздух вблизи ее острия ионизируется. В сильном электрическом поле образовавшиеся ионы и острие оказываются заряженными одинаково и отталкиваются. Ионная вертушка представляет собой изогнутую тонкую проволоку, одетую на ось из более толстой медной проволоки, подключенную к высоковольтному источнику питания. Вертушка, использованная в исследовании, представлена на рисунке 3.

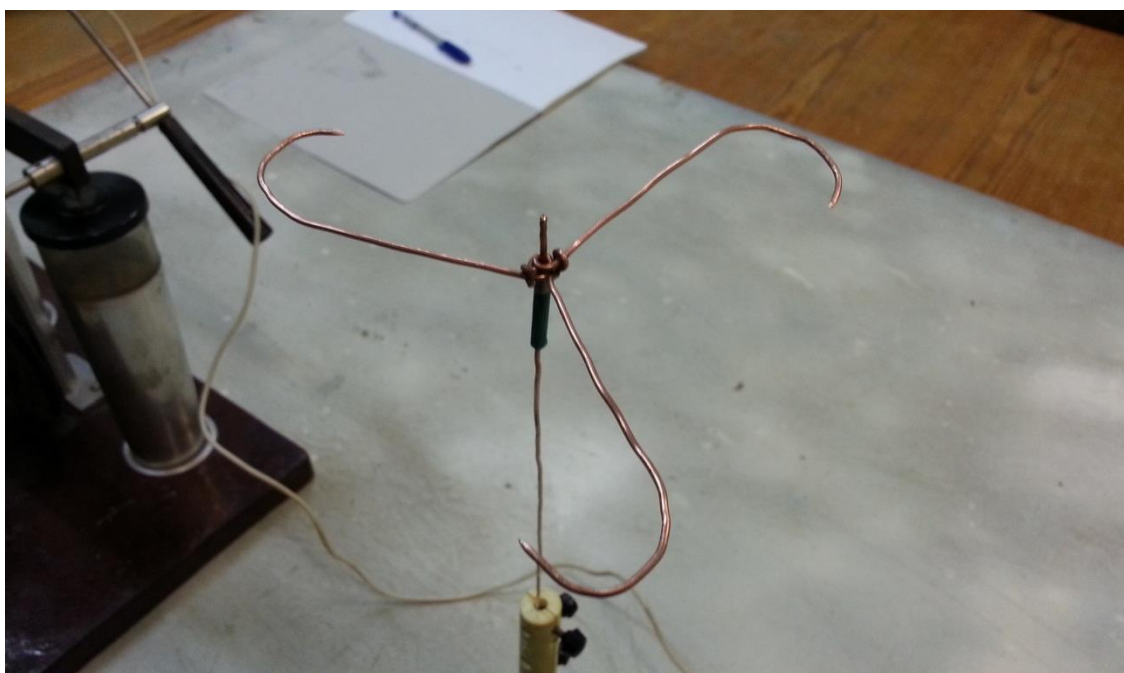


Рисунок 3 – Экспериментальная трехлопастная ионная вертушка

Для проведения эксперимента было сконструировано 3 вида вертушек: P-, Г- и S-образная. 3 исследуемых вида вертушек представлены на рисунке 4.

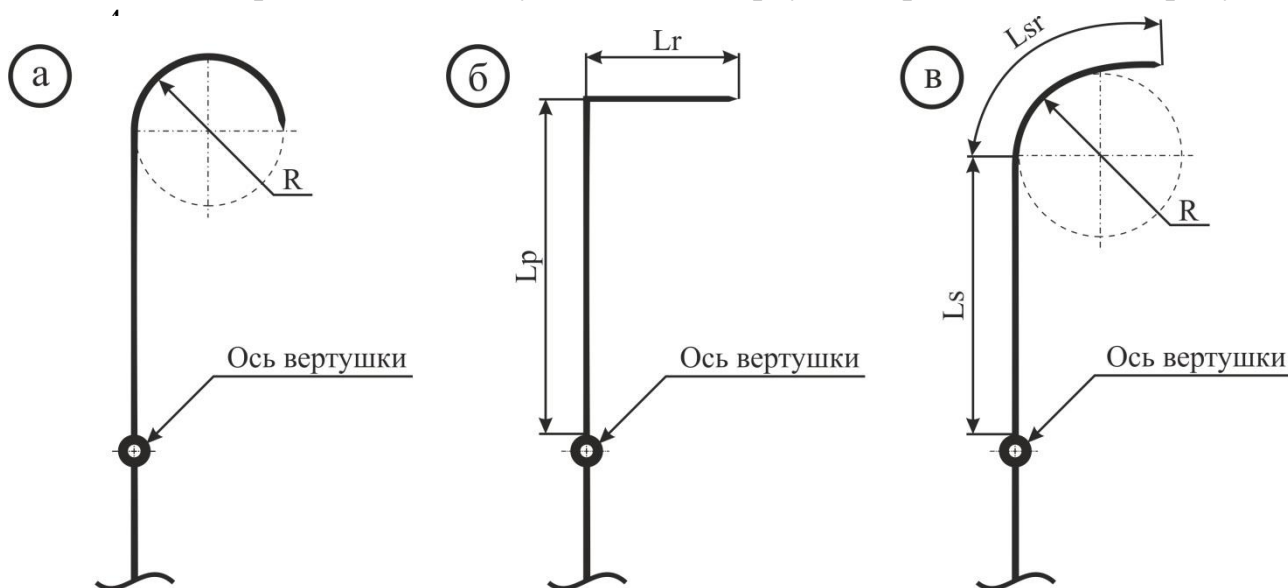


Рисунок 4 – Исследуемые формы вертушек: P-образная форма (а), Г-образная форма (б), S-образная форма (в).

Условные обозначения

1. Для P-образной формы: R – радиус кривизны [мм].
2. Для Г-образной формы: L_г – рабочая длина вертушки [% от общей длины]; L_р – длина плеча вертушки [% от общей длины]; L_г+L_р – общая длина вертушки [мм].
3. Для S-образной формы: L_с – длина вертушки до изгиба [% от общей длины]; L_{сг} – рабочая длина вертушки [% от общей длины]; L_с+L_{сг} – общая длина вертушки [мм].

Выбор оптимальной формы вертушки осуществлялся по критерию КПД, т.е. по максимальному количеству оборотов, которое способна совершить вертушка при подаче на нее напряжения от генератора Ван де Граафа (300 кВ) в течение 20 секунд.

Рассмотрим P-образную вертушку с концами, загнутыми по окружности (рисунок 4(а)). Результаты эксперимента представлены в таблице 1. R – радиус кривизны конца вертушки, N – количество оборотов модели ионного двигателя.

R, мм	0	6	10	15	20	25
N	0	16	20	19,5	17,5	15

Таблица 1 – результаты эксперимента с P-образной вертушкой

Рассмотрим Г-образную вертушку с прямоугольными концами (рисунок 4(б)). Аналогично предыдущему пункту запишем экспериментальные данные в Таблицу 2. L – длина рабочего тела вертушки, N – количество оборотов модели ионного двигателя.

L, %	0	11,11	16,67	22,22	27,78	33,33	38,89	44,5	55
N	0	21.5	25	25.5	24	21.5	18	13	0

Таблица 2 – результаты эксперимента с Г-образной вертушкой

Рассмотрим S-образную вертушку (рисунок 4(в)). Аналогично предыдущим пунктам запишем экспериментальные данные в Таблицу 3. L – длина рабочего тела вертушки, N – количество оборотов модели ионного двигателя.

L, %	0	11,11	16,67	22,22	27,78	33,33	38,89	44,5	55
N	0	17	20	20,5	19	17	14,5	10	0

Таблица 3 – результаты эксперимента с S-образной вертушкой

3. Выбор оптимальной формы ионной вертушки

Изображения графиков зависимости скорости вращения от формы (от радиуса кривизны и рабочей длины вертушки) представлены на рисунках 5, 6 и 7.

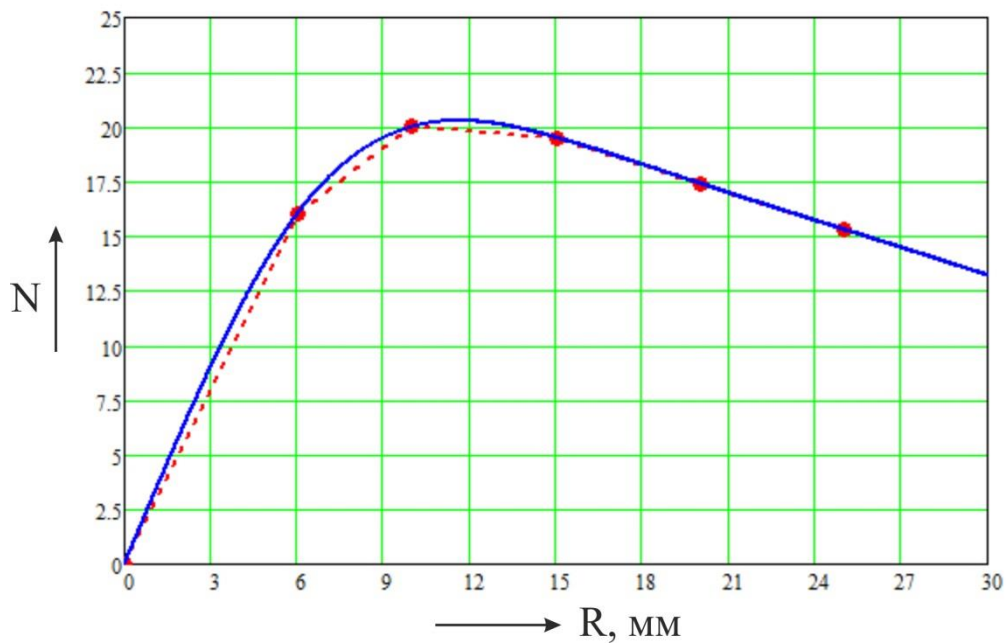


Рисунок 5 – График зависимости скорости вращения от радиуса кривизны Р-образной вертушки

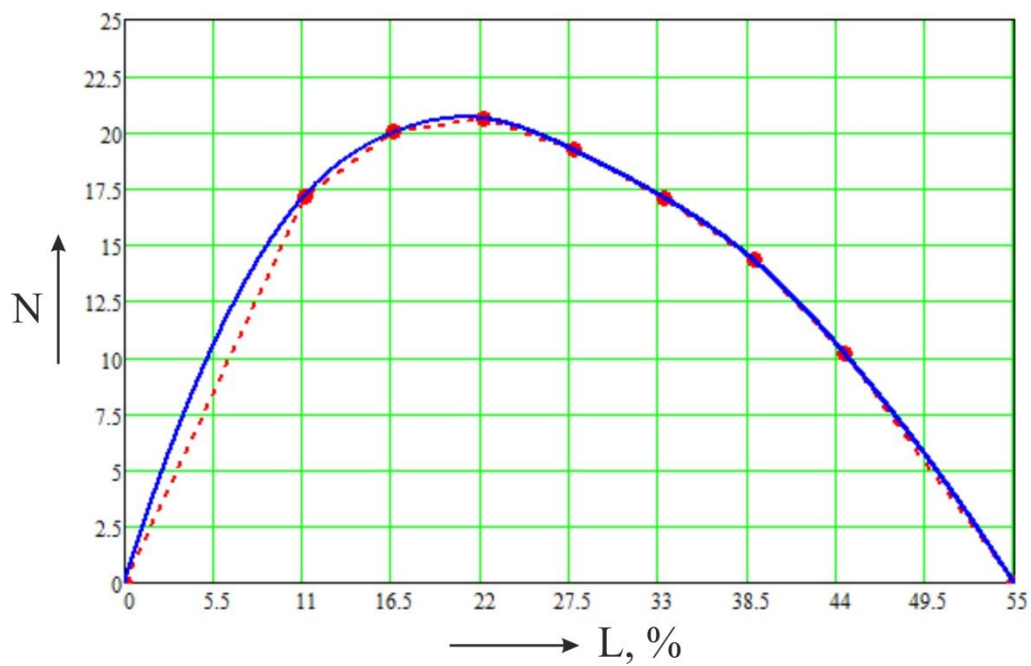


Рисунок 6 – График зависимости скорости вращения от рабочей длины Г-образной вертушки

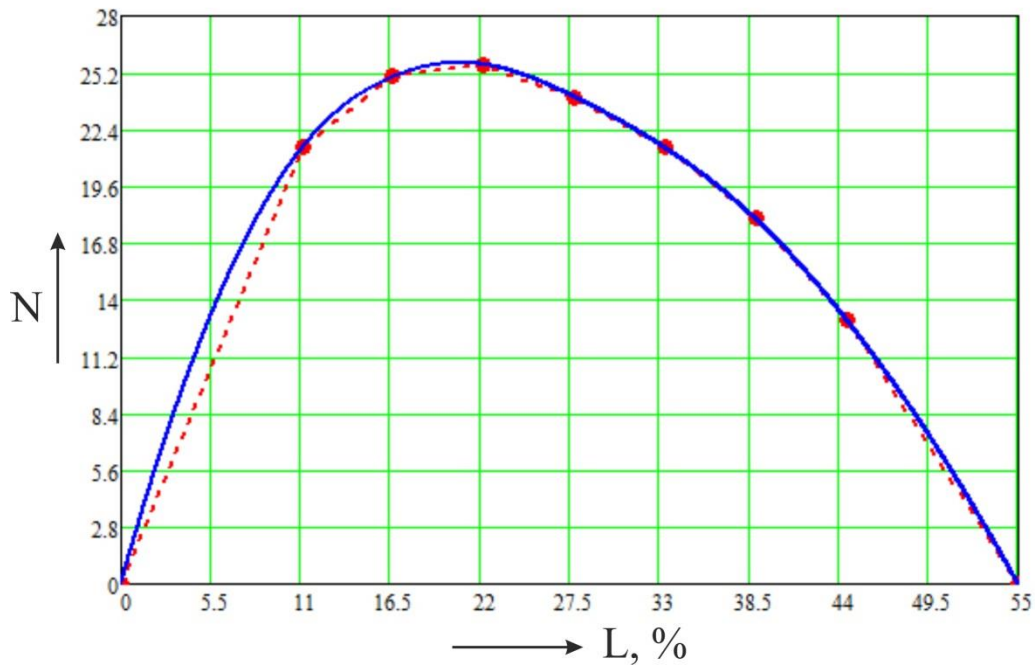


Рисунок 7 – График зависимости скорости вращения от рабочей длины S-образной вертушки

Как мы можем видеть по графикам (рисунок 3, 4, 5), для каждого вида вертушек, при изменении длины или формы ее концов, достигается пиковое количество оборотов ионного двигателя (точка максимального КПД), после чего идет равномерный спад «эффективности» вертушки. Для сравнения полученных кривых рассмотрим наложение трех графиков, представленное на рисунке 8. Черным цветом изображен график S-образной, синим – Г-образной, а красным – Р-образной вертушки.

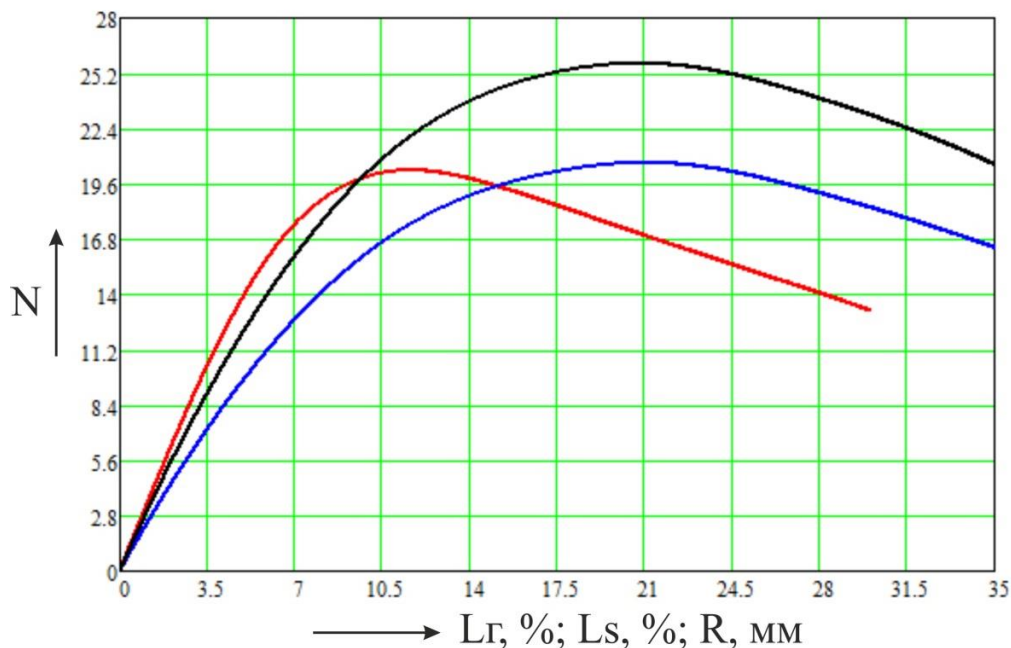


Рисунок 8 – График зависимости скоростей вращения от форм (от радиуса кривизны и рабочей длины) трех различных вертушек.

При сравнении графиков, изображенных на рисунке 8, очевидно, что наибольшим КПД (количество оборотов за 20 секунд) обладает S-образная вертушка, а наименьшим – P-образная. Отметим, что, если использовать третью форму вертушки (S-образную), по сравнению с первыми двумя, получим КПД на 25% выше. Такая форма является наиболее оптимальной и достигается при изгибе ее тела вертушки в форме буквы «S». Переход от плеча к рабочему участку вертушки должен быть максимально плавным, а ее конец направлен по касательной к траектории движения.

Вывод

1. В ходе исследования автором была разработана экспериментальная модель генератора Ван де Граафа и 3 вида ионных вертушек различной формы.
2. В результате эксперимента была выбрана оптимальная форма модели ионного двигателя – S-образная форма.

Список литературы

1. *Гуныков В.В. Об оценке эффективности развития научно-исследовательского потенциала при изучении физики (на примере Оренбургского университета) / В.В. Гуныков // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2014. – №2. – С.79-85.*
2. *Савельев И.В. Савельев И.В. Курс общей физики. В 5-и тт. Том 2. Электричество и магнетизм - Лань, 2011.*

ЭВОЛЮЦИЯ ПЛОТНОСТИ КОГНИТИВНОГО ПОЛЯ В ПРОСТРАНСТВЕ ПОНЯТИЙ

Кучеренко М.Г., Кучеренко М.А.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

В данной работе показано, что свойства двух известных в биофизике и физике конденсированных сред эволюционных математических моделей, базирующихся на нелинейных дифференциальных уравнениях параболического типа, не утрачивают своего смысла и могут быть перенесены без сколь-нибудь существенного изменения их структуры в область методологии образовательных процессов путем замены первоначальных биологических или физических понятий, эквивалентными им понятиями теории познания.

В некоторых разделах биофизики и физики конденсированного состояния получили развитие так называемые эволюционные модели [1-5], применяемые для описания нетривиальных свойств систем потокового типа, причем самой различной природы. Такие эволюционные модели основываются на дифференциальных уравнениях с транспортным оператором диффузионного вида и локальным, либо нелокальным нелинейным членом [1-2]. В математической физике такие уравнения иногда называют уравнениями типа «реакция-диффузия» [5-6]

$$\frac{\partial}{\partial t} n(q,t) = D\nabla^2 n(q,t) + w(q,t | n(q,t)). \quad (1)$$

Объемный – реакционный член $w(q,t | n(q,t))$, в общем случае нелинейный по $n(q,t)$, определяет генерацию и распад плотности $n(q,t)$ некоторой величины в пространстве переменных $q = \{q_i\}$. Обозначим через $\alpha(q,t)$ - скорость генерации, а через $\beta[n(q,t)]$ - скорость распада плотности $n(q,t)$. Тогда

$$w(q,t | n(q,t)) = \alpha(q,t)n(q,t) - \beta[n(q,t)]n(q,t). \quad (2)$$

Скорость распада $\beta[n(q,t)]$ в модели биологической эволюции в пространстве фенотипов [1], например, представляет собой функционал от плотности $n(q,t)$

$$\beta[n(q,t)] = \int \alpha(q',t)K(q',q)n(q',t)dq' / \int n(q,t)dq. \quad (3)$$

Нормировочный множитель $\int n(q,t)dq = N$ в (3) принимается постоянным, как, например, в модели [1]. В зависимости от вида ядра $K(q',q)$ интегрального оператора (3) нелинейное слагаемое в (1) носит локальный характер, если $K(q',q) = \delta(q' - q)$, где $\delta(q)$ – дельта-функция Дирака, или

нелокальный характер, при любом другом виде ядра $K(q', q)$. Так, в модели с нелокальной нелинейностью [1] $K(q', q) \sim 1$. В локальном случае $\beta[n(q, t)] = \alpha \cdot n(q, t)$, и при $\alpha(q, t) = \text{const}$ уравнение (1) совпадает с хорошо известным уравнением Колмогорова-Петровского-Пискунова [7], или уравнением Фишера [8], детально исследованном авторами [7]. Для последнего случая известны решения [6-7] в виде бегущих волн. В случае нелокального механизма конкуренции-распада (3) напрашивается естественная аппроксимация подинтегральной плотности $n(q, t)$ ее начальным значением $n_0(q)$. Эта замена $n(q, t) \rightarrow n_0(q)$, линеаризующая уравнение (1), может рассматриваться как первый шаг итерационной процедуры построения решения $n^{(i)}(q, t | n_0(q))$ [9]. Для нелокальной нелинейности линеаризующая аппроксимация выглядит даже более оправданной, нежели в локальном случае, поскольку интегрирование в (2) сглаживает особенности пространственных изменений плотности $n(q, t)$.

В эволюционной модели В.И. Сугакова [10], разработанной для объяснения образования неоднородных структур из чередующихся участков экситонной плотности в молекулярных кристаллах, в качестве транспортного оператора в уравнении (1) содержится не оператор свободной диффузии, а оператор Фоккера-Планка. В такой модели стохастически перемещающиеся в кристалле экситоны взаимодействуют друг с другом посредством самосогласованного силового поля $V(q)$. С ростом температуры T термостата, в контакте с которым находится экситонная подсистема, случайные блуждания квазичастиц- экситонов в силовом поле становятся более интенсивными. В рамках теории [10], ее автором была обнаружена неустойчивость однородного поля экситонной плотности, приводящая к образованию периодических пространственных скоплений квазичастиц – сверхрешеток их плотности, период которых существенно превышает постоянную кристаллической решетки, что по сути является примером появления диссипативной структуры – кинетическим фазовым переходом.

В отличие от автокатализа модели Эйгена [1] экситонный автокатализ Сугакова возникает не в связи с увеличением абсолютной численности экситонных состояний в кристалле, а в результате тенденции к ассоциированию квазичастиц, вызванному их взаимным силовым притяжением (мультипольное или Ван-дер-Ваальсово взаимодействие).

Примечательно, что в работе [11] уравнение (10) записано в дискретной по узлам кристаллической решетки форме, что дало возможность представить диффузионный оператор через скорости W_{nm} прыжков экситонов на соседние узлы решетки. При этом учитывалось, что скорости прямых и обратных прыжков между узлами с номерами n и m не равны между собой, а удовлетворяют принципу детального равновесия

$$W_{nm} / W_{mn} = \exp\left(-\frac{E_n - E_m}{k_B T}\right). \quad (4)$$

Здесь, в (4), E_n – энергия взаимодействия между экситоном, находящимся в узле \mathbf{n} решетки и всеми остальными экситонами кристалла, k_B - постоянная Больцмана. В дискретном варианте энергия E_n определяется выражением

$$E_n = \sum_{\mathbf{m}} V(\mathbf{n}, \mathbf{m}) n(\mathbf{m}, t). \quad (5)$$

Общим результатом анализа моделей (1-3), и модели авторов [10-11], несмотря на их очевидные различия, является появление эффекта локального концентрирования плотности поля: биологических особей – как в [1-5], или экситонов – как в [10-11]. Причем природа самого пространства, в котором возникает структурирование плотности поля несущественна – это может быть как пространство фенотипов, так и конфигурационное пространство, в которое помещена неравновесная система. По достижению некоторых критических – бифуркационных значений параметров, характерных для каждой из систем, распределение плотности приобретает островковый характер. Поскольку степень общности потоковых эволюционных моделей (1-3) и [10-11] является очень высокой (по сути дела и та, и другая модель отражают условия числового баланса многочастичной системы), можно предположить, что итоговый результат пространственного структурирования первоначально однородного поля, будет характерен и для систем иной природы, отличающейся от рассмотренных в [1-5], [7-8] и [10-11]. В качестве таковых могут выступать, например, информационные системы, или системы, типичные для образовательного процесса. В таком случае основная, возникающая при этом проблема – определение точных эквивалентов динамических переменных и параметров моделей (1-3) и [10-11]. Другой важный вопрос – существует ли для систем нефизической природы понятие, равнозначное термодинамически равновесному состоянию физико-химической системы. Последнее очень важно для появления диффузионных потоков, таких как фигурируют в (1) или в теории [10-11], или потоков более общего вида, а также связанных с этими потоками диссипативных процессов. Наконец, необходимо выяснить, какая из двух рассмотренных эволюционных моделей, (1-3) или [10-11], более близка для исследования информационной, или схожей с ней по природе динамики [12].

Модель 1. Свободно-стохастическая вариабельность характеристик в пространстве понятий

В распределенной модели Эйгена [1] прямых указаний на действие термостата не наблюдается, поэтому ее применимость для когнитивных процессов и процессов обучения установить проще. Таблица эквивалентов

между физическими (химическими, биологическими) характеристиками и величинами – с одной стороны и их когнитивными аналогами – с другой, может быть выбрана, например, следующим образом. Вместо пространства фенотипов $q = \{q_i\}$ может быть рассмотрено абстрактное «пространство понятий», причем координатами q_i точек этого пространства могут служить некоторые, достаточно однозначно определенные, характеристики понятий (например, степень восприятия, уровень сложности, уровень абстрактности и т.п.). В качестве замены биологически специфической пуляционной плотности $n(q,t)$ можно использовать «плотность компетентности» («компетентностная плотность»). В этом случае, очевидно, что сама компетентность в узкой области пространства понятий с дифференциально малым объемом $dq = dq_1 \dots dq_N$, окружающим точку q , будет тогда определяться произведением $n(q,t)dq = n(q,t)dq_1 \dots dq_N$. Общая компетентность индивидуума при таком подходе представляет собой интеграл по всему пространству понятий от плотности $n(q,t)$.

Реакционный член $w(q,t|n(q,t))$ уравнения (1) тогда будет представлять собой скорость «генерации-гибели» «компетентностной плотности». В качестве «потенциала» $U(q) = -\alpha(q)$ в поле понятий можно рассматривать «потенциал повышения компетентности» обучаемого. Наконец скорость $\beta[n(q,t)]$ из (2) может трактоваться как «скорость распада компетентности», в линейном варианте – самопроизвольного, спонтанного, а в более общем случае (нелинейном) – самоиндуцированного. Главный результат Модели 1 представлен выражением [2] – разложением по функциям $\varphi_j(q)$ базисного набора

$$n(q,t) = \sum_j C_j \exp(-\varepsilon_j t) \varphi_j(q) \exp\left(-\int_0^t \beta(t') dt'\right). \quad (6)$$

Постоянные C_j в (6) определяются начальным распределением $n_0(q)$, так как из (6) следует $n_0(q) = \sum_j C_j \varphi_j(q)$ и тогда $C_j = \int n_0(q) \varphi_j^*(q) dq$. Для локальных областей размножения $\alpha(q) > 0$ в пространстве фенотипов $q = \{q_i\}$ собственные значения $-\varepsilon_j$ линейного оператора $-L = D\nabla^2 - U(q)$, принадлежащие дискретному спектру, положительны [2]. Им соответствуют уровни отрицательной энергии ε_j , отвечающие связанным состояниям в «потенциальной яме» $U(q) = -\alpha(q)$.

Экспонента с интегральным показателем в (6) не позволяет плотности $n(q,t)$ неограниченно возрастать во времени. Рост популяции (6) будет происходить до тех пор, пока выполняется неравенство

$$|\varepsilon_j| > \int_0^t \beta(t') dt'$$

для всех чисел ε_j . При $t \rightarrow \infty$ наступает стационарный режим, и численность популяции стабилизируется. Наиболее глубокий «уровень энергии» ε_0 будет определять условие стабилизации

$$|\varepsilon_0| = \max |\varepsilon_j| > \int_0^{\infty} \beta(t) dt. \quad (7)$$

Решению (7) может быть дана следующая интерпретация. Растущие со временем экспоненты $\exp(|\varepsilon_j|t)$ отражают взрывной характер генерации плотности популяции в тех областях пространства, которые характеризуются достаточно большой величиной скорости $\alpha(q)$, и при этом имеют достаточную пространственную протяженность, с тем, чтобы случайные блуждания с коэффициентом диффузии D не выводили систему из этих областей с высокой скоростью генерации населенности. Именно таким условиям отвечают наибольшие по модулю собственные значения ε_j [2]. Под блужданиями понимаются случайные вариации плотности биологической популяции по фенотипическим параметрам.

Точный вид «потенциала» $U(q) = -\alpha(q)$, как правило, неизвестен, и в случае пространства высокой размерности d рельеф $U(q)$ становится настолько сложным, что на практике имеет смысл рассматривать функцию $U(\{q_i\})$ как случайное поле аргументов q_i . Такой подход оказался плодотворным в квантовой электронной теории неупорядоченных сред [13] и эволюционной биологии [1]. Оказалось, что важнейшие результаты, касающиеся характера спектра и искомого поля плотности не чувствительны к изменениям реализаций стохастического потенциала $U(q)$. В качестве характеристик потенциала в этом случае часто используются первые моменты $\langle U(q) \rangle$ и $\langle U(q)U(q') \rangle$ случайного поля $U(q)$.

Примечательно, что при конверсии физико-биологической модели в гуманитарную область базовые функции $\varphi_j(q)$ могут быть отождествлены с самими компетенциями. Построение эквивалента для коэффициента диффузии D модели Эйгена не вызывает затруднений. В качестве такового может быть выбран «коэффициент вариабельности характеристик понятий» – как второй момент случайных смещений за время τ_0 изображающей точки в пространстве понятий $D = \langle \delta q \delta q' \rangle / \tau_0$. Если предложенная система эквивалентов для Модели 1 принимается как результат удачной трансляции, то главный вывод оригинальной теории должен оставаться в силе и для переведенного варианта. Тогда нетривиальным результатом процесса обучения может явиться взрывная

неустойчивость, приводящая к резкому росту «компетентностной плотности» $n(q,t)$, в области оптимальных, околокритических значений характеристик некоторых ключевых понятий. Поиск этих ключевых для формирования компетентности понятий и их оптимальных характеристик представляет собой отдельную задачу образовательной деятельности. Важно подчеркнуть методологическую обусловленность наличия таких областей в пространстве понятий и их критическое влияние на процесс повышения компетентности и формирования компетенций.

Модель 2. Случайные изменения положений в пространстве понятий – как блуждания в области неэквивалентных состояний

В эволюционной модели В.И. Сугакова [10], фигурируют потенциал $V(q)$ силового поля, посредством которого осуществляется взаимодействие между элементами системы (экситонами) и температура T термостата, в контакте с которым находится эта система. Подобрать точные эквиваленты для двух этих величин представляется более затруднительным, чем для параметров Модели 1. Тем, не менее, в широком смысле, будем понимать под силовым потенциалом $V(q)$ изменение свойств пространства в точке q , в контексте возможного приобретения некоторой сносовой скорости u плотности $n(q,t)$. При таком подходе автоматически решается и проблема нахождения соответствующего эквивалента для температуры T . Действительно, сносовая скорость A это

$$A = \frac{D}{k_B T} \nabla_q V(q), \quad (8)$$

поэтому температура термостата и характеристики силового поля входят в модель лишь в комбинации (8). Необходимо лишь прямое определение сносовой скорости A . Переход к узловому представлению (4)-(5) освобождает от вычислений градиентов, однако требует вычислений решеточных сумм. Поэтому реализация Модели 2, особенно в случае многомерного пространства понятий, потребует использования высокопроизводительной вычислительной техники.

В работах [3-4] отмечается, что появление сильной пространственной неоднородности эволюционирующих систем связано именно со стохастичностью потенциала $U(q)$. Причем если на промежуточной асимптотике в первоначально однородных системах типично появление ячеистых, или сеточных структур с преимущественным концентрированием субфазы в пределах ячеек или жгутов, то на далекой асимптотике, то есть при $t \rightarrow \infty$, характерно появление сравнительно редких малых областей, в которых преимущественно и сосредоточен весь конденсат. Авторы [3-4] предложили называть это явление перемежаемостью, подчеркнув, что возникновение структурирования обусловлено не нелинейностью эволюционных уравнений, а стохастическим характером поля $U(q)$ скоростей размножения.

В простейшем предельном случае, когда скорость размножения $\alpha(q) = -U_0$ постоянна, задача имеет смысл при рассмотрении цепной реакции в ограниченной области Ω пространства [4]. При этом спектр диффузионного оператора определяется размерами и формой области Ω .

Таким образом, в качестве важных особенностей, присущих рассмотренным эволюционным моделям, которые могут найти применение в теории познания и обучения, необходимо отметить следующие.

Наличие в эволюционном уравнении слагаемого, ответственного за автокатализ, приводит к возникновению взрывного режима роста плотности, имеющем критическую зависимость от параметров задачи (критическая масса, критический размер, критическое значение коэффициента диффузии).

1. Ограничение роста обеспечивают аннигиляционные слагаемые, со вторым порядком нелинейности по плотности, нелокальные (Модель 1), или локальные (Модель 2).

2. Причиной возникновения неоднородных пространственных структур (решеток, жгутов, островков плотности) могут явиться либо стохастические поля скорости размножения (соответствующий член уравнения может быть линейным по плотности), либо нелинейные члены в операторе, определяющем миграцию в пространстве с наложенным потенциальным силовым полем (Модель 2, несвободная миграция в потенциале $V(q)$).

3. При необходимости может быть сформулирована общая модель, объединяющая две рассмотренные. В такой модели за структурирование (перемежаемость) системы будут отвечать два механизма: автокаталитический и механизм образования нелинейного силового поля, влияющего на характер диффузионных перемещений изображающей точки в q -пространстве

Список литературы

1. Эбелинг, В. Физика процессов эволюции. / В. Эбелинг, А. Энгель, Р. Файстель М.: Эдиториал УРСС. 2001. -328 с. Ebeling W., Feistel R. *Physik der Selbst-Organisation und Evolution.*— Berlin: Akademie-Verlag, 1982.

2. Михайлов, А.С. Критические явления в средах с размножением, распадом и диффузией / А.С. Михайлов, И.В. Упоров // Успехи физ. наук. 1984. Т. 144. – С. 79–112.

3. Зельдович, Я.Б. Перемежаемость пассивных полей в случайных средах / Я.Б. Зельдович, С.А. Молчанов, А.А. Рузмайкин, Д.Д. Соколов // ЖЭТФ. 1985. -Т. 89. – С. 2061- 2072

4. Зельдович, Я.Б. Перемежаемость в случайной среде / Я.Б. Зельдович, С.А. Молчанов, А.А. Рузмайкин, Д.Д. Соколов // Успехи физ. наук. 1987. -Т. 152. – С. 3- 32.

5. Васильев, В.А. Автоволновые процессы. / В.А. Васильев, Ю. М. Романовский, В.Г. Яхно М.: Наука. Современные проблемы физики. 1987.

6. Мартинсон, Л.К. Дифференциальные уравнения математической физики. / Л.К. Мартинсон, Ю.И. Малов МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2002. – 368 с.

7. Колмогоров, А.Н. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием количества вещества, и его применение к одной биологической

проблеме / А.Н. Колмогоров, И.Г. Петровский, Н.С. Пискунов // Бюллетень МГУ. Серия Математика и механика. 1937. –Т. 1. –С. 1-26.

8. Fisher, R.A. The wave of advance of advantageous genes / R.A. Fisher // *Annals of Eugenics*. 1937. - Vol.7. - P.355-369.

9. Кучеренко, М.Г. Кинетика статического нелинейного самотушения люминесценции в коллоидных системах / М.Г. Кучеренко // *Коллоидный журнал*. 1998. - Т.60. - №3. - С. 398-406. Kucherenko M.G. Kinetics of the static nonlinear self-quenching of luminescence in colloidal systems // *Coll. J.* 1998. - V.60. -№3. - P. 347-355.

10. Сугаков, В.И. Свехрешетки экситонной плотности / В.И. Сугаков // *Физика твердого тела*. 1986. –Т. 28. №8. –С. 411-415.

11. Извеков, С.В. Индуцированные светом диссипативные свехрешетки плотности экситонов и вектора поляризации в молекулярных кристаллах с примесями / С.В. Извеков, В.И. Сугаков // *Физика твердого тела*. 1992. Т. 34. №1. –С. 103-107.

12. Чернавский, А.С. Синергетика и информация. Динамическая теория информации. Серия синергетика: от прошлого к будущему / А.С. Чернавский // УРСС. М.: 2004. – 288 с.

13. Лифшиц, И. М. Введение в теорию неупорядоченных систем / И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур М.: Наука, 1982.

СПЕКТРЫ ДИПОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ КЛАСТЕРОВ ИЗ ДВУХ ПРОВОДЯЩИХ НАНОЧАСТИЦ С ВЫРОЖДЕННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ

Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Использование в качестве плазмонных наноантенн кластеров из отдельных металлических наночастиц расширяет перечень возможных применений таких объектов в электронике и фотонике [1]. Дополнительные параметры кластеров, появляющиеся при объединении отдельных компонентов в целостную систему, позволяют производить более тонкое регулирование спектральных и трансформационных характеристик наноагрегата [2]. В композитном варианте можно сочетать частицы различных металлов, полуметаллов и полупроводников, или формировать гибридные структуры из проводящих и диэлектрических частей [3]. В зависимости от вида материала, входящего в состав кластерного фрагмента, между этими фрагментами могут быть инициированы взаимодействия различного типа: плазмон-плазмонное, плазмон-экситонное и другие [4]. В [5] была исследована модификация спектра дипольной электрической поляризуемости кластера из двух проводящих сферических наночастиц во внешнем магнитном поле в случае, когда электронный газ металла не являлся вырожденным. Однако, хорошо известно [6], что вплоть до температур плавления металлов их электронный газ остается вырожденным. Аналогичная ситуация характерна для сильнолегированных полупроводников и полуметаллов. По этой причине, в ряде работ [7-10], посвященных металлическим свойствам наночастиц в электромагнитных полях, большое внимание уделено факту вырожденности электронного газа в таких объектах.

В данной работе исследуется дипольная динамическая поляризуемость двухчастичного нанокластера, состоящего из металлических глобул с вырожденным электронным газом. В общем случае частицы имеют различные радиусы, образованы из разных проводящих материалов и могут иметь многослойную структуру [11]. В случае однородных сферических частиц радиуса R из проводящего материала с вырожденным электронным газом, поляризуемость $\alpha(\omega)$ отдельной частицы определяется выражением [6, 8-9]:

$$\alpha(\omega) = R^3 \left[1 + \frac{3\varepsilon_m [k(\omega)R \operatorname{ctg} k(\omega)R - 1]}{2[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_m][k(\omega)R \operatorname{ctg} k(\omega)R - 1] + \varepsilon(\omega)[k(\omega)R]^2} \right]. \quad (1)$$

где ε_m - диэлектрическая проницаемость среды, в которую помещена частица; $\varepsilon(\omega)$ - частотнозависимая диэлектрическая проницаемость проводника, из которого состоит частица. Комплекснозначная функция частоты $\varepsilon(\omega)$ определяется выражениями [6-10]

$$k^2(\omega) = -\frac{4m_e^{3/2}e^{5/2}}{\pi\hbar^3\varepsilon(\omega)}\sqrt{2\varphi_0}, \quad \varphi_0 = \frac{(9\pi N_e)^{2/3}\hbar^2}{2^{7/3}m_e R^2}, \quad (2)$$

в которые входят фундаментальные константы m_e, e электрона и постоянная Планка \hbar . Постоянный потенциал φ_0 определяет характерную для каждого металла или полуметалла длину $l = \hbar^{3/2}(2\varphi_0 m_e^3 e^5)^{-1/4}$ томас-фермиевского экранирования. Величина N_e в (2) представляет собой полное число свободных электронов в наноглобуле, и тогда из (2) следует, что потенциал φ_0 зависит только от концентрации n_e вырожденного электронного газа металла и не зависит от радиуса R наночастицы. В случае частиц-сфероидов, или при наложении внешнего магнитного поля, скалярная поляризуемость $\alpha(\omega)$ отдельной частицы становится тензором второго ранга [2-3]. Далее в работе рассматриваются только скалярные поляризуемости $\alpha(\omega)$ отдельных наночастиц.

При образовании из двух различных сферических частиц осесимметричного нанокластера (рис. 1) его эффективная поляризуемость $\vec{\alpha}_{cl}(\omega)$ становится тензорной величиной, которая в приближении квазитоочечных диполей [2-3, 5]:

$$\vec{\alpha}_{cl}(\omega) = \left[\mathbf{I} - \alpha_1(\omega)\alpha_2(\omega)\vec{G}(\mathbf{r})\vec{G}(\mathbf{r}) \right]^{-1} \times \left\{ \alpha_1(\omega) \left[\mathbf{I} + \alpha_2(\omega)\vec{G}(\mathbf{r}) \right] + \alpha_2(\omega) \left[\mathbf{I} + \alpha_1(\omega)\vec{G}(\mathbf{r}) \right] \right\}. \quad (3)$$

Скалярные функции $\alpha_1(\omega), \alpha_2(\omega)$ в (3) представляют собой поляризуемости наночастиц кластера, а тензор $\vec{G}(r, \theta, \phi)$ является квазистатической диадической функцией Грина, которая в сферической системе координат принимает вид

$$\vec{G}(r, \theta, \phi) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{r^3} + \frac{3\cos^2\phi\sin^2\theta}{r^3} & \frac{3\cos\phi\sin^2\theta\sin\phi}{r^3} & \frac{3\cos\theta\cos\phi\sin\theta}{r^3} \\ \frac{3\cos\phi\sin^2\theta\sin\phi}{r^3} & -\frac{1}{r^3} + \frac{3\sin^2\phi\sin^2\theta}{r^3} & \frac{3\cos\theta\sin\theta\sin\phi}{r^3} \\ \frac{3\cos\theta\cos\phi\sin\theta}{r^3} & \frac{3\cos\theta\sin\theta\sin\phi}{r^3} & -\frac{1}{r^3} + \frac{3\cos^2\theta}{r^3} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Тензор $\vec{\alpha}_{cl}(\omega)$, как и тензор $\vec{G}(r, \theta, \phi)$ (4), имеет девять компонент. Ниже мы приводим результаты расчетов и обсуждаем свойства характерных ненулевых компонент тензора $\vec{\alpha}_{cl}(\omega)$, иногда сравнивая их со спектром скалярной поляризуемости $\alpha(\omega)$ отдельной наночастицы. Используется следующая система обозначений компонент тензора: $[\vec{\alpha}_{cl}(\omega)]_{ij} \equiv \alpha_{cl}^{ij}$, где $i, j=1, 2, 3$. Ось

кластера направляем вдоль оси Z декартовой системы ($\theta=0, \phi=0$). Тогда компонента α_{cl}^{11} тензора $\vec{\alpha}_{cl}(\omega)$ характеризует поляризуемость кластера при ориентации вектора \mathbf{E} электрического поля вдоль оси X . Компонент α_{cl}^{22} – при направлении вектора \mathbf{E} вдоль оси Y , а α_{cl}^{33} – вдоль оси Z . Очевидно, что $\alpha_{cl}^{11}(\omega) = \alpha_{cl}^{22}(\omega)$.

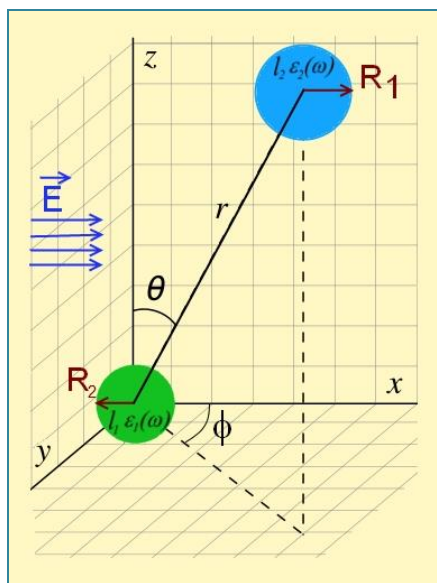


Рис. 1. Конфигурация системы «двухчастичный кластер-внешнее поле». Вектор напряженности \mathbf{E} однородного электрического поля направлен параллельно оси X . Ориентация оси кластера относительно осей декартовой системы задается углами θ и ϕ . Показаны радиусы R_1 и R_2 наночастиц кластера и расстояние r между центрами глобул.

Далее, на рисунках 2-5 приведены результаты расчетов частотных зависимостей компонента $\alpha_{cl}^{11}(\omega) = \alpha_{cl}(\omega)$ поляризуемости кластера (т.е. вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} и ось кластера взаимно перпендикулярны).

При рассмотрении других вариантов с различными направлениями векторов \mathbf{E} и \mathbf{r} , оказалось, что изменяется только амплитуда спектра поляризуемости кластера, без сколь-нибудь существенной деформации самого спектра. Поэтому такие графики здесь не приводятся, из-за их невысокой информативности.

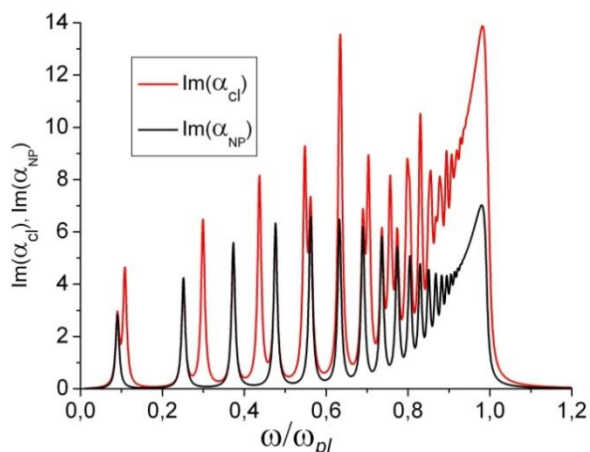


Рис. 2а Спектры мнимых частей поляризуемостей кластера (красный) и отдельной сферической наночастицы (черный)

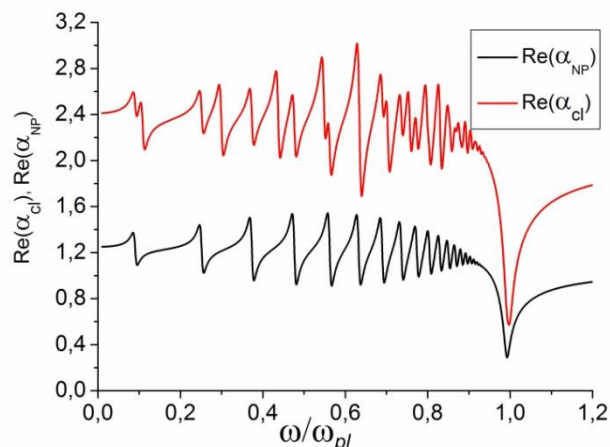


Рис. 2б Спектры действительных частей поляризуемостей кластера (красный) и отдельной сферической наночастицы (черный)

$$\gamma_1 = 1.42 \cdot 10^{14}, \gamma_2 = 1.45 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}, \omega_{pl1} = 1.37 \cdot 10^{16}, \omega_{pl2} = 1.38 \cdot 10^{16} \text{ c}^{-1}, R_1 = R_2 = 5, r = 12 \text{ нм},$$

$$l_1 = 0.2, l_2 = 0.3 \text{ нм}, \varepsilon_m = 1.2, \theta = 0, \phi = 0.$$

На рис. 2а -2б произведено сравнение спектров мнимых (2а) и действительных (2б) частей поляризуемостей нанокластера, составленного из наночастиц одинакового радиуса, но различного материала (красный) и отдельной сферической наночастицы (черный). Двухкомпонентный материальный состав кластера приводит к обогащению спектра кластера по сравнению со спектром отдельной частицы.

На рис. 3 представлены спектры поляризуемости кластера из двух сферических наночастиц одинакового радиуса, но разных проводящих материалов, рассчитанные для различных значений длины томас-фермиевского экранирования плазмы одного из шаров. Даже небольшие изменения этого параметра во второй значащей цифре приводят к заметным изменениям спектров. Переход к значению $l=0,7$ нм, типичному для легированного полупроводника или полуметалла, приводит к драматической перестройке спектра (рис. 3г).

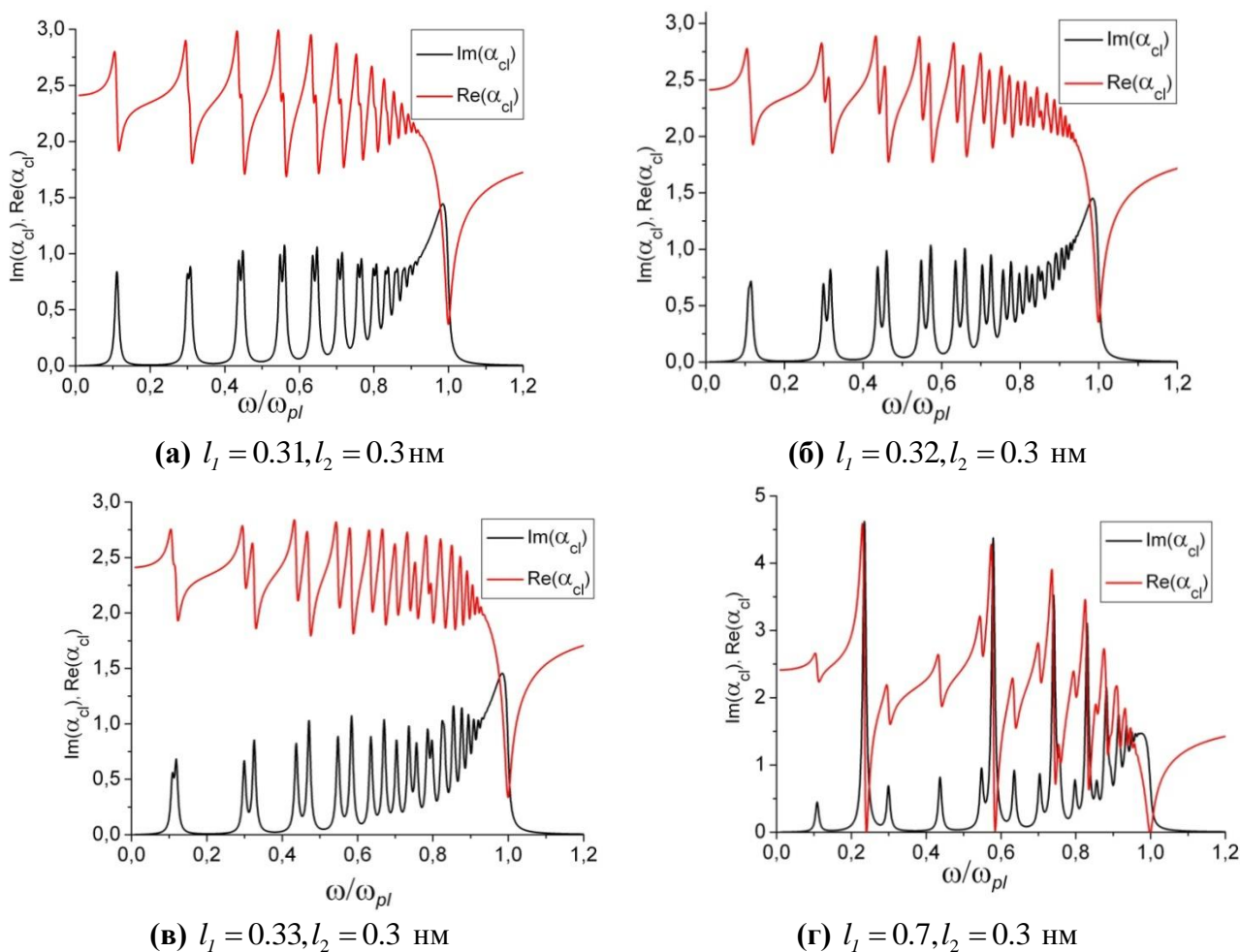


Рис. 3 Деформация спектров $\text{Im}(\alpha_{cl})$ и $\text{Re}(\alpha_{cl})$ кластера при изменении параметра томас-фермиевского экранирования l одной из частиц. $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.45 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $R_1 = R_2 = 5$, $r = 12$ нм, $l_1 = l_2 = 0.102$ нм, $\epsilon_m = 1.2$, $\theta = 0$, $\varphi = 0$.

Диэлектрическая проницаемость металла в расчетах использовалась в форме Друде-Зоммерфельда: $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_{pl}^2 / (\omega^2 - i\gamma\omega)^{-1}$. При большом значении

длины экранирования $l = \sqrt{a_B(3\pi^2 n_e)^{-1/3}} \sim 1$ нм в спектрах поляризуемости исчезает большинство линий, т.е. электронный газ металла ведет себя подобно классическому газу, что было замечено ранее в [6] для частиц. В этих условиях, в случае отдельного шара в спектре остается только одна резонансная частота Ми.

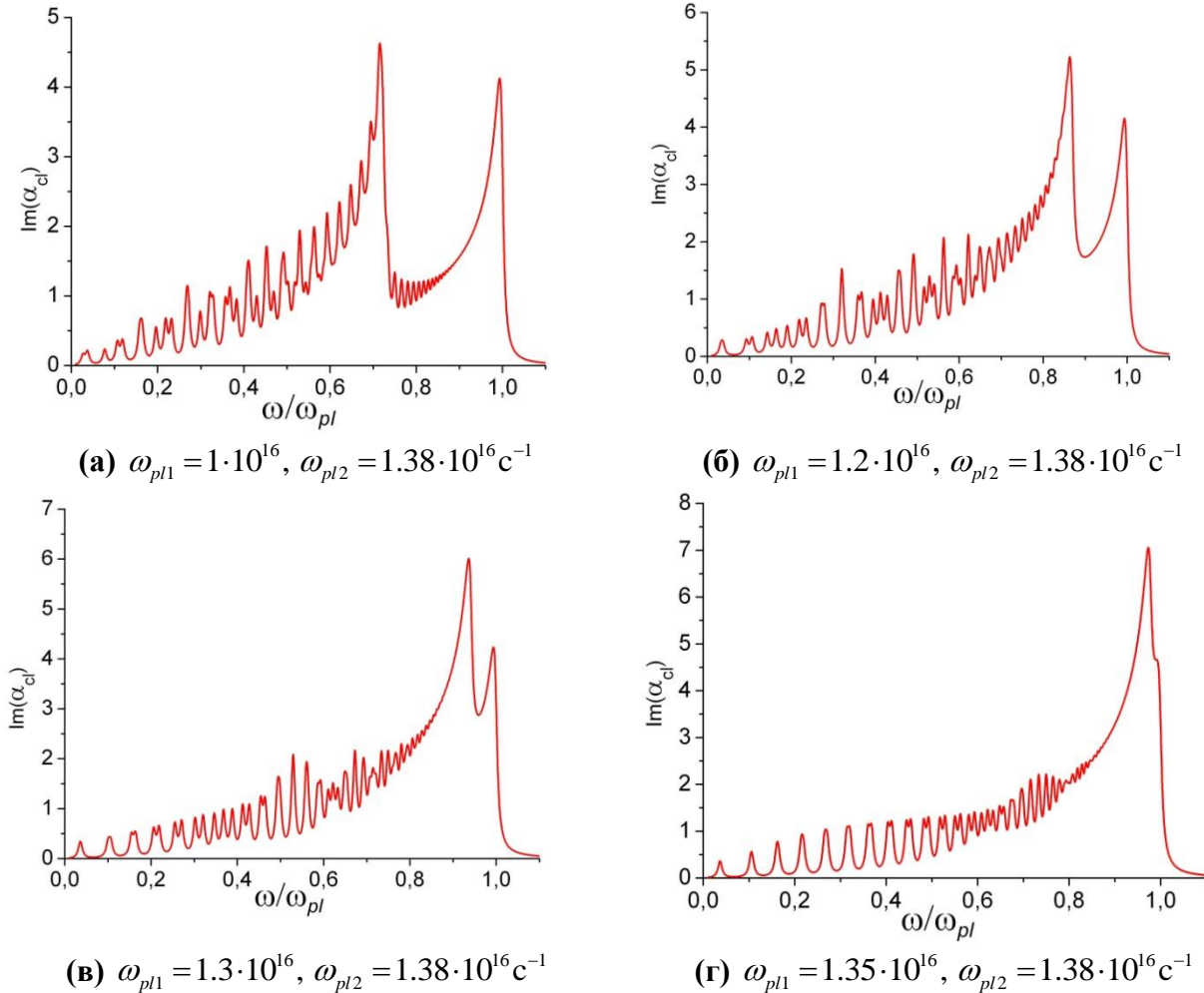


Рис. 4 Деформация спектров $\text{Im}(\alpha_{cl})$ двухчастичного кластера при изменении плазменной частоты металла одной из частиц $\gamma_1 = \gamma_2 = 1.45 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$, $R_1 = R_2 = 5$, $r = 12$ нм, $l_1 = l_2 = 0.102$ нм, $\varepsilon_m = 1.2$, $\theta = 0$, $\varphi = 0$.

На рис. 4 представлены спектры мнимых частей поляризуемости двухчастичного кластера, состоящего из двух сферических наночастиц одинакового радиуса, из различных металлов с одинаковыми длинами томас-фермиевского экранирования, но разными плазменными частотами. Из рис. 4 видно, что чем больше разница между плазменными частотами металлов, составляющих частицы, тем сильнее искажается результирующий спектр кластера, возникает второй, отчетливо выраженный резонансный пик, сдвигающийся в сторону низких частот по мере увеличения указанной разности.

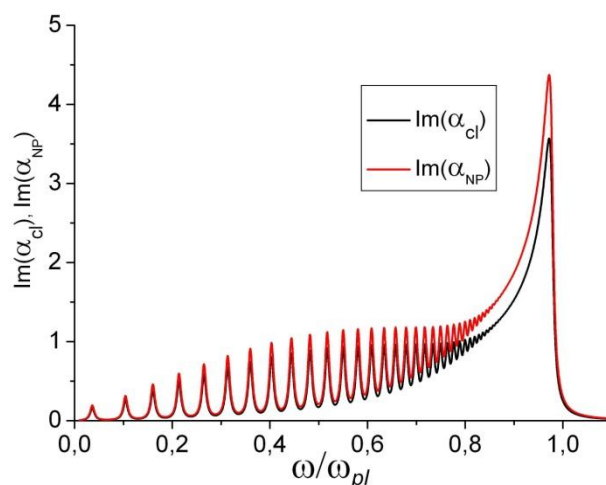


Рис. 5 Спектры мнимых частей поляризуемости отдельной проводящей наночастицы (красный) и кластера, состоящего из металлической и диэлектрической наночастиц (черный).

$$\gamma_1 = 1.45 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}, R_1 = 5, R_2 = 7, r = 15 \text{ нм}, l_1 = 0.102 \text{ нм}, \varepsilon_m = 1.2, \theta = 0, \varphi = 0.$$

Проведенные исследования поляризуемости двухчастичного кластера позволили выявить некоторые закономерности. В случае, когда кластер состоит из двух идентичных наночастиц, изменения размера кластера r приводят к следующим изменениям поляризуемости. Если ось кластера r и вектор напряженности электрического поля \mathbf{E} сонаправлены, то с увеличением расстояния между частицами величина поляризуемости уменьшается, а если вектор \mathbf{E} перпендикулярен оси кластера r , то она увеличивается. В случае, когда частицы кластера состоят из разных материалов, эта зависимость может носить обратный характер.

Увеличение величины диэлектрической проницаемости среды ε_m приводит к увеличению амплитуды спектра поляризуемости.

Изменение взаимной ориентации векторов \mathbf{E} (напряженности электрического поля) и \mathbf{r} (оси кластера) приводит, главным образом, к изменению амплитуды, структура спектра заметным образом не изменяется.

Спектры поляризуемостей кластера и частицы похожи по структуре в том случае, когда компоненты кластера идентичны, т.е. частицы имеют одинаковые значения параметров ω_{pl} , γ , l и R . Если же величина одного из этих параметров изменяется даже незначительно, в спектре кластера наблюдается появление новых резонансных частот. Изменение частоты столкновений электронов для металлов обеих частиц мало влияет на форму спектров. При неизменности параметров частиц, изменение частоты γ не приводит к появлению новых резонансных частот в спектре, а только меняет его амплитуду.

Небольшое изменение плазменной частоты одной частицы, приводит к сильным искажениям спектра, возникают новые резонансные пики (рис. 4). Это происходит даже в том случае, когда все остальные параметры частиц кластера одинаковы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и

правительства Оренбургской области (проект № 14-02-97000).

Список литературы

1. Климов, В.В. Наноплазмоника : монография / В.В. Климов. – / Москва: Физматлит, - 2009. - 480 с. – ISBN 978-5-9221-1030-3.
2. Кучеренко, М.Г. Тензорное представление динамической поляризуемости двухчастичного нанокластера в приближении точечных диполей / М.Г. Кучеренко // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как регион. центр образования, науки и культуры». Вопросы фундам. и прикл. физики. Оренбург: ОГУ, 2013.
3. Кучеренко, М.Г. Модификация спектра дипольной электрической поляризуемости кластера из двух проводящих сферических наночастиц во внешнем магнитном поле / М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // Вестник ОГУ. 2014. №1 (162). С. 118-126.
4. Sugakov, V. I. Localized exciton states with giant oscillator strength in quantum well in vicinity of metallic nanoparticle / V. I. Sugakov and G. V. Vertsimakha // Phys. Rev. B. – 2010. –V. 81. - P. 235308.
5. Kucherenko, M.G. Influence of magnetic field on absorption spectra of hybrid nanoclusters / M.G. Kucherenko, V.M. Nalbandyan // Russian-Japanese Conference «Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials»: Proceedings. 29-31 October 2014. – OSU, Orenburg, Russia / ИПК «Университет», 2014. – P.59-61.
6. Кучеренко, М.Г. Динамическая поляризуемость нанопара в случае вырожденного электронного газа и ее роль в плазмонном механизме передачи энергии / М.Г. Кучеренко // Вестник ОГУ. 2012. №1. С. 141-149.
7. Смирнов, М. Б. Многократная ионизация томас- фермиевского кластера сильным электромагнитным полем / М. Б. Смирнов, В.П. Крайнов // ЖЭТФ. 1999. -Т. 115. - Вып. 6. –С. 2014-2019.
8. Крайнов, В.П. Эволюция больших кластеров под действием ультракороткого сверхмощного лазерного импульса / В.П. Крайнов, М. Б. Смирнов // Успехи физ. наук. 2000. -Т. 170. -№ 9. –С. 969-990.
9. Гадомский, О.Н. Электронные состояния в металлических кластерах / О.Н. Гадомский, А.С. Шалин // ЖЭТФ. 2007. –Т. 131. - Вып. 5. –С. 5-13.
10. Kucherenko, M.G. Plasmon resonances in absorption and scattering spectra of bimetallic nanoparticles with degenerate electronic gas / M.G. Kucherenko, T.M. Chmereva // Russian-Japanese Conference «Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials»: Proceedings. 29-31 October 2014. – OSU, Orenburg, Russia / ИПК «Университет», 2014. – P.78-80.

ВЛИЯНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ НА ПРОЦЕССЫ ДЕЗАКТИВАЦИИ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЫ

Кучеренко М.Г., Русинов А.П.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

В работах многих авторов показано, что добавление проводящих наночастиц в молекулярные системы различного рода влияет на вероятности процессов поглощения, испускания и безызлучательного переноса энергии с участием фотоактивных молекул [1-5]. В то же время существует потребность в разработке наглядной теоретической модели, позволяющей произвести описание механизмов этого влияния на микроуровне и сопоставить теоретические результаты и эксперимент. В данной работе рассмотрено действие металлической наночастицы на процессы спонтанного испускания квантов электромагнитного поля возбужденной молекулой и ее безызлучательной дезактивации.

Вероятность (скорость) спонтанной дезактивации возбужденного состояния молекулы определяется вектором $\mathbf{p} = \langle i | \hat{\mathbf{p}} | f \rangle$ электронного дипольного момента перехода между начальным i и конечным f состояниями в молекуле

$$w_{sp}(\omega) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{p}|^2. \quad (1)$$

Внесение металлической наночастицы в рассматриваемую систему изменяет локальное электромагнитное поле вблизи молекулы, что можно учесть введением общего дипольного момента системы «наночастица-молекула»

$$\mathbf{p}' = [\tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})\tilde{\alpha}(\omega)]\mathbf{p}, \quad (2)$$

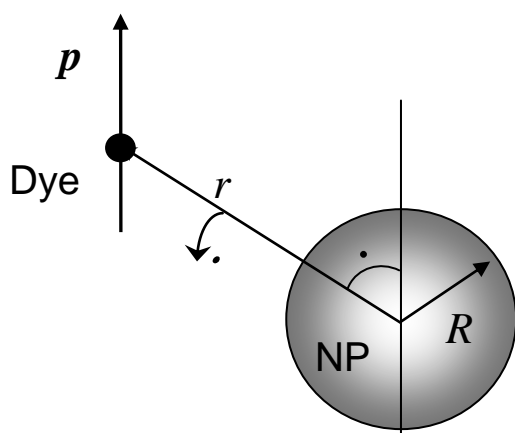


Рисунок 1. Геометрия системы «наночастица-молекула» в сферических координатах

где $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ – квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника, $\tilde{\alpha}(\omega)$ – тензор поляризуемости наночастицы. Тогда в (1) необходимо провести замену $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}'$.

Для описания геометрии рассматриваемой системы введем сферические координаты с осью, параллельной направлению вектора дипольного момента \mathbf{p} , и полюсом в центре сферической наночастицы. Тогда, в общем случае, положение молекулы будет определяться модулем радиус-вектора r , полярным θ и азимутальным φ углами.

Общий вид диадической функции Грина в данных координатах

$$\tilde{\mathbf{G}}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r^3} \begin{pmatrix} 3 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi - 1 & \frac{3}{2} \sin^2 \theta \sin 2\varphi & \frac{3}{2} \sin 2\theta \cos \varphi \\ \frac{3}{2} \sin^2 \theta \sin 2\varphi & 3 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi - 1 & \frac{3}{2} \sin 2\theta \sin \varphi \\ \frac{3}{2} \sin 2\theta \cos \varphi & \frac{3}{2} \sin 2\theta \sin \varphi & 3 \cos^2 \theta - 1 \end{pmatrix},$$

и выражение для вероятности спонтанного перехода в единицу времени принимает вид

$$w_{sp}(\omega, r, \theta) = \frac{4 \omega^3 p^2}{3 \hbar c^3} \left(1 + \frac{(1 + 3 \cos 2\theta) \operatorname{Re} \alpha(\omega)}{r^3} + \frac{(5 + 3 \cos 2\theta) |\alpha(\omega)|^2}{2r^6} \right), \quad (2)$$

где зависимость от азимутального угла φ отсутствует.

Далее определим спектральную плотность числа фотонов испущенных молекулой на частоте ω как произведение вероятности спонтанного перехода и его форм-фактора $g(\omega)$ [6]

$$\frac{d}{d\omega} N_{sp}(r, \theta, \omega) = \frac{1}{2\pi} w_{sp}(\omega, r, \theta) g(\omega).$$

Обычно данный форм-фактор выбирают в лоренцевом виде

$$g(\omega) = \frac{\gamma}{(\omega - \omega_{if})^2 + \gamma^2},$$

где γ есть ширина линии.

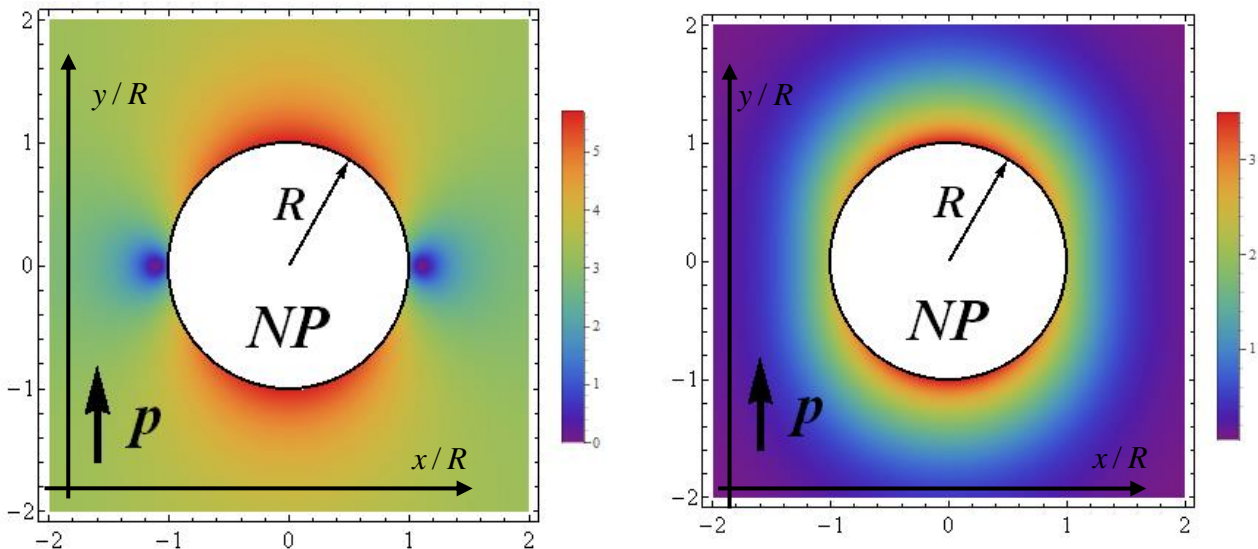


Рис. 2. Пространственная зависимость логарифма вероятности спонтанного перехода на резонансной частоте перехода ω_{if} (слева) и на частоте плазмонного резонанса наночастицы ω_p (справа)

Расчеты вероятности спонтанного перехода в молекуле для различных

геометрий системы «наночастица-молекула» (рисунок 2) показывают, что вблизи наночастицы вероятность перехода немонотонна: она максимальна, когда наночастица расположена на продолжении вектора дипольного момента и минимальна когда радиус-вектор \mathbf{r} нормален вектору \mathbf{p} .

Отметим, что влияние металлической наночастицы, в данной системе, не ограничивается усилением спонтанных переходов в молекуле. Необходимо, также, учитывать безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения молекулы на плазмонные моды наночастицы (с их последующим затуханием). Этот процесс пропорционален мнимой части поляризуемости наночастицы. Так, для скорости безызлучательного переноса энергии от молекулы к наночастице можно записать [7]

$$\gamma_{ri}(\omega, r, \theta) = \frac{1}{2\hbar} \text{Im} \alpha(\omega) \frac{p^2}{\epsilon_m^2 r^6} (1 + 3 \cos^2 \theta), \quad (3)$$

где ϵ_m – диэлектрическая проницаемость среды на частоте перехода $i \rightarrow f$, а $\text{Im} \alpha(\omega) > 0$.

На рисунке 3 показана зависимость скорости переноса энергии от пространственного расположения молекулы относительно наночастицы. Так, вероятность переноса с увеличением r при любых θ монотонно спадает до 0, а для случая спонтанного испускания $w_{sp}(\omega, r \rightarrow \infty, \theta) \rightarrow w_{0sp}(\omega)$.

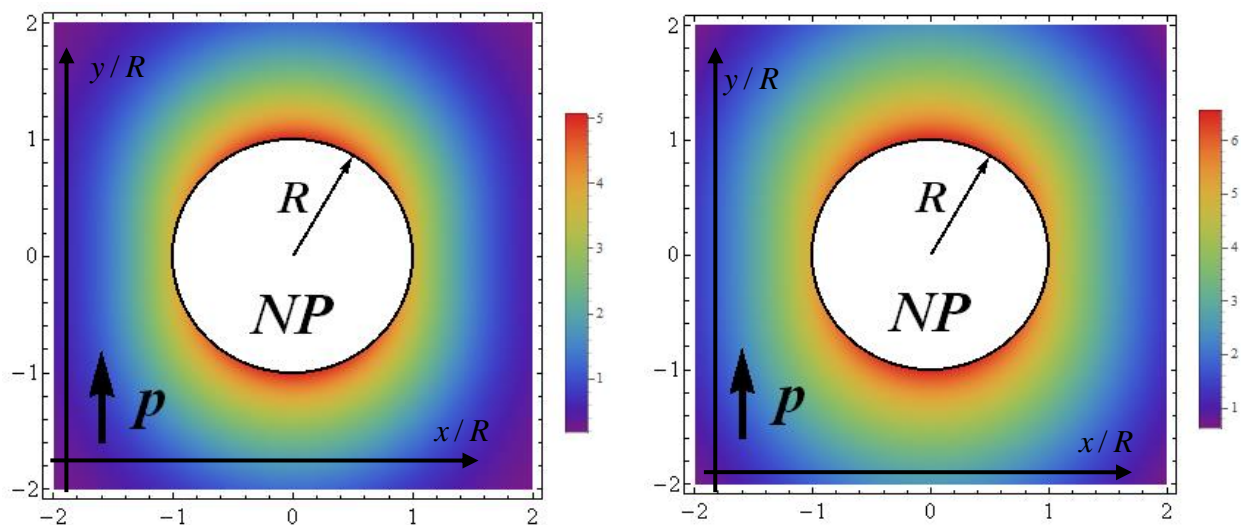


Рисунок 3. Пространственная зависимость логарифма вероятности $\gamma_{ri}(\omega, r, \theta)$ переноса энергии электронного возбуждения молекулы на наночастицу на резонансной частоте перехода ω_f (слева) и на частоте плазмонного резонанса наночастицы ω_p (справа)

Спонтанное испускание и безызлучательный перенос энергии на наночастицу являются конкурирующими процессами распада возбужденного состояния молекулы, и для их совместного учета необходимо определить долю молекул, распавшихся радиационным способом (квантовый выход люминесценции)

$$\eta(\omega, r, \theta) = \frac{w_{sp}(\omega, r, \theta)}{w_{sp}(\omega, r, \theta) + \gamma(\omega, r, \theta) + K}, \quad (4)$$

где K – скорость безызлучательного распада молекул красителя без наночастицы. Тогда результирующая (выходная) спектральная плотность числа фотонов испущенных молекулой на частоте ω с учетом (4) запишется как

$$\left(\frac{d}{d\omega} N_{sp}(r, \theta, \omega) \right)_{out} = \frac{d}{d\omega} N_{sp}(r, \theta, \omega) \eta(\omega, r, \theta).$$

На рисунке 4, показана данная зависимость в различных точках пространства относительно наночастицы. Откуда видно (рис.4, левый), что на резонансной частоте перехода ω_{if} вблизи наночастицы результирующая вероятность снижается на порядок по сравнению с рисунком 2, а на частоте плазмонного резонанса наночастицы данная величина немонотонна (рис. 4, правый), однако, с учетом амплитуды эффекта правильнее говорить о практически полной взаимной компенсации спонтанных и безызлучательных процессов.

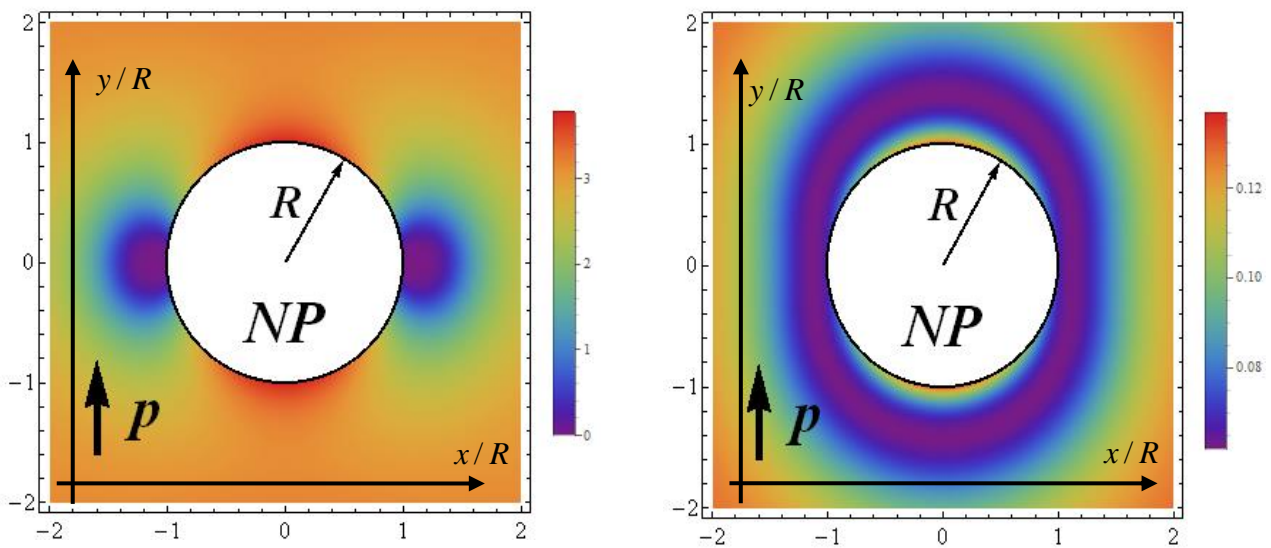


Рисунок 4. Пространственная зависимость логарифма результирующей вероятности излучательного спонтанного перехода на резонансной частоте ω_{if} (слева) и на частоте плазмонного резонанса наночастицы ω_p (справа)

Таким образом, эффект конкуренции спонтанных и безызлучательных процессов в макроскопических системах зависит от взаимного пространственного распределения молекул и наночастиц. В простейшем случае изотропного углового распределения ориентаций дипольного момента молекул можно провести усреднение вероятностей переходов по всевозможным угловым конфигурациям. Далее, считая радиальное распределение молекул фотохрома и наночастиц в образце однородным, можно ввести параметр $R_{Max} \sim 1/\sqrt[3]{n_{NP}}$, пропорциональный среднему расстоянию между наночастицами

и считать, что расстояние между молекулой фотохрома и наночастицей $r \leq R_{Max}$. Усредняя выражения (2) и (3) в пределах от R (радиуса наночастицы) до R_{Max} можно записать

$$W_{sp}(\omega) = \frac{4 \omega^3 p^2}{3 \hbar c^3} \left(1 + \frac{3 \operatorname{Re} \alpha(\omega) \ln(R_{Max}/R)}{R_{Max}^3 - R^3} + \frac{5 |\alpha(\omega)|^2}{2 R_{Max}^3 R^3} \right), \quad (4)$$

$$\Gamma(\omega) = \frac{5}{4 \hbar} \operatorname{Im} \alpha(\omega) \frac{p^2}{\epsilon_m^2 R_{Max}^3 R^3}.$$

Тогда доля молекул η распавшихся по излучательному каналу (квантовый выход люминесценции) запишется как

$$\eta = \frac{W_{sp}(\omega_{if})}{W_{sp}(\omega_{if}) + \Gamma(\omega_{if}) + K}.$$

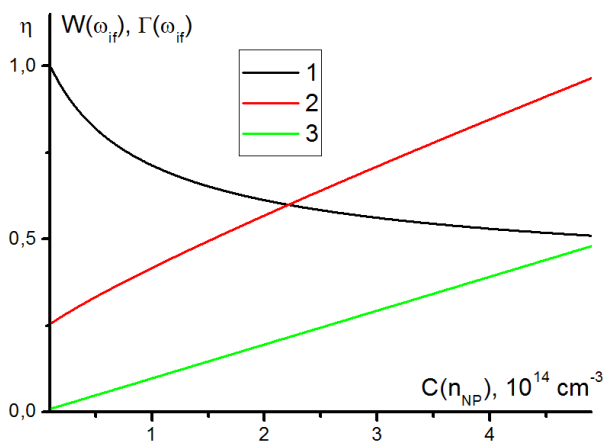


Рисунок 5. Зависимость доли молекул распавшихся по радиационному каналу (1) и нормированных вероятностей спонтанного перехода (2) и безызлучательного переноса (3) в молекуле от концентрации наночастиц

Данный параметр можно легко связать с экспериментально измеряемыми величинами, например, интенсивностью в максимуме спектра флуоресценции или со светосуммой полосы флуоресценции фотохрома. Согласно теоретическим расчетам (рисунок 5) с увеличением концентрации наночастиц вероятность безызлучательной дезактивации и вероятности спонтанных переходов растут, а квантовый выход люминесценции η – уменьшается.

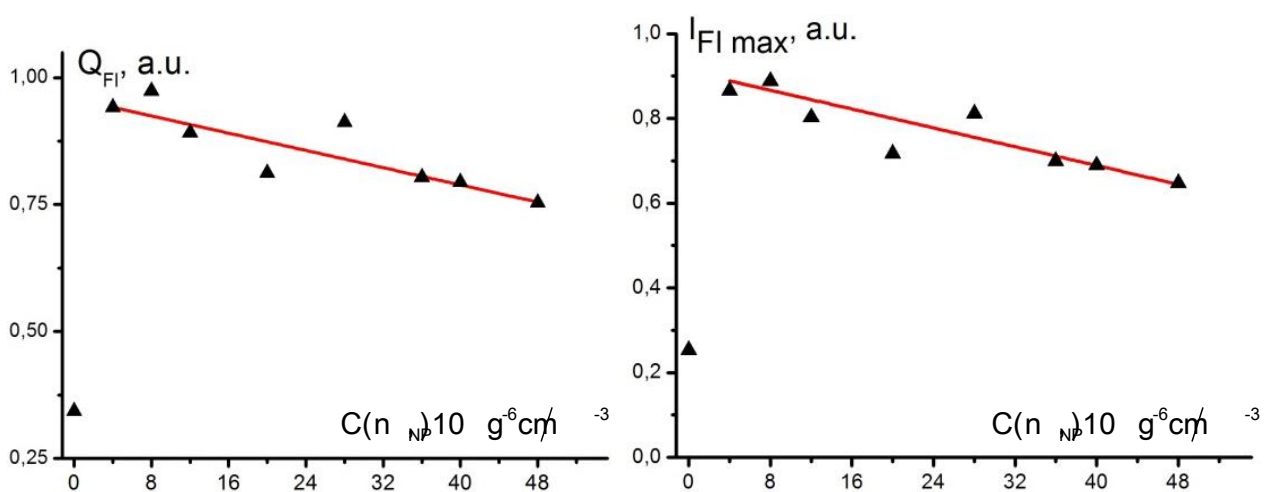


Рисунок 6 – Зависимость светосуммы флуоресценции (слева) и максимума спектра флуоресценции фотохрома (справа) от концентрации наночастиц серебра

Сравнивая теоретическую зависимость $\eta(C(n_{NP}))$ с экспериментальными результатами (рисунок 6) можно отметить их качественное согласие в области больших концентраций наночастиц, и расхождение теории и эксперимента при малых концентрациях, что свидетельствует об ограниченности модели и связано с грубостью предположения об однородном распределении реагентов в образце. Поэтому более точное согласие теории и эксперимента можно получить, задавая радиальное распределение молекулы с максимумом вблизи наночастицы, что и планируется выполнить в дальнейшем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 14-02-97000), а также Министерства образования и науки РФ (Госзадание № 233).

Список литературы

1. Sun G., Khurgin J.B., Soref R.A. Practical enhancement of photoluminescence by metal nanoparticles. // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – V. 94, – P. 101103-1–101103-3.
2. Т.И. Суворова, А.Н. Балбекова, В.Г. Ключев и др. Усиление люминесценции молекул красителей в присутствии серебряных наночастиц // *Оптический журнал.* – 2012 – № 1. – Т.79, С. 79-82.
3. K. Ray, M.H. Chowdhury, J. Zhang, Y. Fu, H. Szmazinski, K. Nowaczyk, and J.R. Lakowicz Plasmon-Controlled Fluorescence Towards High-Sensitivity Optical Sensing. // *Adv. Biochem Engin. Biotechnol.* – 2009. – V.116, – P. 29–72.
4. Кислов Д.А., Кучеренко М.Г. Безызлучательный триплет-синглетный перенос энергии электронного возбуждения между молекулами красителей вблизи поверхности серебряной пленки. // *Оптика и спектроскопия.* – 2014. – № 5. – Т.117, – С. 809–816.
5. Зейниденов А.К., Ибраев Н.Х., Кучеренко М.Г. Влияние наночастиц серебра на электронные переходы в молекулах красителей и генерационные характеристики жидкостных лазеров на их основе. // *Вестник ОГУ.* – 2014. – № 9. Т.170, – С. 96-102.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. IV. Квантовая электродинамика. – М.: Наука. 1989. – 720 с.
7. Кучеренко М.Г. Динамическая поляризуемость наносфера в случае вырожденного электронного газа и ее роль в плазмонном механизме передачи энергии. // *Вестник ОГУ.* – 2012. – №1. – Т.137, – С. 141-149.

ЭКСИТОН-ПЛАЗМОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «ПОЛУПРОВОДНИКОВАЯ КВАНТОВАЯ НИТЬ – СФЕРИЧЕСКАЯ МЕТАЛЛОКОМПОЗИТНАЯ НАНОЧАСТИЦА»

Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

К числу приоритетных научных задач сегодня, безусловно, относится проблема создания экситон-плазмонных амплификаторов и конверторов электромагнитных полей оптического диапазона частот для твердотельной наноэлектроники, а также молекулярной и квантовой электроники, включая фотоэлектронную сенсорику биомолекул [1]. Перечень прикладных задач этого направления заключается в разработке новых наноструктурированных функциональных устройств и систем, предназначенных осуществлять локальное усиление электромагнитного поля в определенных областях пространства, а также целенаправленное пространственно-временное перераспределение силовых характеристик поля. В качестве такого поля может использоваться, например, поле лазерного излучения или вызванное (инициированное) им излучение некоторой атомно-молекулярной системы. Разработанные до настоящего времени концентраторы и конверторы излучения оптического диапазона частот не удовлетворяют в полной мере современным требованиям соответствующей области техники и технологий. Это связано с тем, что долгие годы развитие устройств оптической техники базировалось на законах формирования полей в дальней зоне излучателей. Устройства, преобразующие электромагнитное поле в ближней зоне, связаны с нанометровыми пространственными масштабами, меньшими длины волны излучения, реальное освоение которых стало возможным лишь в последние десятилетия, после того как были решены проблемы наномасштабного пространственного позиционирования [2].

С аналогичной целью, в работе [3] рассматривалась трехслойная квантовая нить «полупроводник-диэлектрик-металл». В такой системе одномерные экситоны полупроводниковой квантовой нити взаимодействуют с плазмонами металлического слоя посредством созданных изображений электронов и дырок. Полученные в [3] численные результаты свидетельствуют о том, что экситонное поглощение существенно модифицируется: появляется сдвиг максимума спектральной полосы в длинноволновую область, который достигает 10 мэВ. Авторы [3] показали, что величину экситон-плазмонного взаимодействия можно регулировать изменяя размеры структуры, диэлектрические постоянные ее компонентов, а также ширину энергетической щели квантовой нити.

В [4] рассмотрены наноразмерные суперструктуры из CdTe нанопроволок (NW) и металлических наночастиц (NP), полученные с помощью реакции биоконъюгации. Согласно экспериментальным данным интенсивность люминесценции CdTe NW существенно возрастает в случае конъюгации. Максимальная интенсивность люминесценции возрастает в пять раз, а длина

волны, соответствующая максимуму спектра, постепенно смещается в сторону повышения энергии (синий сдвиг). Интенсивность люминесценции NW зависит также и от количества золотых наночастиц, окружающих излучатель. В [5] рассмотрен перенос энергии экситонов сферической квантовой точки к металлической нанопроволоке с возбуждением в ней одномерных поверхностных плазмонов.

В данной работе, в продолжение [6-7], где использован подход авторов [8-10], произведено построение модели безызлучательного переноса энергии от квантовой нити к малым сферическим частицам, внедренным в прозрачную диэлектрическую среду, и обеспечивающим диссипацию энергии электрического поля за счет конечного времени жизни плазмонов, либо других элементарных электронных возбуждений (например, френкелевских экситонов в сферическом слое нанокompозита «металлическое ядро- молекулярный слой»). Заметим, что в [11] рассматривался в некотором смысле схожий процесс передачи энергии одномерных поверхностных плазмонов металлической нанопроволоки к молекулам-акцепторам в среде.

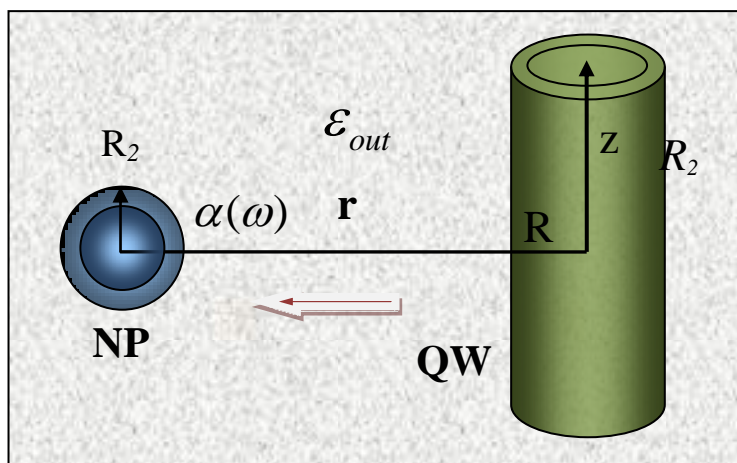


Рис. 1. Пространственная конфигурация полупроводниковой квантовой нити (QW) с экситоном Ваннье-Мотта и слоистого проводящего нанокompозита (NP) радиуса R_2 с эффективной поляризуемостью $\alpha(\omega)$ в инертной диэлектрической среде с проницаемостью ϵ_m . Стрелкой указано направление переноса энергии.

Поляризация квантовой нити при возбуждении когерентного экситона

Рассмотрим квантовую нить кругового сечения, состоящую из полупроводникового стержня радиуса R_c и коаксиальной диэлектрической оболочки толщиной $\Delta = R - R_c$ (Рис.1). Квантовая нить помещена в прозрачную диэлектрическую среду с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_{out} = \text{Re} \epsilon_{out}$, в отличие от случая, рассмотренного в [6-7] с комплексным ϵ_{out} . Диэлектрическая проницаемость стержневой части и оболочки квантовой нити ϵ_{in} принимается действительной и постоянной. Ось квантовой нити обозначена через z .

Определенный интерес для исследования радиационных и безызлучательных процессов в ближнем поле представляет рассмотрение дипольной поляризуемости шарового нанокompозита «шар-оболочка», представляющего собой металлический кор с металлическим же, или полупроводниковым слоем. Диэлектрические проницаемости компонентов композита существенно комплексны, чем и определяется диссипация энергии поля в наночастицах. Характеристики такой сложной наноантенны являются более переменными по сравнению с характеристиками однородного проводящего шара [12] за счет изменения диэлектрических проницаемостей компонентов композита и их радиусов.

Вектор поляризации квантовой нити $\mathbf{P}(r, z)$, формируемый одномерными экситонами Ванье-Мотта в условиях сильного радиального конфинмента электрона и дырки, имеет вид [6-7]:

$$\mathbf{P}(r, z) = \frac{\mathbf{d}_{vc}}{\sqrt{a_B L R_c}} J_0^2(k_r r) \exp(ik_z z), \quad (1)$$

где \mathbf{d}_{vc} - векторный матричный элемент межзонного электронного дипольного момента перехода; a_B - боровский радиус экситона; L и R_c - длина и радиус приосевой области квантовой нити; $J_0(x)$ - функция Бесселя первого рода; k_r и k_z - волновые числа радиального движения электрона (дырки) в нити и осевого движения экситона, соответственно.

Значения k_r представляют собой корни уравнения $J_0(k_r R_c) = 0$. Для нижних значений энергии электрона и дырки используется минимальный по величине корень $\min(k_r R_c) = 2,4048$. Значение волнового числа k_z для свободного движения экситона вдоль оси цилиндра, в случае термализованных частиц оценивается как $k_z = \hbar^{-1} \sqrt{m_{exc} k_B T}$.

Электрическое поле, создаваемое одномерным экситоном квантовой нити

Потенциал $\Phi_{in}(r, \varphi, z)$ электрического поля внутри квантовой нити удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\varepsilon_{in} \nabla^2 \Phi_{in}(r, \varphi, z) = -4\pi \rho(r, \varphi, z), \quad (2)$$

а во внешней диэлектрической среде – уравнению Лапласа

$$\nabla^2 \Phi_{out}(r, \varphi, z) = 0. \quad (3)$$

Мы рассмотрим два случая поляризации квантовой нити: Z-поляризацию, когда вектор \mathbf{d}_{vc} - направлен вдоль оси квантовой нити, и X-поляризацию, когда

вектор \mathbf{d}_{vc} лежит в плоскости поперечного сечения нити. Для обоих случаев

$$\rho_M(r, \varphi, z) = -\text{div } \mathbf{P}_M(r, z), \quad (4)$$

где \mathbf{P} – вектор поляризации, определенный выражением (1), а индекс $M=X, Z$ означает состояние поляризации.

Зависимость потенциалов $\Phi_{in}(r, \varphi, z)$ и $\Phi_{out}(r, \varphi, z)$ от координаты z имеет одинаковый вид для обеих областей: $\Phi_{in(out)}(r, \varphi, z) = u(r, \varphi) \exp(ik_z z)$. Тогда из (2) и (3) получаем, соответственно, неоднородное и однородное уравнения Гельмгольца для функций $u_{in}(r, \varphi)$ и $u_{out}(r, \varphi)$

$$\left[\nabla_{r, \varphi}^2 - k_z^2 \right] u(r, \varphi) = \begin{cases} 4\pi\rho_M(r, \varphi) / \varepsilon_{in}, & r < R \\ 0, & r > R, \end{cases} \quad (5)$$

где

$$\rho_Z(r) = -\frac{\mathbf{d}_{vc}}{\sqrt{a_B} LR_c^2} ik_z J_0^2(k_r r), \quad (6)$$

$$\rho_X(r, \varphi) = -\frac{2\mathbf{d}_{vc}}{\sqrt{a_B} LR_c^2} k_r J_0(k_r r) J_1(k_r r) \cos \varphi = \rho_X(r) \cos \varphi, \quad (7)$$

со следующими граничными условиями

$$\left. \frac{\partial u_{in}}{\partial r} \right|_{r=R-0} = \frac{\varepsilon_{out}}{\varepsilon_{in}} \left. \frac{\partial u_{out}}{\partial r} \right|_{r=R+0} = f(R, \varphi), \quad (8)$$

где $f(r, \varphi)$ – неизвестная граничная функция, которая может быть определена из равенства потенциалов на границе: $u_{in}(r=R-0) = u_{out}(r=R+0)$.

Решение внутренней задачи Неймана в области $0 < r < R$ для неоднородного уравнения Гельмгольца с неоднородным граничным условием (8)

$$\nabla^2 u(r, \varphi) - k^2 u(r, \varphi) = -F(r, \varphi), \quad \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{r=R-0} = f(R, \varphi) \quad (9)$$

может быть представлено с помощью функции Грина в виде суммы двух интегралов, контурного – по окружности L , и двумерного – в круговой области S :

$$u(r, \varphi) = \oint_L G_2^{r < R}(r, \varphi, R, \varphi') f(R, \varphi') R d\varphi' + \int_S G_2^{r < R}(r, \varphi, r', \varphi') F(r', \varphi') r' dr' d\varphi', \quad (10)$$

где $F(r, \varphi) = 4\pi\rho_M(r, \varphi) / \varepsilon_{in}$ - неоднородность уравнения Гельмгольца; $G_2^{r < R}(r, \varphi, r', \varphi')$ - функция Грина уравнения Гельмгольца внутренней задачи Неймана для круга [13]

$$G_2^{r < R}(r, \varphi, r', \varphi') = \left(\frac{1}{2\pi} K_0(k_z R_{MM_0}) - \frac{K_0'(k_z R)}{I_0'(k_z R)} I_0(k_z r) I_0(k_z r') - \right. \\ \left. - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{K_n'(k_z R)}{I_n'(k_z R)} I_n(k_z r) I_n(k_z r') \cos(\varphi - \varphi') \right), \quad (11)$$

где $K_n(k_z \xi)$ и $I_n(k_z \xi)$ - функции Бесселя второго рода, а расстояние между точками M и M_0 определены выражением $R_{MM_0} = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi')}$.

В случае внешней задачи Неймана однородного уравнения Гельмгольца для круга с неоднородным граничным условием (8)

$$\nabla^2 u(r, \varphi) - k_z^2 u(r, \varphi) = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R+0} = \frac{\varepsilon_{in}}{\varepsilon_{out}} f(R, \varphi), \quad r > R \quad (12)$$

решение представляется в виде одного контурного интеграла

$$u(r, \varphi) = \int_L \frac{\varepsilon_{in}}{\varepsilon_{out}} f(R, \varphi') G_2^{r > R}(r, \varphi, r', \varphi') R d\varphi', \quad (13)$$

в котором $G_2^{r > R}(r, \varphi, r', \varphi')$ - функция Грина уравнения Гельмгольца внешней задачи Неймана для круга [13]

$$G_2^{r > R}(r, \varphi, r', \varphi') = \left(\frac{1}{2\pi} K_0(k_z R_{MM_0}) - \frac{I_0'(k_z R)}{K_0'(k_z R)} K_0(k_z r) K_0(k_z r') - \right. \\ \left. - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{I_n'(k_z R)}{K_n'(k_z R)} K_n(k_z r) K_n(k_z r') \cos(\varphi - \varphi') \right). \quad (14)$$

Тогда выражение для потенциала $\Phi_{out}(r, \varphi, z)$ поля во внешней среде принимает вид

$$\Phi_{out}^{(M)}(r, \varphi, z) = f_M(R, \varphi) \frac{K_n(k_z r)}{k_z K_n'(k_z R)} \frac{\varepsilon_{in}}{\varepsilon_{out}} \exp(ik_z z), \quad (15)$$

где

$$f_M(R, \varphi) = u_F^{(M)}(R, \varphi) k_z \left[\frac{K_n(k_z R)}{K'_n(k_z R)} \frac{\varepsilon_{in}}{\varepsilon_{out}} - \frac{I_n(k_z R)}{I'_n(k_z R)} \right]^{-1}, \quad (16)$$

$$u_F^{(M)}(R, \varphi) = \frac{4\pi}{\varepsilon_{in}} \left[\frac{I_n(k_z R) K'_n(k_z R)}{I'_n(k_z R)} - K_n(k_z R) \right] g_M(\varphi) \int_0^{R_c} I_n(k_z r) \rho_M(r, z) r dr \quad (17)$$

$$g_M(\varphi) = \begin{cases} 1, & M = Z \\ \cos \varphi, & M = X, \end{cases}$$

причем $n = 0$ и $n = 1$ для случая Z и X поляризации соответственно, а ε_{in} , ε_{out} - диэлектрические проницаемости полупроводника и среды выбираются на частоте экситонного перехода. Интегрирование по радиальной переменной r в (18) производится только до границы R_c , поскольку при $r > R_c$ вектор поляризации $\mathbf{P}(r) \equiv 0$.

Обозначим диэлектрическую проницаемость кора через $\varepsilon_c(\omega)$, его радиус – через R_1 , оболочки – $\varepsilon(\omega)$, R_2 , соответственно. Обе проницаемости $\varepsilon_c, \varepsilon$ композита полагаем зависящими от частоты ω (имеет место частотная дисперсия). В отсутствие вырождения электронного газа металлов для дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ нанокompозита в среде получаем [14] ($\xi = R_1 / R_2 \leq 1$)

$$\alpha(\omega) = \frac{[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out}][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c(\omega)] - [2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_{out}][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c(\omega)] \xi^3}{[\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_{out}][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c(\omega)] - 2[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out}][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c(\omega)] \xi^3} R_2^3. \quad (18)$$

В случае вырождения электронного газа металла кора или оболочки выражение (18) перестает быть справедливым и необходимо использовать вместо него выражение для дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ нанокompозита, напоминающее по структуре дипольную поляризуемость однородного шара, но с корректирующим множителем μ

$$\alpha(\omega) = \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out} \mu(\omega | R_1, R_2)}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_{out} \mu(\omega | R_1, R_2)} R_2^3, \quad (19)$$

$$\mu(\omega | R_1, R_2) = \frac{[j_1(kR_2) - \beta y_1(kR_2)]}{[j'_1(kR_2) - \beta y'_1(kR_2)]} \cdot \frac{1}{kR_2}, \quad k^2(\omega) = -\frac{4m_e^{3/2} e^{5/2}}{\pi \hbar^3 \varepsilon(\omega) l^2}, \quad (20)$$

$$\beta(\omega, k, k_c, R_1) = \frac{\varepsilon(\omega) k j'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega) j_1(kR_1) k_c j'_1(k_c R_1) / j_1(k_c R_1)}{\varepsilon(\omega) k y'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega) y_1(kR_1) k_c j'_1(k_c R_1) / j_1(k_c R_1)}. \quad (21)$$

В (20)-(21) $j_1(z)$ и $y_1(z)$ – сферические функции Бесселя и Неймана; l – длина томас-фермиевского экранирования.

При $R_1 \rightarrow 0$ из (21) следует $\beta(\omega, kR_1) \rightarrow 0$ и из (19) и (20) получаем

известный результат [15] для поляризуемости $\alpha(\omega)$ однородного металлического шара радиуса $R = R_2$ с вырожденным электронным газом

$$\alpha(\omega) = R^3 \left[1 + \frac{3\varepsilon_{out}(k(\omega)R \cot k(\omega)R - 1)}{2(\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out})(k(\omega)R \cot k(\omega)R - 1) + \varepsilon(\omega)(k(\omega)R)^2} \right]. \quad (22)$$

Далее рассмотрим характерные случаи, которые могут иметь место, например, для нанокompозитной системы «металл-полупроводник», когда электронный газ металла – вырожденный, а полупроводника – нет.

1. *Вырожденный электронный газ металлической оболочки, невырожденный газ полупроводникового кора.* $k(\omega) \neq 0, k_c \rightarrow 0$.

В этом случае устремляя в формуле (21) $k_c \rightarrow 0$ получаем

$$\beta(\omega, k, k_c \rightarrow 0, R_1) = \frac{\varepsilon(\omega)kj'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega)j_1(kR_1)/R_1}{\varepsilon(\omega)ky'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega)y_1(kR_1)/R_1}. \quad (23)$$

2. *Классический электронный газ оболочки* $k(\omega) \rightarrow 0$, *вырожденный газ кора.*

Для дипольной поляризуемости нанокompозита в этом случае можем записать

$$\alpha(\omega) = \frac{[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out}][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c(\omega)\eta] - [2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_{out}][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c(\omega)\eta]\xi^3}{[\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_{out}][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c(\omega)\eta] - 2[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out}][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c(\omega)\eta]\xi^3} R_2^3, \quad (24)$$

где

$$\eta(k_c R_1) = (k_c R_1) j'_1(k_c R_1) / j_1(k_c R_1)$$

– безразмерный параметр, функционально зависящий от произведения $k_c R_1$.

3. *Классический электронный газ наноболочки и кора.* $k(\omega) \rightarrow 0, k_c \rightarrow 0$.

В этом случае в выражениях (20)-(21) присутствуют лишь диэлектрические проницаемости фаз системы и радиусы R_1, R_2 наноструктуры. Элементарные преобразования (19)-(20) приводят тогда к известному выражению (18). При $R_1 \rightarrow 0$ или при $R_1 \rightarrow R_2$, из (18) получаем классическое выражение для поляризуемости безоболочечного шара с невырожденным электронным газом

$$\alpha(\omega) = \frac{\varepsilon(\omega) - \varepsilon_{out}}{\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_{out}} R_2^3.$$

На рис. 2 представлены результаты расчетов частотных (в единицах плазменной частоты ω_p) зависимостей мнимой $\text{Im}\alpha(\omega)$ части поляризуемости биметаллического сферического нанокompозита, выполненных на основе выражений (19)-(21) для случая, когда электронный газ обоих металлов являлся

вырожденным.

Скорость диссипации энергии на сферической наночастице радиуса R с поляризуемостью $\alpha(\omega)$, расположенной в точке (r, φ) имеет вид [12]

$$\gamma(r, \varphi) = \frac{2}{3} \frac{\pi R_2^3}{\hbar} \text{Im} \alpha(\omega) |\mathbf{E}(r, \varphi)|^2. \quad (25)$$

где $\mathbf{E}(r, \varphi) = -\nabla \Phi_{out}^{(M)}(r, \varphi)$, а потенциал $\Phi_{out}^{(M)}(r, \varphi)$ определен формулой (15). Последнее равенство справедливо в силу того, что частица-композит имеет нанометровый радиус, а расстояние r между осью квантовой нити и центром наночастицы полагаем достаточно большим: $r \gg R, R_2$. Тогда, в пределах области занятой наночастицей, поле $\mathbf{E}(r, \varphi)$ (рис. 3) можно приближенно считать однородным, а его искажения при внесении частицы уже учтены при расчете поляризуемости $\alpha(\omega)$. Таким образом, для расчета скорости $\gamma(r, \varphi)$ переноса энергии достаточно знания напряженности поля, определяемой через градиент потенциала (15), и поляризуемости нанокompозита, определяемой одной из формул: (18), (19)-(21), (22) или (24) – в зависимости от структурно-электронных особенностей строения композита. Характер радиальной и угловой зависимости напряженности поля определен выражением (15) для потенциала $\Phi_{out}^{(M)}(r, \varphi)$. Учитывая асимптотику функции Бесселя $K_n(k_z r) \sim (k_z r)^{-1/2} \exp(-k_z r)$ можем говорить об экспоненциальном затухании напряженности поля при $r \gg R$.

Re α , Im α , $|\alpha|$

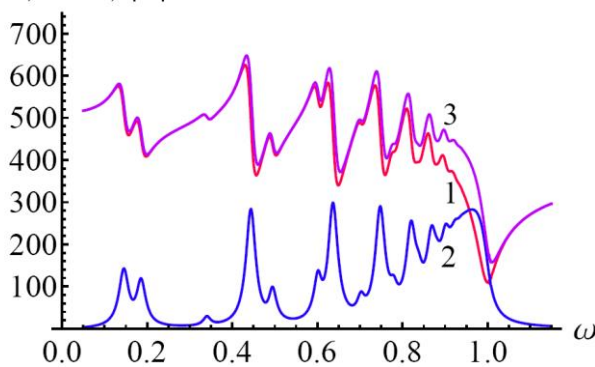


Рис. 2. Частотные (в единицах плазменной частоты ω_p) зависимости действительной (1) и мнимой (2) частей поляризуемости $\alpha(\omega)$ биметаллического сферического нанокompозита с радиусами $R_1 = 2$ и $R_2 = 8$ нм, а также ее модуля $|\alpha(\omega)|$ (3) в нм³. $\omega_p = 1$, $\omega_{pc} = 1.1$, $\gamma = 0.03$, $\gamma_c = 0.02$, $\varepsilon_m = 1.2$, $l = 0.7$, $l_c = 0.12$ нм

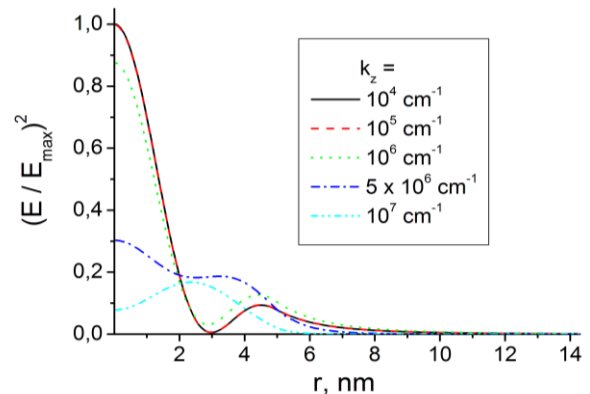


Рис. 3. Радиальная зависимость квадрата относительной напряженности поля при различных значениях волнового числа k_z (см⁻¹) [6-7]. Случай X-поляризации. Расчетные параметры: $R_c = 5$ нм, $\Delta = 0,5$ нм, $|\mathbf{d}^{vc}| \approx 0,1 e a_B$, $\varepsilon_{in} \approx 5$, $\varepsilon_{in} \approx 4 + 3i$.

Таким образом, в данной работе определена дистанционная зависимость скорости тушения когерентных экситонов полупроводниковой квантовой нити проводящим сферическим нанокомпозитом «кор-оболочка», а также эффективность этого тушения, определяемая поляризуемостью композита, с учетом вырожденности электронного газа одного или обоих компонентов концентрической структуры. Конкуренция безызлучательного переноса энергии к акцептирующим наночастицам по отношению к скорости рекомбинации электрона и дырки в полупроводнике зависит от числа композитов-тушителей в системе и характера их размещения относительно квантовой нити.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 14-02-97000), а также Министерства образования и науки РФ (Госзадание № 233).

Список литературы

1. Кучеренко, М.Г. Создание экситон-плазмонных амплификаторов и конверторов электромагнитных полей оптического диапазона частот для твердотельной наноэлектроники, а также молекулярной и квантовой электроники, включая фотоэлектронную сенсорику биомолекул // Заявка-предложение ОГУ о включении темы в перечень приоритетных научных задач Мин. образ. и науки РФ. (Пр-2426 от 18.10.2013, ОГ-П8-7592 от 24.10.2013). 2014. -10 с.
2. Кучеренко, М.Г. Возможности улучшения характеристик сканирующего ближнепольного оптического микроскопа за счет плазмонно-резонансного увеличения скорости безызлучательного переноса энергии / М.Г. Кучеренко, Д.А. Кислов, Т.М. Чмерева // *Росс. нанотехнологии*. 2012. –Т. 7.- №1-2. – С. 71-77.
3. Yan, J. Strong exciton-plasmon interaction in semiconductor-insulator-metal nanowires / J. Yan // *Phys. Review B*. – 2012. – 86.
4. Lee, J. Bioconjugates of CdTe Nanowires and Au Nanoparticles: Plasmon-Exciton Interactions, Luminescence Enhancement, and Collective Effects / J. Lee, A. O. Govorov, J. Dulka, N. A. Kotov // *Nano Letters*. – 2004. – No12. – P. 2323–2330.
5. Чмерева, Т.М. Энергетическая релаксация квантовых точек вблизи металлической нанопроволоки / Т.М. Чмерева, М.Г. Кучеренко, А.Д. Дмитриев // *Сборник трудов междунар. конфер. «Фундамент. проблемы оптики – 2014»*. С.-Петербург. Под ред. В.Г. Беспалова, С.А. Козлова.– СПб: Универ-т ИТМО, 2014. – С. 317-319.
6. Кучеренко, М.Г. Перенос энергии экситонов квантовой нити в органическую среду / М.Г. Кучеренко, Ю.А. Строкова // *Университетский комплекс как регион. центр образования, науки и культуры: матер. Всеросс. научно-метод. конфер.; Оренбург. гос. ун-т. - Оренбург: ОГУ, 2014. 1458-1466.*
11. Stroková, Y.A. Electronic energy transfer from the semiconductor quantum wire excitons to an organic media / Y.A. Stroková, M.G. Kucherenko // *Journal of*

Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2014. –Volume 541, Issue 1, 2014, Article number 012088. – P. 1-5.

7. Agranovich, V.M. *Efficient energy transfer from a semiconductor quantum well to an organic material / V.M. Agranovich, G.C. La Rocca, F. Bassani // Pis'ma v ZhETF. – 1997. – Vol.66. - iss.11. – P. 714-717.*

8. Basco, D. *Forster energy transfer from a semiconductor quantum well to an organic material overlayer / D. Basco, G.C. La Rocca, F. Bassani, V.M. Agranovich // Eur. Phys. J. – 1999. – B. 8. – P. 353-362.*

9. Агранович, В.М. *Резонансный перенос энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице / В.М. Агранович, Д.М. Баско // Письма в ЖЭТФ. – Т.69. - вып.3. – С. 232-235.*

10. Chmereva, T.M. *Influence of Conducting Nanocylinder on Resonance Energy Transfer in Donor–Acceptor Pair of Molecules / T.M. Chmereva, M.G. Kucherenko // Optics and Spectroscopy. – 2011. - V. 110. - No. 5. - P. 767–774.*

11. Кучеренко, М.Г. *Динамическая поляризуемость наношара в случае вырожденного электронного газа и ее роль в плазмонном механизме передачи энергии / М.Г. Кучеренко // Вестник ОГУ. – 2012. – №1. – С. 141–149.*

12. Боголюбов, А.Н. *Задачи по математической физике: Учеб. пособие / А.Н. Боголюбов, В.В. Кравцов– М.: Изд-во МГУ. – 1998. – 350 с.*

13. Климов, В.В. *Наноплазмоника: монография / В.В. Климов - Москва: Физматлит, - 2009. - 480 с.*

14. Крайнов, В.П. *Эволюция больших кластеров под действием ультракороткого сверхмощного лазерного импульса / В.П. Крайнов, М.Б. Смирнов // Успехи физ. наук. 2000. – Т. 170. – № 9. – С. 969–990.*

15. Кучеренко, М.Г. *Проявление вырожденности электронного газа металлов в плазмонно-резонансном структурировании спектров поглощения и рассеяния проводящих композитных наночастиц / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева // Сборник трудов междунар. конфер. «Фундамент. проблемы оптики – 2014». С.-Петербург. Под ред. В.Г. Беспалова, С.А. Козлова.– СПб: Университет ИТМО, 2014. – С. 113-116.*

О ВВЕДЕНИИ ПОНЯТИЯ МОМЕНТА ИМПУЛЬСА И ЗАКОНА ЕГО СОХРАНЕНИЯ В ПРОФИЛЬНЫХ КЛАССАХ СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ

Перунова М.Н.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Законы сохранения играют в физике ключевую роль поскольку являются отражением фундаментального свойства материи – симметрии. Законы сохранения в механике вытекают из свойств пространства и времени. Этих свойств три – однородность времени, однородность пространства и его изотропность. По этой причине законов сохранения в механике тоже три – закон сохранения энергии, сохранения импульса и момента импульса.

Традиционно в школьном курсе физики изучают два закона сохранения – импульса и энергии. Закон сохранения момента импульса в общеобразовательных классах несправедливо замалчивают, очевидно, по причине математических сложностей, связанных введением понятия момента импульса. Тем не менее, изучение этого закона предусмотрено программами профильного обучения [1].

В учебнике под редакцией А.А. Пинского [2] вводится понятие момента импульса тела с закрепленной осью вращения $L = I\omega$ путем преобразования основного закона динамики вращательного движения. О моменте импульса материальной точки не говорится, закон сохранения момента импульса рассматривается на примере одного изолированного тела. Отсутствует понятие момента импульса системы тел, а ведь свойством сохранения обладает именно полный импульс замкнутой системы тел, а не одного тела в отдельности.

В учебнике Г.Я. Мякишева [3] для профильных классов вопрос сохранения момента импульса не рассматривается вообще, не смотря на то, что программа профильной школы под редакцией этого автора [1] предусматривает его изучение.

В пособии С.М. Козела [4] для учащихся и абитуриентов момент импульса вводится формально: назовем моментом импульса произведение момента инерции тела на его угловую скорость $L = I\omega$. Сохранение момента импульса рассматривается опять же на примере одного тела, затем проводится обобщение на случай замкнутой системы тел.

Необходимость рассмотрения закона сохранения момента импульса в курсе механики обусловлена рядом причин:

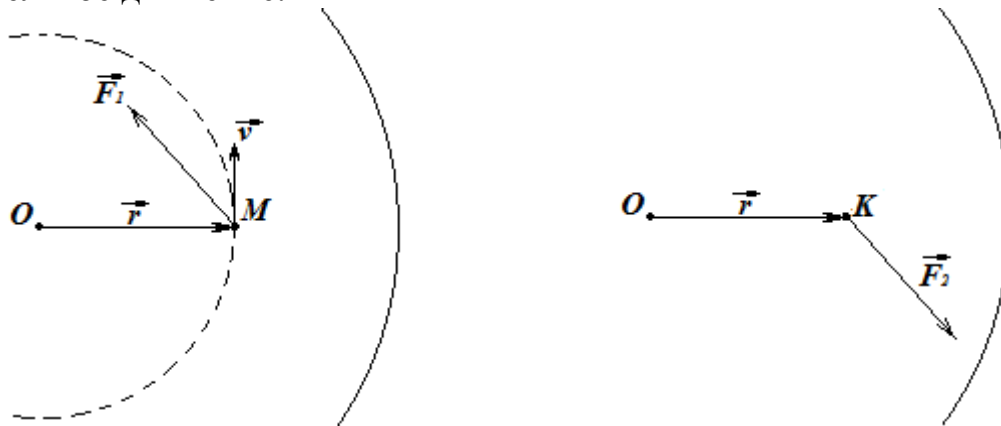
1. формирование целостной картины мира у учащихся;
2. использование понятия момента импульса в квантовой и ядерной физике (первый постулат Бора, спин элементарной частицы, строение многоэлектронных атомов).

Покажем, как можно решить проблему введения понятия момента импульса и закона его сохранения в профильном физико-математическом классе.

Представим цирковой аттракцион «мотоциклист на вращающемся диске» и рассмотрим систему «мотоциклист – диск».

Мотоциклист начинает двигаться по диску по круговой траектории радиуса r . Сила, позволяющая мотоциклисту разогнаться по круговой траектории, - сила трения покоя \vec{F}_1 между ведущим колесом и поверхностью диска. Эта сила сообщает мотоциклисту нормальное и тангенциальное ускорения.

Согласно третьему закону Ньютона на диск действует сила трения покоя $\vec{F}_2 = -\vec{F}_1$. Эта сила создает вращающий момент, приводящий диск во вращательное движение.



Записываем для мотоциклиста второй закон Ньютона, а для диска основной закон динамики вращательного движения:

$$\begin{cases} m\vec{a} = \vec{F}_1 \\ I\vec{\varepsilon} = \vec{M}_2 + \vec{M}_{mp} \end{cases} \quad (1)$$

Учтем, что ускорение – это производная от скорости, а момент силы – векторное произведение радиус-вектора на силу:

$$\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt}; \quad \vec{\varepsilon} = \frac{d\vec{\omega}}{dt}; \quad \vec{M}_2 = \vec{r} \times \vec{F}_2$$

Уравнения (1) принимают вид

$$\begin{cases} m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}_1 \\ I \frac{d\vec{\omega}}{dt} = \vec{r} \times \vec{F}_2 + \vec{M}_{mp} \end{cases}$$

Умножим обе части каждого уравнения на dt и учтем, что изменение скорости находится как разность конечного и начального значений.

$$\begin{cases} m(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) = \vec{F}_1 dt \\ I(\vec{\omega}_2 - \vec{\omega}_1) = (\vec{r} \times \vec{F}_2 + \vec{M}_{mp}) dt \end{cases} \quad (2)$$

Умножим векторно первое уравнение на радиус-вектор \vec{r} и сложим уравнения:

$$\vec{r} \times m(\vec{v}_2 - \vec{v}_1) + I(\vec{\omega}_2 - \vec{\omega}_1) = (\vec{r} \times \vec{F}_1 + \vec{r} \times \vec{F}_2 + \vec{M}_{mp}) dt \quad (3)$$

Силы трения покоя, с которыми взаимодействуют мотоциклист и диск,

равны по модулю и противоположны по направлению $\vec{F}_2 = -\vec{F}_1$. Следовательно, $\vec{r} \times \vec{F}_1 + \vec{r} \times \vec{F}_2 = \vec{r} \times (\vec{F}_1 + \vec{F}_2) = 0$. Уравнение (3) принимает вид

$$(\vec{r} \times m\vec{v}_2 + I\vec{\omega}_2) - (\vec{r} \times m\vec{v}_1 + I\vec{\omega}_1) = \vec{M}_{mp} dt \quad (4)$$

Пусть трение в оси диска отсутствует (трение можно существенно уменьшить, используя подшипники). Тогда выражение (4) принимает вид

$$\begin{aligned} (\vec{r} \times m\vec{v}_2 + I\vec{\omega}_2) - (\vec{r} \times m\vec{v}_1 + I\vec{\omega}_1) &= 0 \\ \vec{r} \times m\vec{v}_2 + I\vec{\omega}_2 &= \vec{r} \times m\vec{v}_1 + I\vec{\omega}_1 \end{aligned} \quad (5)$$

Проанализируем полученный результат.

1. Мы рассмотрели два произвольных момента движения системы «диск – мотоциклист». В процессе движения скорости каждого из тел системы изменяются, однако величина $(\vec{r} \times m\vec{v} + I\vec{\omega})$ остается неизменной в любой момент времени. Эту величину называют полным моментом импульса системы. По существу выражение

$$(\vec{r} \times m\vec{v} + I\vec{\omega}) = const$$

является математической записью закона сохранения момента импульса: *полный момент импульса замкнутой системы тел есть величина постоянная.*

2. Отдельные слагаемые суммы $(\vec{r} \times m\vec{v} + I\vec{\omega})$ носят название момента импульса тела. Момент импульса материальной точки $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$, момент импульса тела с закрепленной осью вращения $\vec{L} = I\vec{\omega}$.

Момент импульса тела – векторная величина – для тела с закрепленной осью вращения момент импульса совпадает по направлению с угловой скоростью и проходит вдоль оси вращения. Направление момента импульса материальной точки определяется по правилу буравчика.

Полный импульс системы равен векторной сумме моментов импульса тел, входящий в систему. Очевидно, количество слагаемых в этой сумме определяется количеством тел в системе.

3. Нетрудно увидеть аналогию между понятиями импульса и момента импульса тела.

Импульс тела $\vec{p} = m\vec{v}$ – количество поступательного движения по Ньютону – это произведение массы m , меры инертности тела, на скорость \vec{v} . Момент импульса тела с закрепленной осью $\vec{L} = I\vec{\omega}$ имеет ту же структуру – произведение меры инертности тела на скорость. Выражение для расчета момента импульса материальной точки путем математических преобразований тоже сводится к произведению момента инерции точки на угловую скорость

$$\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v} = \vec{r} \times m(\vec{\omega} \times \vec{r}) = m(\vec{\omega} \cdot (\vec{r} \cdot \vec{r}) - \vec{r} \cdot (\vec{r} \cdot \vec{\omega})) = mr^2 \cdot \vec{\omega}$$

В связи с этим момент импульса можно назвать *количеством вращательного движения.*

Сама рассмотренная ситуация – аналог реактивного движения. Если часть покоящейся системы приходит в поступательное движение в одном направлении, оставшаяся часть получает импульс в противоположном направлении. Аналогично, если в покоящейся системе тел какое-то тело

приходит во вращательное движение, обязательно должно появиться вращение в противоположном направлении.

4. Из выражения (4) видно, что изменить полный момент импульса системы могут только внешние силы. Действие внутренних сил приводит лишь к перераспределению момента импульса между телами, входящими в систему.

Дальнейшее развитие понятия момента импульса и закона его сохранения можно осуществить при качественном рассмотрении следующих ситуаций:

1. устойчивость вращения гироскопа при отсутствии момента внешних сил;

2. устойчивость движущегося велосипеда по сравнению с покоящимся велосипедом;

3. неизменность плоскости орбиты планеты, вращающейся вокруг Солнца;

4. объяснение второго закона Кеплера и, как следствие, изменение скорости планеты или КА при движении по эллиптической орбите;

5. вращение фигуриста, прыгуна в воду, акробата (как выполнить сальто или винтовое вращение);

6. проседание кузова автомобиля при резком торможении или старте.

Полезно решить расчетные задачи с применением закона сохранения момента импульса: маневрирование КА на орбите, баллистический маятник (пуля попадает в закрепленный за один конец стержень и т.п.), пуля попадает в покоящийся шар, цилиндр. Все рассматриваемые качественные и расчетные задачи должны проиллюстрировать область применения закона сохранения момента импульса – вращательное движение в системе тел.

Предлагаемый дедуктивный подход к введению понятия момента импульса и его сохранения обладает рядом преимуществ: он экономичен во времени, на первом этапе знакомства с физической величиной обнаруживается ее важнейшее свойство – способность сохраняться в замкнутых системах.

Список литературы

1. Программы для общеобразовательных учреждений. Физика. Астрономия. 7 – 11 кл. / сост. В.А. Коровин, В.А. Орлов. – 3-е изд., стереотип. – М.: Дрофа, 2010. – 334, [2] с.

ISBN 987-5-358-07507-8

2. Физика. 10 класс: учеб. для общеобразоват. учреждений и шк. с углубл. Изучением физики: профил. уровень / [О.Ф. Кабардин, В.А. Орлов, Э.Е. Эвенчик и др.]; под ред. А.А. Пинского, О.Ф. Кабардина; Рос. акад. наук, Рос. акад. образования, изд-во «Просвещение». – 13-е изд.- М.: Просвещение, 2011.- 431 с.: ил. – (Академический школьный учебник). – ISBN 987-5-09-025616-2

3. Мякишев, Г.Я. Физика. 10 класс: учеб. для общеобразоват. учреждений: базовый и профил. уровни / Г.Я. Мякишев, Б.Б. Буховцев, Н.Н. Сотский; под ред. В.И. Николаева, Н.А. Парфентьевой. – 19-е изд. – М.: Просвещение, 2010. – 366 с.: ил. – (Классический курс). – ISBN 987-5-09-022776-6

4. Козел, С.М. Физика. 10-11 классы: пособие для учащихся и абитуриентов. В 2 ч. Ч. 1. / С.М. Козел. – М.: Мнемозина, 2010. – 287 с.: ил. – ISBN 987-5-346-011629-8

НИРС КАК СРЕДСТВО РЕАЛИЗАЦИИ КОМПЕТЕНЦИЙ НА ПРИМЕРЕ БАКАЛАВРИАТА ПРОФИЛЯ ИДМБ

**Стрекаловская А.Д., Каныгина О.Н., Ретенер Н.С., Шишкин В.В.,
Сагындыкова А.К.**

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

В настоящее время выпускники бакалавриата по направлению подготовки 12.03.04 «Биотехнические системы и технологии», профиль «Инженерное дело в медико-биологической практике», очень востребованы в стране и в регионе. Подготовка бакалавров ведется в соответствии с потребностями предприятий регионов. Выпускники работают в организациях: ООО «Элинс», ОАО ОПТФ «Медтехника», ООО «МДС», ФГБУ «МНТК «Микрохирургия глаза» им. акад. С.Н. Федорова» Минздрава России, ГБУЗ «ОКОД», ГБУЗ «ООКБ № 1», ГАУЗ «ООКБ № 2», ФГУП «ОПОП» и в других ЛПУ г. Оренбурга и Оренбургской области.

Выпускники по данному направлению востребованы также в регионах Башкортостана и Казахстана. В приказе Минпромторга России от 31.01.2013 № 118 «Об утверждении Стратегии развития медицинской промышленности Российской Федерации на период до 2020 года» указано, что в вопросах послепродажного сопровождения ощущается недостаток квалифицированного персонала, в первую очередь, технических специалистов, способных осуществлять обслуживание и ремонт оборудования. Недостаточная обеспеченность квалифицированным персоналом обуславливается тем, что система профессионального образования в настоящее время не предлагает рынку достаточное количество специалистов, знакомых с современными медицинскими изделиями и методами их применения.

Область профессиональной деятельности наших бакалавров связана с техническими системами и технологиями, в структуру которых включены любые живые системы; с контролем и управлением состояния живых систем, обеспечением их жизнедеятельности. В связи с этим объектами профессиональной деятельности выпускников программ бакалавриата являются: приборы, системы и комплексы медико-биологического и экологического назначения; а также биотехнические системы и технологии для здравоохранения.

Вышесказанное подчеркивает ответственность, с которой должен осуществляться образовательный процесс и важность формирования у студентов высокого профессионализма уже в начале трудовой деятельности.

На наш взгляд, этому должен способствовать правильный компетентностный подход к выработке знаний, умений и способности применять их в конкретной, сегодняшней действительности[1,2]. За 4 года должен сформироваться бакалавр, компетентный в сфере своей будущей деятельности, поэтому к формированию комплекса важнейших компетенций необходимо, активно подходить при чтении первых же специальных дисциплин. К таким относятся «Биохимия»[3] и «Физическое

материаловедение»[4], изучаемые студентами в 3-м семестре.

Первая раскрывает законы жизнедеятельности организмов на молекулярном уровне, установление причинно-следственных связей происходящих в организме процессов. Студенты получают знания о биохимических процессах, происходящих в организме человека.

Вторая - знакомит студента с возможностями применения в медицине современных материалов, их структурой и функциональными характеристиками.

В результате будущий бакалавр должен получить объективное «3D» представление о взаимодействии человеческого организма с современными медицинскими приборами, устройствами и основными приемами лечения в результате получения следующих, на наш взгляд, основополагающих компетенций (таблица)[5]:

Таблица - Перечень компетенций, формируемых у студентов при изучении специальных дисциплин «Биохимия» и «Физическое материаловедение»

Компетенции	Значение компетенций
ПК-2	Готовность к участию в проведении медико-биологических, экологических и научно-технических исследований с применением технических средств, информационных технологий и методов обработки результатов
ПК-3	Готовность формировать презентации, научно-технические отчеты по результатам выполненной работы, оформлять результаты исследований в виде статей и докладов на научно-технических конференциях
ОПК-1	Способность представлять адекватную современному уровню знаний научную картину мира на основе знания основных положений, законов и методов естественных наук и математики
ОПК-2	Способность выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат
ОК-1	Способность использовать основы философских знаний для формирования мировоззренческой позиции
ОК-6	Способность работать в команде, толерантно воспринимая социальные и культурные различия
ОК-7	Способность к самоорганизации и самообразованию

Известно, что одним из наиболее эффективных методов повышения качества образования является интерактивное обучение, использование обратной связи и активизация творческой активности студентов. Опыт показывает, что лучше всего результаты получаются в последнем случае – при

работе студентов над презентациями или портфолио по их выбранной теме, т.е. при выполнении научной работы (НИРС).

Выбор темы НИРС имеет важное значение, поскольку тема должна не только лежать в русле дисциплины, но и давать возможность самим студентам участвовать в ее развитии, рекламе научных достижений и включать элементы просветительской деятельности для своих сокурсников.

В качестве положительного опыта можно привести результаты такой работы, выполненной студентами группы 13ИДМБ(ба). Тема НИРС «Биокожа: состав, свойства, применение» была предложена самими студентами. Студенты хотели показать однокурсникам возможности и престижность научной деятельности ученых в ОГУ, познакомить их с реальными научными технологиями и самим научным центром, его сотрудниками и авторами изобретения. Коллектив авторов (3 человека) ознакомился с научными технологиями «выращивания биокожи» в центре ее производства, получил массу полезной информации от работников центра, а также образцы биокожи, провел с ними ряд простых экспериментов, сделал очень интересное сообщение, красивую презентацию, с которой выступит на будущей студенческой конференции.

Основное содержание НИРС «Биокожа: состав, свойства, применение» включает в себя:

- знакомство с авторами изобретения, преподавателями ОГУ (авторы: Летута С.Н., Бердинский В.Л., Рахматуллин Р.Р., Бурлуцкая О.И., Бурцева Т.И.);

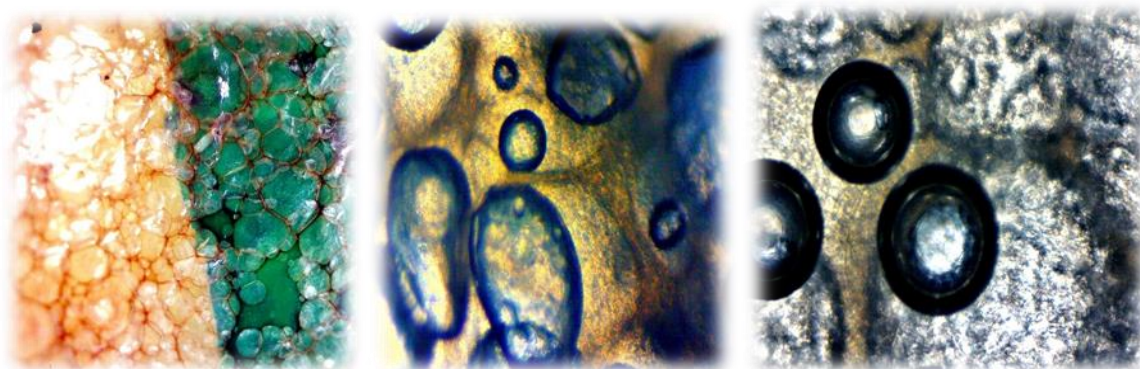
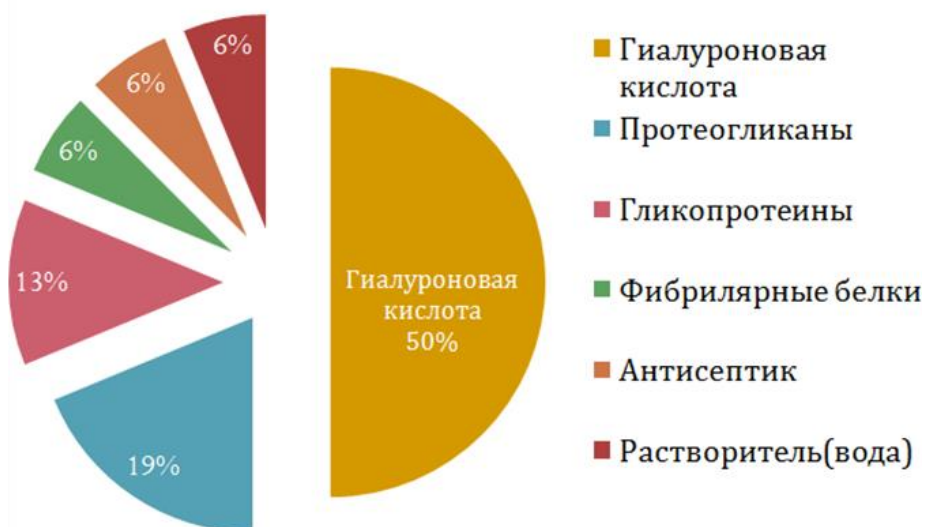
- понятием об авторских правах (правообладатель: Федеральное бюджетное государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Оренбургский государственный университет");

- мезоструктурой структуры биокожи (основу биопластического материала «Гиаматрикс» - гистозэквивалент биопластического материала - составляет макромолекулярный нанокоркас, имеющий ячеистое строение, с размерами ячеек 50-100нм);

- физическими свойствами (Физические свойства, заявленные производителем: эластичность, достаточная механическая прочность, высокие дренажные качества, биосовместимость, прозрачность, высокая адгезия и долгий срок хранения - до 5 лет);

- его составом:

Состав



Примеры взаимодействия с раствором красителя «Бриллиантовый зеленый» ($C_{27}H_{34}N_2O_4S$) – мгновенный дренаж лекарственного средства сквозь «биокожу» (а); с водой (б) и щавелевой кислотой (в) – отсутствие смачивания

К главным результатам данной НИРС можно отнести следующие:

1. Исполнители НИРС осознали ответственность и сложность будущей профессии и начинают работать над определением темы будущей ВКР;
2. Студенты нашли свое место в работе научного центра «Наносинтез»; у них возник серьезный интерес к науке.
3. Авторы работы «заразили» своей деятельностью других студентов: возникли микроколлективы из 2-3 человек, дружно работающие над одной темой НИРС с перспективой участия в будущей научной студенческой конференции.

Список литературы

1. Вербицкий А. А. Компетентный подход и теория контекстного обучения: Материалы к четвертому заседанию методологического семинара 16 ноября 2004 г. — М.: Исследовательский центр проблем качества подготовки специалиста. 2004. 84 с.
2. Налиткина, О. В. Компетентный подход как основа новой парадигмы образования // Известия РГПУ им. А. И. Герцена. -2009.- № 94. —

Режим доступа: <http://cyberleninka.ru/article/n/kompetentnostnyu-podhod-kak-osnova-novoy-paradigmy-obrazovaniya>. - 15.12.2014.

3. Хуторской, А.В. Технология проектирования ключевых и предметных компетенций // Интернет-журнал "Эйдос". - 2005. - 12 декабря. – Режим доступа: <http://www.eidos.ru/journal/2005/1212.htm>.

4. Стрекаловская, А.Д. Рабочая программа по дисциплине «Биохимия», ФБГОУ, 2011, Физфак, 23 с.

5. Каныгина, О.Н. Рабочая программа по дисциплине «Физическое материаловедение», ФБГОУ, 2012, Физфак, 14 с.

6. Федеральный государственный образовательный стандарт высшего профессионального образования по направлению подготовки 105 б – Биотехнические системы и технологии – Москва, 2009г., 31 с.

ФОРМИРОВАНИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ В ОБЛАСТИ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК У СТУДЕНТОВ, ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО СПЕЦИАЛИЗАЦИИ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ», ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

**Четверикова А.Г., Узенбаев В.Г., Осипова Е.А., Дюсенов А.И.
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург**

В курсе общей физики предусмотрены классические методы изучения фундаментального предмета: лекции, практические занятия по решению задач и лабораторные занятия.

На всех видах занятий обучающиеся начинают развивать общепрофессиональные компетенции, например, способность использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности (ОПК-3). [1]

Характерной особенностью физики и химии как учебных предметов является такое изучение явлений, при котором познание качественных сторон обязательно сочетается с определениями количественных соотношений, характеризующих данное явление. Таким образом, если привлечь студентов к решению конкретной экспериментальной задачи, то в этом случае изучение того или иного физического явления или закона приобретает для них особую профессиональную значимость, вызывая повышенный интерес к предметам. Важным достоинством экспериментальных задач является непосредственная связь с реальными событиями.

Одной из задач обучения является формирование стиля научного мышления студентов, структурирование физического знания и обработки этих отдельных структур. В число структур как составной элемент входит и научный факт. Основной задачей химии и физики как экспериментальных наук является самостоятельное открытие такого научного факта.

Учебно-исследовательская работа учит студентов раскрывать суть явлений, выделять главное, позволяет вырабатывать навыки системного подхода к изучаемому материалу, творчески подходить к его разработке и интерпретации.

На наш взгляд, в настоящее время сложились условия, которые позволяют формировать у студентов современные исследовательские компетенции на междисциплинарном уровне, например, при изучении физико-химических явлений.

Использование интернет-ресурсов в процессе обучения позволяет получить многопрофильную информацию, наглядные иллюстрации по многим природным явлениям, а также, инструкции или описания экспериментов по исследованию соответствующих явлений. Студенты, обработав эту информацию, формируют свои исследовательские цели и задачи, создают экспериментальные методы и установки, приходят к научным выводам и подготавливают свои первые серьезные публикации. Следовательно, на базовом уровне начинают реализовываться и профессиональные компетенции:

способность применять основные естественнонаучные законы при обсуждении полученных результатов (ПК-4), готовность представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций (стендовых докладов, рефератов и статей в периодической научной печати) (ПК-7). [1]

Например, перед студентом 1-го курса, обучающимся по специальности «Фундаментальная и прикладная химия» была поставлена цель подобрать материал по колебательным процессам (раздел курса общей физики), проявляющимся в химических процессах (курс неорганической химии), т.е. сочетание химического эксперимента, методов физической регистрации. В результате сформировались компетентностно-ориентированные задачи общепрофессионального цикла:

- систематизация материала по автокаталитическим реакциям;
- воспроизведение приведенного в литературе эксперимента в лабораторных условиях;
- экспериментальное исследование автокаталитических колебательных реакций на примере реакции Белоусова-Жаботинского.

Актуальность научно-исследовательской работы студента химико-биологического факультета А. Дюсенова заключается в том, что к настоящему времени реакция Белоусова-Жаботинского занимает достойное место в мировой науке, особенно в ее новой перспективной области – синергетике. Экспериментальные работы в данном направлении инициировали развитие современной теории динамических систем. Под динамической системой понимают любой объект или процесс, для которого однозначно определено состояние как совокупность некоторых величин в данный момент времени и задан закон, описывающий его эволюцию.

Важную группу динамических систем представляют системы, в которых возможны колебания. Колебательные системы с точки зрения их математических моделей разделяют на определенные классы. Различают линейные и нелинейные колебательные системы, сосредоточенные и распределенные, консервативные и диссипативные, автономные и неавтономные. Особый класс представляют так называемые автоколебательные системы. Основные свойства указанных систем подробно обсуждаются в работах по теории колебаний.

Колебательная система называется *линейной* или *нелинейной* в зависимости от того, линейна или нелинейна описывающая ее система дифференциальных уравнений. Линейные системы являются частным случаем нелинейных. Однако в силу принципиальной важности линейных систем при исследовании вопросов устойчивости колебаний, а также возможности использования принципа суперпозиции решений такая классификация оправданна. Динамические системы с изменяющимся во времени запасом энергии называются *неконсервативными*. Большинство реальных колебательных систем в физике, радиофизике, биологии, химии и других областях знаний неконсервативны. Среди них выделяется особый класс *автоколебательных* систем, которые принципиально неконсервативны и нелинейны. Автоколебательной называют динамическую систему,

преобразующую энергию источника в энергию незатухающих колебаний, причем основные характеристики колебаний (амплитуда, частота, форма колебаний и т.д.) определяются параметрами системы и в определенных пределах не зависят от выбора исходного начального состояния.

Автокатализом называется ускорение реакции, обусловленное накоплением конечного или промежуточного продукта, обладающего каталитическим действием в данной реакции. Скорость автокаталитической реакции вначале возрастает вследствие увеличения количества продукта, являющегося катализатором, а затем падает в результате расходования исходных веществ.

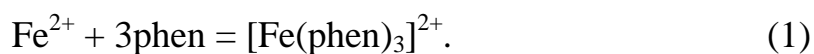
Б.П. Белоусов проводил исследования цикла Кребса, пытаясь найти его неорганический аналог. В результате одного из экспериментов в 1951 году, а именно окисления лимонной кислоты броматом калия в кислотной среде в присутствии катализатора — ионов церия Ce^{3+} , он обнаружил автоколебания. Течение реакции менялось со временем, что проявлялось периодическим изменением цвета раствора от бесцветного (Ce^{3+}) к желтому (Ce^{4+}) и обратно. Эффект был ещё более заметен в присутствии рН индикатора - ферроина. [2]

Белоусов провел достаточно подробное исследование этой реакции и выяснил, что период колебаний (10–100 с) существенно уменьшается с повышением кислотности среды и температуры, поэтому реакция оказалась наглядной и удобной для лабораторных исследований. До этого открытия считалось, что автоколебания в химических системах невозможны. Спустя некоторое время изучением механизма реакции Белоусова занимался другой ученый А.М. Жаботинский. Особенностью работ Жаботинского и его коллег было сравнение экспериментальных записей колебаний с кривыми, которые получались при компьютерном моделировании. Группа Жаботинского провела подробные исследования реакции, включая её различные варианты.

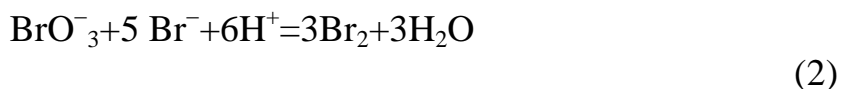
Белоусов использовал лимонную кислоту, а в качестве пары окислитель–восстановитель – производные церия. Ученик и сотрудник Белоусова А.П. Сафронов посоветовал добавить в раствор комплекс железа с фенантролином. В этой ситуации окраска эффектно изменялась: с лилово-красной – в ярко-синюю. Жаботинским, который занялся подробным изучением механизма реакции, было окончательно показано, что автоколебательная реакция может осуществляться и в том случае, когда лимонная кислота заменена любой другой дикарбоновой кислотой с активной метиленовой группировкой, а каталитическая редокс-пара $\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$ заменена парой $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{2+}$ или, как уже использовалось Белоусовым, парой ферроин/ферриин. Наиболее изящно, эстетически зрелищно выглядела колба, если использовали малоновую кислоту, а вместо ионов церия ионы железа Fe^{2+} . Тогда раствор в колбе может часами со строгой периодичностью изменять цвет во всем видимом диапазоне от рубиново-красного до небесно-голубого. Брутто-формула реакции выглядит достаточно просто, однако реакция протекает более чем в 20 стадий и соответственно с образованием такого же количества промежуточных продуктов.

Рассмотрим БЖ-реакцию (реакцию Белоусова-Жаботинского),

приведенную в самой цитируемой в данной области знаний статье [3]. Для того чтобы ее осуществить, готовят два раствора – А и Б. А – раствор ферроина (комплекс двухвалентного железа с о-фенантролином (phen) – $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{2+}$), который может быть приготовлен заранее:



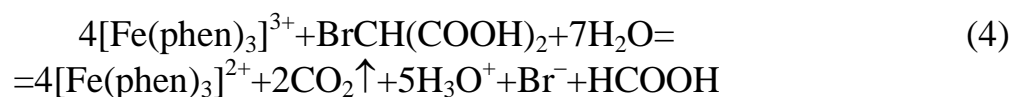
Неустойчивая броммалоновая кислота (раствор Б) готовится непосредственно перед началом эксперимента:



Для непосредственной демонстрации опыта в чашку Петри последовательно вносят с помощью пипеток насыщенный раствор бромата калия, раствор броммалоновой кислоты и раствор ферроина. В течение нескольких минут на красном фоне в чашке появляются голубые участки. Это обусловлено образованием другого комплекса ферроина $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{3+}$ при окислительно-восстановительной реакции комплекса ферроина $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{2+}$ с бромат-ионами:



Этот процесс протекает с автоускорением. Затем образующийся комплекс $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{3+}$ окисляет броммалоновую кислоту с образованием бромид-ионов:



Выделяющиеся бромид-ионы являются ингибиторами реакции окисления комплекса железа²⁺ бромат-ионами (3). Только когда концентрация $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{2+}$ становится достаточно высокой, ингибирующее действие бромид-ионов преодолевается, и снова начинают протекать реакции получения броммалоновой кислоты и окисления комплекса. Процесс повторяется снова, и это отражается в окраске раствора. От голубых участков в чашке во все стороны расходятся концентрические круговые красно-голубые «волны» окраски. Полный список элементарных стадий реакции очень сложен и составляет почти сотню реакций с десятками веществ и интермедиатов. До сих пор подробный механизм неизвестен, особенно константы скоростей реакций.

Если содержимое чашки перемешать стеклянной палочкой, то раствор на непродолжительное время станет одноцветным, а потом периодический процесс повторится. В конце концов реакция прекращается из-за выделения диоксида углерода.

Для проведения научного эксперимента в лабораториях ОГУ студенту

понадобились:

- яблочная кислота $C_4H_6O_5$, т.к. образующаяся в реакции (2) броммалоновая кислота $6BrCH(COOH)_2$ весьма нестабильна,
- серная концентрированная кислота H_2SO_4 ,
- ферроин (редокс-индикатор),
- бромат калия $KBrO_3$,
- химический стакан и часовое стекло.

На первом этапе навеска яблочной кислоты массой 40 г растворяется в 160 мл дистиллированной воды. Отдельно подготавливаются навески ферроина и бромата калия массами 3,5 г и 16 г соответственно.

На втором этапе, к раствору яблочной кислоты, предварительно нагретому до 40...50 °С, добавляется навеска бромата калия. На 3-ем этапе, поставив стакан с полученным соединением на белый лист бумаги, в него добавляем в навеску ферроина и несколько капель серной кислоты.

На фоне белого листа бумаги сразу же наблюдается изменение окраски раствора с красной на синюю и обратно с периодом $T=30...40$ с (рис. 1).



Рисунок 1 – Окрашивание раствора в исходный момент (а), через $T/4$ (б) и $T/2$ (в)

По истечении 8 минут колебания затухают, и изменение окраски раствора прекращается, свидетельствуя об установлении химического равновесия в системе между исходными веществами и продуктами реакции.

Отметим основные моменты, без которых описанный колебательный процесс был бы невозможен.

Во-первых, кооперативное поведение молекул в растворе невозможно без обратной связи. Если описывать колебательные химические реакции в терминах «хищник–жертва», то роль «хищников» выполняют промежуточные продукты, которые замедляют или совсем блокируют отдельные стадии процесса, – ингибиторы. Роль «жертв» выполняют катализаторы, которые ускоряют ход реакции. Хотя, как известно, сами молекулы катализатора (Fe) не расходуются в реакции, но соотношение концентраций ионов $[Fe^{2+}]/[Fe^{3+}]$, как показали исследования, претерпевает сложную эволюцию. Эта упрощенная схема позволяет в общих чертах представить молекулярный механизм обратной связи в растворе.

Во-вторых, колебательный процесс невозможен без источника энергии, В реакции Белоусова–Жаботинского источником энергии служит органическая малоновая кислота. Действительно, при ее полном окислении колебания в реакции затухают, а затем и сама реакция прекращается. В настоящее время

кинетика колебательных реакций – бурно развивающаяся отрасль знаний, возникшая на стыке химии, биологии, медицины, физики, математики.

Затруднения, с которыми столкнулись студенты при первых попытках реализации БЖ-реакции, были подбор доступных реагентов, обуславливающих малый коэффициент затухания и удовлетворительную наглядность. После преодоления проблем, сделаны выводы, что физическая (неудачно подобранная температура) и химическая (низкая концентрация) причины не обеспечивают стабильное протекание реакции в течение длительного времени. Студенты ставили и решали проблемные для себя теоретические, экспериментальные, организационные, аналитические задачи на каждом этапе своей работы. Как результат, работа получила свое развитие.

Освоив электромагнетизм и оптику (разделы общей физики) и методы анализа веществ (аналитическая химия) студенты поставили очередную задачу: устранить вышеописанные недостатки и проверить влияние физических полей на скорость и устойчивость протекания БЖ-реакции.

Список литературы

1. Проект приказа «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (уровень специалитета)». Режим доступа: http://www.osu.ru/docs/fgos/proekt/spec_04.05.01.doc

2. Прилепская, Л.Л. К 60-летию открытия колебательных реакций / Л.Л. Прилепская, Е.Ю. Старикова // Вестник Кузбасского государственного технического университета. Химические технологии. – 2012. - №1(89). – С.111-113.

3. Белоусов, Б.П. Периодически действующая реакция и ее механизм / Б.П. Белоусов // Сб. науч. тр. Автоволновые процессы в системах. – Горький: Изд-во ГГУ, 1981. – С. 176-186.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФРЕНКЕЛЕВСКИХ ЭКСИТОНОВ ПЛЕНКИ J-АГРЕГАТОВ С ПОВЕРХНОСТНЫМИ ПЛАЗМОНАМИ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКИ

Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г., Курмангалеев К.С.
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Одним из интенсивно развивающихся в последние годы направлений нанофотоники и наноплазмоники является разработка органических и полупроводниковых светоизлучающих устройств [1,2]. Актуальность прикладных и фундаментальных исследований в этой области определяется потребностью в эффективных, сравнительно дешевых и обладающих большим сроком эксплуатации источниках света. Наиболее перспективными материалами для создания таких источников являются гетероструктуры на основе слоев или наночастиц благородных металлов, покрытых слоем органического люминофора в J – агрегатном состоянии.

В работах [1,3] рассмотрены оптические свойства двухслойных наночастиц с золотым или серебряным ядром и оболочкой из J – агрегатов. Наблюдаемые особенности в спектрах поглощения растворов указанных нанобъектов авторы объясняют в рамках модели, основанной на расчетах поляризуемости двухслойной наночастицы, в которых учитывается размерный эффект для диэлектрической функции металлического ядра. Однако, как указывается в [4], отсутствие диэлектрической прослойки между металлическим ядром и J-агрегатной оболочкой делает невозможной люминесценцию таких нанобъектов, из-за сильного тушения френкелевских экситонов J – оболочки металлическим ядром. Авторами [4] разработан экситон-плазмонный наноизлучатель на основе трехслойной наночастицы. Данный излучатель обладает высоким квантовым выходом люминесценции и регулируемым спектром излучения в видимом диапазоне. Принцип работы излучателя основан на взаимодействии плазмонов металлического ядра с оболочкой J – агрегатов, которое приводит к рождению экситонов Френкеля с последующим излучением фотона.

В данной работе теоретически исследована плоско-слоистая наноструктура, состоящая из металлической подложки, диэлектрической прослойки и пленки J – агрегатов цианиновых красителей, которая предполагалась составленной из линейных периодических цепочек [5]. Геометрия рассматриваемой системы представлена на рисунке 1. В рамках квантовомеханической теории возмущений проведены расчеты

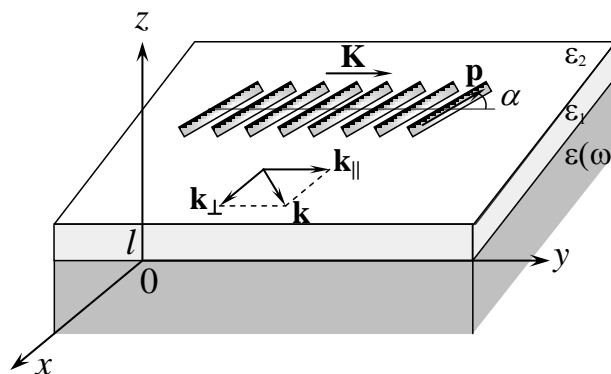


Рис. 1. Геометрия плоско-слоистой структуры

скорости передачи энергии от поверхностных плазмонов, возбуждаемых в подложке, например, электронами, к J – агрегатам. Показано, что при определенных параметрах системы время жизни френкелевского экситона по отношению к излучению фотона становится меньше времени тушения экситонного состояния металлом. Это обстоятельство делает перспективным использование таких слоистых структур в светоизлучающих устройствах нового поколения.

В результате взаимодействия поля поверхностных плазмонов с электронами J – агрегата в последнем возникают экситонные состояния, характеризующиеся волновым вектором \mathbf{K} . Согласно золотому правилу Ферми скорость передачи энергии от подложки к J – агрегату равна

$$U(\mathbf{K}) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}} \left| \langle \Psi(\mathbf{K}) | n_{\mathbf{k}} | \hat{V}_{ex-pl} | n_{\mathbf{k}} + 1 | \Psi_0 \rangle \right|^2 \delta(\Omega(K) - \omega_s(k)). \quad (1)$$

Здесь $\hat{V}_{ex-pl} = -e \sum_i V(\mathbf{r}_i)$ – оператор экситон-плазмонного

взаимодействия; $V(\mathbf{r}_i)$ – потенциал плазмонного поля, в точке, где находится i – ый электрон цепочки молекул; Ψ_0 и $\Psi(\mathbf{K})$ – волновые функции основного и возбужденного состояний J – агрегата; $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ и $|n_{\mathbf{k}} + 1\rangle$ – волновые функции состояний с n и $n + 1$ плазмонами с волновым вектором \mathbf{k} ; $\Omega(K)$ – частота экситонного перехода; $\omega_s(k)$ – частота одномерного поверхностного плазмона, K и k – волновые числа экситона и плазмона.

Основное состояние линейной цепочки из N молекул представимо в виде произведения волновых функций отдельных молекул [6,7]

$$\Psi_0 = \varphi_{0\mathbf{R}_1}(\xi_1) \varphi_{0\mathbf{R}_2}(\xi_2) \cdots \varphi_{0\mathbf{R}_N}(\xi_N), \quad (2)$$

где $\varphi_{0\mathbf{R}_i}(\xi_i)$ – волновая функция основного состояния молекулы, расположенной в точке с радиус-вектором \mathbf{R}_i , направленным вдоль оси цепочки, ξ_i – совокупность координат, соответствующих внутренним степеням свободы молекулы.

Если одна из молекул цепочки переходит в возбужденное состояние, то волновая функция записывается в виде [6,7]

$$\Psi(\mathbf{K}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_j} \varphi_{0\mathbf{R}_1}(\xi_1) \varphi_{0\mathbf{R}_2}(\xi_2) \cdots \varphi_{1\mathbf{R}_j}(\xi_j) \cdots \varphi_{0\mathbf{R}_N}(\xi_N), \quad (3)$$

где $\varphi_{1\mathbf{R}_j}(\xi_j)$ – волновая функция первого возбужденного синглетного состояния молекулы, расположенной в точке \mathbf{R}_j . Строго говоря, необходимо брать антисимметризованные по всем электронам произведения волновых

функций отдельных молекул. Эта антисимметризация приводит к появлению энергетических членов, содержащих интегралы перекрытия волновых функций соседних молекул. Однако, в молекулярных кристаллах эти члены малы, и потому не учитываются [7].

В квазистатическом приближении потенциал поля поверхностных плазмонов плоско-слоистой структуры удовлетворяет уравнению Лапласа во всем пространстве, кроме поверхностей раздела [8]. В рамках формализма вторичного квантования можно показать, что в области расположения J – агрегатов (область $z > l$ на рисунке 1) потенциал плазмонного поля имеет вид

$$V(\mathbf{r}, z) = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \sqrt{\frac{8\pi\hbar}{\omega_{pl}^2 S}} \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{\omega_s^3(k)}{k}} \left(1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} e^{-2kl} \right)^{-1} (a_{\mathbf{k}} + a_{-\mathbf{k}}^+) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-kz}, \quad (4)$$

где ε_1 – диэлектрическая проницаемость прослойки, ε_2 – диэлектрическая проницаемость области, в которой расположены J – агрегаты, ω_{pl} – плазменная частота металла, S – площадь поверхности соприкасающихся слоев, \mathbf{r} – радиус-вектор, параллельный поверхности раздела слоев, z – расстояние до поверхности металла, l – толщина диэлектрической прослойки, k – волновое число поверхностного плазмона, $a_{-\mathbf{k}}^+$ и $a_{\mathbf{k}}$ – операторы рождения и уничтожения плазмона.

Частоту поверхностного плазмона $\omega_s(k)$ можно получить из условий непрерывности потенциала и нормальных составляющих вектора электрической индукции на поверхностях раздела слоев. Использование для диэлектрической проницаемости металла выражения $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \omega_{pl}^2 / \omega^2$, даваемого обобщенной теорией Друде-Лоренца [9], приводит к следующему закону дисперсии поверхностных плазмонов в слоистой структуре

$$\omega_s^2(k) = \omega_{pl}^2 \left(\varepsilon_\infty - \frac{\varepsilon_1^2 (e^{-2kl} - 1) - \varepsilon_1 \varepsilon_2 (e^{-2kl} + 1)}{\varepsilon_1 (e^{-2kl} + 1) - \varepsilon_2 (e^{-2kl} - 1)} \right)^{-1}, \quad (5)$$

где ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость металлической подложки. В предельных случаях $l \rightarrow 0$ и $l \rightarrow \infty$ частота (5) стремится к частоте поверхностного плазмона на границе «металл – диэлектрик» $\omega_s = \omega_{pl} / \sqrt{\varepsilon_\infty + \varepsilon_1(2)}$ [9].

Поскольку поле плазмонов слабо изменяется на протяжении элементарной ячейки J – агрегата, в операторе экситон-плазмонного взаимодействия можно использовать разложение потенциала в ряд в окрестности узла \mathbf{R}_l , в котором достаточно ограничиться дипольным слагаемым. В этом случае, используя выражения (2) и (3) для волновых функций основного и возбужденного состояний J – агрегата, для матричного

элемента, входящего в формулу (1) можно получить

$$V_{fi} = \langle \Psi(\mathbf{K}) | n_{\mathbf{k}} | \hat{V}_{ex-pl} | n_{\mathbf{k}} + 1 | \Psi_0 \rangle = -\frac{e}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_j} \times \\ \times \int \varphi_{0\mathbf{R}_1}^*(\xi_1) \varphi_{0\mathbf{R}_2}^*(\xi_2) \dots \varphi_{1\mathbf{R}_j}^*(\xi_j) \dots \varphi_{0\mathbf{R}_N}^*(\xi_N) \sum_{l,i} \nabla W(\mathbf{R}_l) \cdot \mathbf{x}_{li} \times \quad (6) \\ \times \varphi_{0\mathbf{R}_1}(\xi_1) \varphi_{0\mathbf{R}_2}(\xi_2) \dots \varphi_{0\mathbf{R}_N}(\xi_N) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_N,$$

где \mathbf{x}_{li} – радиус-вектор i -ого электрона молекулы, проведенный из центра узла \mathbf{R}_l , $W(\mathbf{R}_l) = \langle n_{\mathbf{k}} | V | n_{\mathbf{k}} + 1 \rangle$ – матричный элемент оператора потенциала плазмонного поля в этом узле.

Выполнив интегрирование в (6), положив $n_{\mathbf{k}} \approx 0$, введя дипольный момент перехода молекулы $\mathbf{p}_{10} = -e \int \varphi_{1\mathbf{R}}^*(\xi) \sum_i \mathbf{x}_i \varphi_{0\mathbf{R}}(\xi) d\xi$ и подставив градиент потенциала плазмонного поля, для матричного элемента получим

$$V_{fi} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \sqrt{\frac{8\pi\hbar\omega_s^3(k)}{\omega_{pl}^2 S k}} \left(1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} e^{-2kl} \right)^{-1} \sum_j e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{k})\mathbf{R}_j} \mathbf{p}_{10} \cdot (i\mathbf{k} - \mathbf{e}_z k) e^{-kz} \quad (7)$$

Разложим волновой вектор \mathbf{k} плазмона на две составляющие, как показано на рисунке 1. Тогда суммирование по узлам цепочки дает [6]

$$\sum_j e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{k})\mathbf{R}_j} = \sum_j e^{-i(\mathbf{K}-\mathbf{k}_{\parallel}-\mathbf{k}_{\perp})\mathbf{R}_j} = N\delta_{\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{K}},$$

т.е. параллельная оси цепочки составляющая волнового вектора плазмона должна быть равна волновому вектору экситона. Если дипольный момент перехода молекулы расположен в плоскости, параллельной поверхности раздела фаз (рис. 1), то скалярное произведение в (7) равно

$$\mathbf{p}_{10} \cdot (i\mathbf{k} - \mathbf{e}_z k) = i|\mathbf{p}_{10}|(K \cos \alpha + k_{\perp} \sin \alpha).$$

Окончательно для матричного элемента находим

$$V_{fi} = \frac{i\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \sqrt{\frac{8\pi\hbar N \omega_s^3(k)}{\omega_{pl}^2 S \sqrt{k}}} \left(1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} e^{-2kl} \right)^{-1} |\mathbf{p}_{10}| (K \cos \alpha + k_{\perp} \sin \alpha) e^{-kz} \delta_{\mathbf{k}_{\parallel},\mathbf{K}} \quad (8)$$

$$\text{где } k = \sqrt{K^2 + k_{\perp}^2}.$$

Наличие символа Кронекера в (8), выражающего закон сохранения импульса, приводит к тому, что в (1) остается только суммирование по k_{\perp} .

Заменяя его интегрированием, приходим к следующему выражению для скорости передачи энергии

$$U(K) = \frac{8\pi|\mathbf{p}_{10}|^2}{\hbar\omega_{pl}^2 d} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2z\sqrt{K^2+k_{\perp}^2}}}{\sqrt{K^2+k_{\perp}^2}} \left(1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} e^{-2l\sqrt{K^2+k_{\perp}^2}} \right)^{-2} \times \\ \times (K \cos\alpha + k_{\perp} \sin\alpha)^2 \omega_s^3(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2}) \delta(\Omega(K) - \omega_s(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2})) dk_{\perp}, \quad (9)$$

где d – период линейной цепочки J - агрегата.

Чтобы выполнить интегрирование в (9) преобразуем дельта-функцию к виду

$$\delta(\Omega(K) - \omega_s(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2})) = \left| \frac{\partial\omega_s(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2})}{\partial k_{\perp}} \right|_{k_{\perp}=k_{\perp 0}}^{-1} \delta(k_{\perp} - k_{\perp 0}),$$

где $k_{\perp 0}$ - корень уравнения $\Omega(K) = \omega_s(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2})$.

Таким образом, для скорости передачи энергии получаем

$$U(K) = \frac{16\pi|\mathbf{p}_{10}|^2}{\hbar\omega_{pl}^2 d} \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right)^2 \frac{e^{-2z\sqrt{K^2+k_{\perp 0}^2}}}{\sqrt{K^2+k_{\perp 0}^2}} \left| \frac{\partial\omega_s(\sqrt{K^2+k_{\perp}^2})}{\partial k_{\perp}} \right|_{k_{\perp}=k_{\perp 0}}^{-1} \times \\ \times \left(1 + \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} e^{-2l\sqrt{K^2+k_{\perp 0}^2}} \right)^{-2} (K^2 \cos^2\alpha + k_{\perp 0}^2 \sin^2\alpha) \omega_s^3(\sqrt{K^2+k_{\perp 0}^2}). \quad (10)$$

Нами были проведены расчеты скорости передачи энергии от поверхностных плазмонов к J – агрегатам тиацианина (ТС). В качестве материала подложки мы предполагали золото, для которого энергия объемного плазмона $\hbar\omega_{pl} = 9$ эВ, высокочастотная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_{\infty} = 9.8$ [9]. Диэлектрическая проницаемость среды над прослойкой принималась равной $\varepsilon_2 = 1$. Параметры, характеризующие J – агрегаты, были взяты из работы [10]: период линейной цепочки $d = 0.4$ нм, угол между дипольным моментом перехода в молекуле и осью цепочки $\alpha = 24^\circ$, энергия перехода мономера в первое возбужденное синглетное состояние $\hbar\Omega_0 = 2.9$ эВ, энергия экситона в J - агрегате $\hbar\Omega_J = 2.613$ эВ. Дипольный момент перехода между основным и первым возбужденным синглетным состоянием молекулы ТС составляет $|\mathbf{p}_{10}| = 5.2$ Д.

Как известно [11], в оптической области спектра с излучением взаимодействуют только экситоны с $\mathbf{K} = 0$, т.к. длина волны излучения

значительно превосходит расстояние между молекулами J – агрегата. В результате экситон-плазмонного взаимодействия в рассматриваемой нами системе возбуждаться могут экситоны с любым волновым вектором, однако излучаться фотоны могут только из состояния с $\mathbf{K} = 0$. Поэтому расчеты скорости передачи энергии были проведены только для этого случая, как наиболее важного в плане практического приложения.

На рисунке 2 изображены законы дисперсии поверхностных плазмонов (5) в зависимости от толщины диэлектрической прослойки, проницаемость которой принималась равной $\epsilon_1 = 6$. Из рисунка видно, что чем больше толщина прослойки, тем резче падает энергия плазмона с ростом волнового числа, стремясь к постоянному значению $\hbar\omega_{pl}/\sqrt{\epsilon_\infty + \epsilon_1}$. Также на этом рисунке горизонтальной прямой показано значение энергии экситона. Точки пересечения этой прямой с дисперсионными кривыми определяют значения $k_{\perp 0}$ волновых чисел поверхностных плазмонов, обеспечивающие выполнение закона сохранения энергии.

Результаты расчетов скорости передачи энергии от поверхностных плазмонов к J – агрегату при различных значениях диэлектрической проницаемости прослойки представлены на рисунке 3. Из рисунка видно, что с увеличением толщины прослойки скорость передачи энергии падает. Величина обратная скорости передачи энергии представляет собой время жизни экситона по отношению к рождению поверхностного плазмона. Для сравнения на рисунке изображено время жизни экситона по отношению к излучению фотона (горизонтальная линия), которое, как известно, на три порядка меньше времени жизни одиночной молекулы [11] и составляет $\tau_{ex} \approx 11$ пс для J - агрегатов ТС. Если $U^{-1} > \tau_{ex}$, то преимущественно будет происходить перенос энергии от металлической подложки к J – агрегатам с последующим высвечиванием

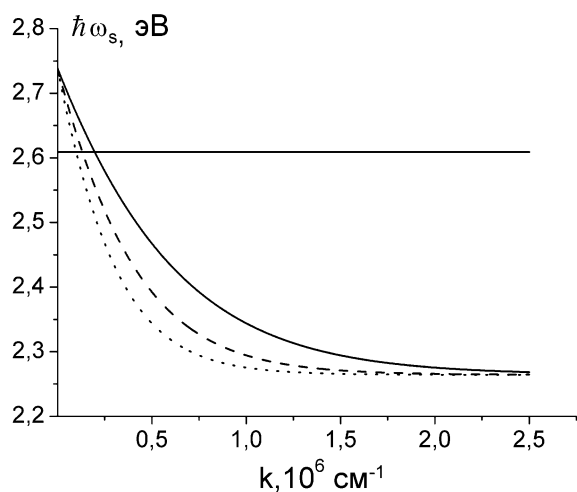


Рис. 2. Законы дисперсии поверхностных плазмонов при толщинах прослойки $l = 10 \text{ nm}$ (сплошная кривая), $l = 15 \text{ nm}$ (штриховая кривая), $l = 20 \text{ nm}$ (пунктир)

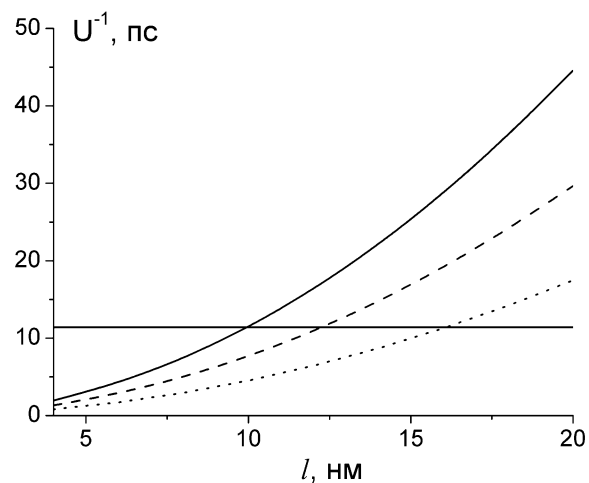


Рис. 3. Зависимости скорости передачи энергии (10) от толщины прослойки при различных диэлектрических проницаемостях: $\epsilon_1 = 6$ (сплошная кривая), $\epsilon_1 = 5$ (штриховая кривая), $\epsilon_1 = 4$ (пунктир)

фотона.

Таким образом, проведенные расчеты показали, что, варьируя материал и толщину диэлектрической прослойки между металлической подложкой и пленкой J – агрегатов, можно добиться одностороннего переноса энергии от плазмонов к френкелевским экситонам, что существенно при разработке новых органических излучателей света.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 14-02-97000).

Список литературы

1. Лебедев, В.С. Оптические свойства композитных наночастиц благородных металлов, покрытых мономолекулярным слоем J-агрегата органического красителя / В.С. Лебедев, А.С. Медведев, Д.Н. Васильев, Д.А. Чубич, А.Г. Витухновский // *Квантовая электроника*. - 2010. – Т.40. -№ 3. –С. 246-253.

2. Витухновский, А.Г. Механизм передачи электронного возбуждения в органических светоизлучающих устройствах на основе полупроводниковых квантовых точек / А.Г. Витухновский, А.А. Ващенко, В.С. Лебедев, Р.Б. Васильев, П.Н. Брунков, Д.Н. Бычковский // *Физика и техника полупроводников*. -2013. –Т. 47. – вып. 7. – С. 962-969.

3. Lebedev, V.S. Absorption and scattering of light by hybrid metal/J-aggregate nanoparticles: Plasmon-exciton coupling and size effects / V.S. Lebedev, A.S. Medvedev // *Journal of Russian Laser Research*. – 2013. – V. 34. – No. 4. – P. 303-322.

4. Витухновский, В.А. Экситон-плазмонный наноизлучатель / А.В. Витухновский, Д.А. Чубич // *Патент РФ №2417483*. – 2011. – бс.

5. Prokhorov, V.V. Molecular arrangement in two-dimensional J-aggregate monolayers of cyanine dyes / V.V. Prokhorov, S.I. Pozin, D.A. Lypenko, O.M. PereLygina, E.I. Mal'tsev, A.V. Vannikov // *Macroheterocycles*. – 2012. – V. 5(4-5). – P. 371-376.

6. Нокс, Р. Теория экситонов : монография / Р. Нокс. – Москва: Мир, - 1966. – 220с.

7. Давыдов, А.С. Теория молекулярных экситонов : монография / А.С. Давыдов. – Москва: Наука, - 1968. – 296с.

8. Чмерева, Т.М. Межмолекулярный безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения вблизи проводящей пленки / Т.М. Чмерева, М.Г. Кучеренко // *Известия ВУЗов. Физика*. - 2014. –Т.57. - №10. -С. 116-121.

9. Климов, В.В. Наноплазмоника : монография / В.В. Климов. -Москва: Физматлит, - 2009. - 480 с. – ISBN 978-5-9221-1030-3

10. Valleau, S. Exciton transport in thin-film cyanine dye J-aggregates / S. Valleau, S.K. Saikin, M.-H. Yung, A.A. Guzik // *The journal of chemical physics*. - 2012. – V. 137. – P. 034109.

11. Агранович, В.М. Теория экситонов : монография / В.М. Агранович. – Москва: Наука, - 1968. – 382с.

ЭКСИТОН-ПЛАЗМОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «КВАНТОВАЯ ТОЧКА - МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ НАНОПРОВОЛОКА»

Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г., Дмитриев А.Д.
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Современные исследования в области нанопластики и оптоэлектроники характеризуются большим интересом к наноструктурам, содержащим полупроводниковые квантовые точки (КТ). Уникальные физические свойства КТ используются при создании лазеров, фотоприемников, сенсоров, одноэлектронных транзисторов. Характерной особенностью квантовых точек является зависимость их свойств от размеров, что является следствием трехмерного пространственного ограничения движения носителей заряда. Поэтому варьируя размеры КТ можно, например, менять положение спектров поглощения и люминесценции в пределах широкого диапазона длин волн: от инфракрасной до ультрафиолетовой области [1].

Одними из перспективных в плане практических приложений, например, в качестве спектральных фильтров с резкой границей пропускания, являются гетерофазные системы, в которых квантовые точки CuCl или CuBr распределены в стекле [1,2]. Как известно [1,2], эти квантовые точки в стеклообразной матрице имеют сферическую форму, и являются примером КТ в режиме слабого конфайнмента, когда радиус экситона в объемном материале меньше радиуса КТ. Радиус экситона в CuCl составляет 0.7 нм, в CuBr – 1.3 нм, радиус КТ может лежать в диапазоне от 2 до 10 нм в зависимости от условий выращивания нанокристаллов в стекле [2,3]. Кроме того, экситон в хлориде меди имеет высокую энергию связи (~190 мэВ), поэтому экситонные спектры наблюдаются даже при комнатной температуре.

В данной работе рассмотрена композитная система, представляющая собой стеклянную матрицу, в которую внедрены сферическая квантовая точка и металлическая нанопроволока, как показано на рисунке 1. Предполагалось, что КТ находится в экситонном режиме (режиме слабого конфайнмента). Проведено описание взаимодействия экситонов КТ с полем одномерных поверхностных плазмонов нанопроволоки. В рамках построенной математической модели выполнены расчеты скорости тушения экситонных состояний КТ проводящей нанопроволокой.

Скорость электронно-дырочной

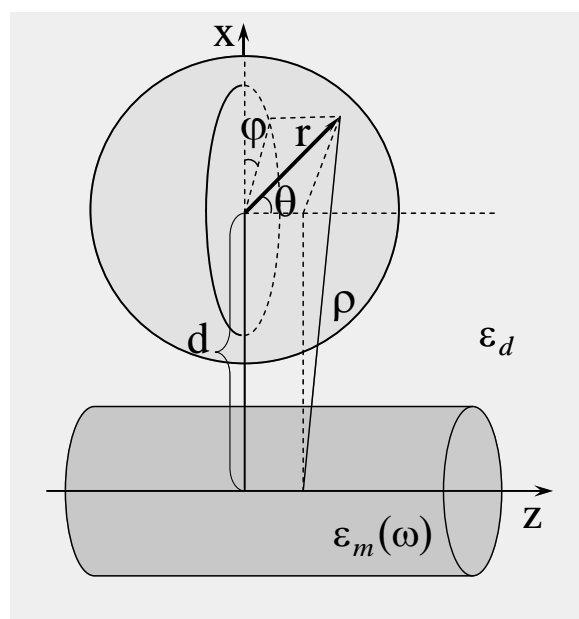


Рис. 1. Сферическая квантовая точка и нанопроволока в стеклянной матрице

рекомбинации, сопровождающейся рождением одномерного аксиально-симметричного поверхностного плазмона, в соответствии с золотым правилом Ферми равна

$$U = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{k_z} \left| \langle \Psi_0 | N_{k_z} + 1 | \hat{V}_{ex-pl} | N_{k_z} | \Psi \rangle \right|^2 \delta(\Omega - \omega_0(k)), \quad (1)$$

где Ω - частота экситонного перехода; $\omega_0(k)$ - частота одномерного поверхностного плазмона; $|N_{k_z}\rangle$ и $|N_{k_z} + 1\rangle$ - волновые функции состояний с N и $N + 1$ плазмонами с проекцией волнового вектора k_z ; Ψ_0 и Ψ - волновые функции основного и возбужденного состояний электронной подсистемы КТ; $\hat{V}_{ex-pl} = -e \sum_i V(\mathbf{r}_i)$ - оператор экситон-плазмонного взаимодействия; $V(\mathbf{r}_i)$ - потенциал плазмонного поля, в точке, где находится i -ый электрон квантовой точки.

Волновая функция основного состояния электронной подсистемы КТ записывается в виде антисимметризованного произведения функций Ванье [4-6]

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = A a_{\mathbf{R}_1}^V(\mathbf{r}_1) a_{\mathbf{R}_2}^V(\mathbf{r}_2) \cdot \dots \cdot a_{\mathbf{R}_N}^V(\mathbf{r}_N), \quad (2)$$

где A - оператор антисимметризации, \mathbf{r}_j - координаты электронов, \mathbf{R}_j - координаты узлов решетки, $a_{\mathbf{R}_j}^V(\mathbf{r}_j)$ - функция Ванье валентной зоны.

Пусть i -ый электрон состояния Ванье валентной зоны в узле \mathbf{R}_i переведен в состояние Ванье $a_{\mathbf{R}_j}^C(\mathbf{r}_i)$ зоны проводимости в узле j . Тогда волновая функция возбужденного состояния КТ, учитывающая коррелированное движение электрона и дырки имеет вид [4-6]

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} C_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} A a_{\mathbf{R}_1}^V(\mathbf{r}_1) a_{\mathbf{R}_2}^V(\mathbf{r}_2) \cdot \dots \cdot a_{\mathbf{R}_j}^C(\mathbf{r}_i) a_{\mathbf{R}_j}^V(\mathbf{r}_j) \cdot \dots \cdot a_{\mathbf{R}_N}^V(\mathbf{r}_N). \quad (3)$$

Коэффициенты $C_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j}$ представляют собой огибающую волновую функцию экситонного состояния $C_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} = \upsilon \Psi(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j)$, υ - объем элементарной ячейки.

В квазистатическом приближении потенциал поля одномерных аксиально-симметричных поверхностных плазмонов в области диэлектрического окружения нанопроволоки записывается в виде [7]

$$V(\rho, z) = \sum_{k_z} \frac{\sqrt{\hbar} I_0(kR) \omega_0^3(k)}{\sqrt{L k R \omega_{pl}^2(k) I_1(kR) K_0(kR)}} e^{ik_z z} K_0(k\rho) (a_{k_z} + a_{-k_z}^+). \quad (4)$$

Потенциал (4) записан в цилиндрической системе координат, ось которой совпадает с осью нанопроволоки. В формуле (4) R и L – радиус и длина нанопроволоки, $k = |k_z|$ – продольное волновое число, $I_0(k\rho)$ и $K_0(k\rho)$ – модифицированные функции Бесселя, $a_{-k_z}^+$ и a_{k_z} – операторы рождения и уничтожения плазмона, ω_{pl} – плазменная частота металла.

Закон дисперсии $\omega_0(k)$ одномерных поверхностных плазмонов следует из условий непрерывности потенциала и нормальных составляющих вектора электрической индукции на поверхности нанопроволоки. Если материал нанопроволоки описывается обобщенной моделью Друде-Лоренца, для частоты поверхностного плазмона получается следующее выражение [8]

$$\omega_0^2(k) = \omega_{pl}^2 \left(\varepsilon_\infty + \varepsilon_d \frac{I_0(kR) K_1(kR)}{K_0(kR) I_1(kR)} \right)^{-1},$$

где ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость нанопроволоки, ε_d – диэлектрическая проницаемость окружающей нанопроволоку среды. Для упрощения задачи можно пренебречь различием диэлектрических проницаемостей КТ и стеклянной матрицы.

Используя выражения (2), (3) для волновых функций, раскладывая потенциал плазмонного поля (4) в ряд в окрестности соответствующего узла решетки, а также учитывая, что при нормальных условиях число плазмонных состояний $N = 0$, для матричного элемента оператора экситон-плазмонного взаимодействия, входящего в формулу (1), получаем

$$\begin{aligned} V_{fi} &= \langle \Psi | N_{k_z} + 1 \left| \left(-e \sum_i V(\mathbf{r}_i) \right) \right| N_{k_z} | \Psi_0 \rangle = \\ &= \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} C_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j} \int A a_{\mathbf{R}_1}^{V*}(\mathbf{r}_1) a_{\mathbf{R}_2}^{V*}(\mathbf{r}_2) \dots a_{\mathbf{R}_N}^{V*}(\mathbf{r}_N) \left(-e \sum_i [W(\mathbf{R}_i) + \nabla W(\mathbf{R}_i) \cdot \mathbf{r}_i] \right) \times \\ &\times A a_{\mathbf{R}_1}^V(\mathbf{r}_1) a_{\mathbf{R}_2}^V(\mathbf{r}_2) \dots a_{\mathbf{R}_j}^C(\mathbf{r}_j) a_{\mathbf{R}_j}^V(\mathbf{r}_j) \dots a_{\mathbf{R}_N}^V(\mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N. \end{aligned}$$

Здесь $W(\mathbf{R}_i) = \langle N_{k_z, 0} + 1 | V | N_{k_z, 0} \rangle$ – матричный элемент оператора потенциала плазмонного поля, вычисленный для узла \mathbf{R}_i .

Следует отметить, что функции Ванье сильно локализованы в пределах соответствующих элементарных ячеек, поэтому произведения $a_{\mathbf{R}_j}^C(\mathbf{r}_i) a_{\mathbf{R}_i}^{V*}(\mathbf{r}_i)$

равны нулю для всех $\mathbf{R}_j \neq \mathbf{R}_i$. Указанная локализация также приводит к малости обменных интегралов, представляющих собой часть экситон-плазмонного взаимодействия, связанную с корреляцией движения электронов. Кроме того интегралы, содержащие $W(\mathbf{R}_i)$ обращаются в ноль из-за ортогональности функций Ванье зоны проводимости и валентной зоны. Выполнив интегрирование по координатам электронов, и, заменив сумму по ячейкам интегрированием по непрерывным переменным огибающей функции $\sum_{\mathbf{R}_i} \rightarrow v^{-1} \int d\mathbf{R}$, матричный элемент преобразуем к виду

$$V_{fi} = \mathbf{p}_{vc} \cdot \int \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R}) \nabla W(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad (5)$$

где введено обозначение $\mathbf{p}_{vc} = -e \int a_{\mathbf{R}_i}^{V*}(\mathbf{r}) \mathbf{r} a_{\mathbf{R}_i}^C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ - дипольный момент перехода между состояниями Ванье зоны проводимости и валентной зоны.

Определим вид огибающей волновой функции экситонного состояния $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R})$, считая, что экситон в КТ находится в бесконечно глубокой потенциальной яме. При этом потенциальная яма ограничивает движение экситона как целого, и не возмущает относительное движение электрона и дырки. Для сферической КТ волновая функция экситонного состояния в системе координат, связанной с центром масс электрона и дырки записывается в виде [1]

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \varphi_{nlm}(\mathbf{x}) \Phi_{n'l'm'}(\mathbf{X}),$$

где $\mathbf{x} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$ - радиус-вектор относительного движения электрона и дырки, $\mathbf{X} = (m_e \mathbf{r}_e + m_h \mathbf{r}_h) / (m_e + m_h)$ - радиус-вектор центра масс экситона, $m_{e(h)}$ - эффективная масса электрона (дырки), $\varphi_{nlm}(\mathbf{x})$ - водородоподобная волновая функция объемного экситона, $\Phi_{n'l'm'}(\mathbf{X})$ - волновая функция экситона в бесконечно глубокой сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме.

Так как координата электрона (дырки) приблизительно равна координате узла, которому этот электрон (дырка) принадлежит, т.е. $\mathbf{R} \approx \mathbf{r}_e = \mathbf{r}_h$, то огибающая волновая функция, входящая в матричный элемент (5), принимает вид $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{R}) = \varphi_{nlm}(0) \Phi_{n'l'm'}(\mathbf{R})$. Заметим, что водородоподобная волновая функция, не обращающаяся в ноль в начале координат, это функция s-состояния, т.е. угловой момент относительного движения электрона и дырки равен нулю ($l = 0, m = 0$) [1].

С учетом сказанного выражение (1) для скорости переноса энергии от КТ к нанопроволоке можно преобразовать к следующему виду

$$\begin{aligned}
U = & \frac{\varphi_{n00}^2(0)}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega_0^3(k) I_0(kR) k}{R \omega_{pl}^2 K_0^2(kR) I_1(kR)} \delta(\Omega - \omega_0(k)) \times \\
& \times \left[(p_{vc})_x \int \Phi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \exp(-ik_z r \cos\theta) K_1(k\rho) \frac{d + r \sin\theta \cos\phi}{\rho} d\mathbf{r} + \right. \\
& + (p_{vc})_y \int \Phi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \exp(-ik_z r \cos\theta) K_1(k\rho) \frac{r \sin\theta \sin\phi}{\rho} d\mathbf{r} + \\
& \left. + (p_{vc})_z \int \Phi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \exp(-ik_z r \cos\theta) K_0(k\rho) d\mathbf{r} \right]^2 dk_z, \quad (6)
\end{aligned}$$

где $\rho = \sqrt{d^2 + r^2 \sin^2 \theta + 2dr \sin\theta \cos\phi}$, d – расстояние между осью цилиндрической проволоки и центром квантовой точки, r – расстояние до центра точки, θ и ϕ – полярный и азимутальный углы. Ось x проходит перпендикулярно оси нанопроволоки (оси z) через центр квантовой точки, как показано на рисунке 1. Интеграл в (6) берется по объему квантовой точки.

Энергия экситонного состояния определяется равенством [1]

$$\hbar\Omega = E_g - \frac{\mu e^2}{2\varepsilon_0^2 \hbar^2 n^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n'^2}{2MR_0^2}, \quad (7)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны в объемном полупроводнике. Вторым членом в (7) дает энергию связи объемного экситона, в нем μ – приведенная масса электрона и дырки, ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость материала КТ. Третье слагаемое в (7) есть энергия экситона массой M (сумма масс электрона и дырки) в бесконечно глубокой сферически симметричной прямоугольной потенциальной яме, R_0 – радиус квантовой точки.

В широкозонном полупроводнике хлорида меди энергия запрещенной зоны составляет $E_g \approx 3.3$ эВ. Чтобы перенос энергии от КТ к нанопроволоке был возможен, необходимо равенство энергий экситона и одномерного поверхностного плазмона. Это условие можно выполнить, если в качестве материала нанопроволоки выбрать серебро. Нами были проведены расчеты скорости тушения экситона в квантовой точке хлорида меди серебряной нанопроволокой при различных геометрических параметрах рассматриваемой системы. При моделировании мы использовали следующие значения величин, характеризующих квантовую точку, нанопроволоку и стеклянное окружение. Энергия объемного плазмона и высокочастотная диэлектрическая проницаемость серебра принимались равными $\hbar\omega_{pl} = 9.2$ эВ, $\varepsilon_{\infty} = 3.7$ [8]. Диэлектрическая проницаемость стекла выбиралась равной $\varepsilon_d = 4.2$. Значения статической диэлектрической проницаемости, эффективных масс электрона и дырки в объемном CuCl брались из монографии [1] ($\varepsilon_0 = 5.95$, $m_e = 0.5m_0$, $m_h = 1.6m_0$).

Нами были рассчитаны скорости передачи энергии от КТ к

нанопроволоке в случае перехода квантовой точки из экситонного состояния, характеризующегося квантовыми числами $n=1$, $l=0$ для относительного движения электрона и дырки и $n'=1$, $l'=0$ для движения экситона как целого, в основное состояние. На рисунке 2 представлены дистанционные зависимости скорости передачи энергии, рассчитанные по формуле (6). В расчетах радиусы квантовой точки R_0 и нанопроволоки R принимались равными $R_0=3$ нм, $R=3$ нм. Дипольный момент перехода электрона между зоной проводимости и валентной зоной выбирался равным $\mathbf{p}_{vc} = 0.6 e$ СГСЭ·нм [9]. Поскольку направление \mathbf{p}_{vc} определяется симметрией кристаллической решетки КТ, имело смысл сравнить скорости энергопередачи для разных ориентаций дипольного момента.

Из рисунка видно, что скорости передачи энергии для случая, когда дипольный момент перехода электрона между зоной проводимости и валентной зоной ориентирован вдоль осей x или z (рисунок 1) выше скорости, усредненной по направлениям \mathbf{p}_{vc} (при усреднении предполагалась, что все направления \mathbf{p}_{vc} равновероятны). Это объясняется тем, что скорость переноса энергии, сопровождающегося рождением аксиальносимметричных поверхностных плазмонов, обращается в ноль для случая ориентации дипольного момента перехода вдоль оси y . Также следует отметить, что наблюдается более резкая зависимость скорости тушения экситонного состояния от расстояния d между осью нанопроволоки и центром КТ, чем зависимость скорости межзонной релаксации квантовой точки, рассмотренной в работе [10]. Как указывается в [1] переходы электрона в квантовой точке обладают конечной спектральной шириной, и дельта-функцию, выражающую закон сохранения энергии и входящую в формулу (6), можно заменить лоренцианом. Степень перекрытия лоренциана с остальной частью подынтегральной функции в (6) зависит от параметров модели и определяет значение скорости передачи энергии [10].

На рисунке 3 изображены зависимости скорости передачи энергии от КТ к нанопроволоке от радиуса квантовой точки при постоянном расстоянии между центром КТ и осью нанопроволоки $d=7$ нм. Радиус нанопроволоки был таким же, как в предыдущем случае. Расчеты показывают, что скорость передачи энергии довольно резко растет с увеличением радиуса КТ.

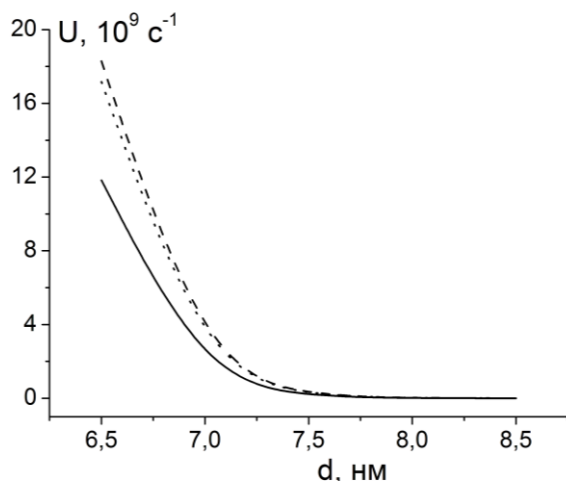


Рис. 2. Дистанционные зависимости скорости тушения экситонного состояния КТ нанопроволокой для разных ориентаций дипольного момента перехода: штриховая линия – $\mathbf{p}_{vc} \parallel x$, пунктирная линия – $\mathbf{p}_{vc} \parallel z$, сплошная линия – усреднение по ориентациям.

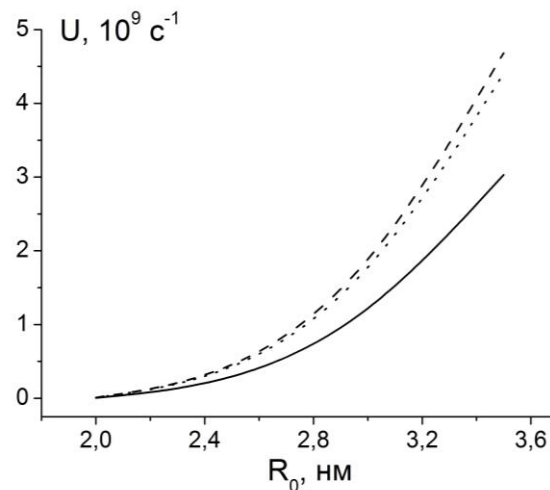


Рис. 3. Зависимости скорости тушения экситонного состояния КТ нанопроволокой от ее радиуса для разных ориентаций дипольного момента перехода. Обозначение кривых такое же, как на рис. 2

Таким образом, в данной работе показано, что скорость тушения экситонного состояния КТ хлорида меди серебряной нанопроволокой в зависимости от геометрических параметров системы может превосходить скорость излучательной рекомбинации электрона и дырки. Поэтому при анализе оптических спектров наноструктур, содержащих квантовые точки и проводящие нанопроволоки, необходимо учитывать возможность тушения экситонных состояний КТ проводником.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 14-02-97000).

Список литературы

1. Федоров, А.В. Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек: монография / А.В. Федоров, И.Д. Рухленко, А.В. Баранов, С.Ю. Кручинин. – Санкт-Петербург : Наука, 2011. -188с. - ISBN 978-5-02-025402-2.
2. Ким, А.А. Нелинейно оптические эффекты в стеклах с нанокристаллами хлорида меди / А.А. Ким, П.С. Ширишев, А.И. Сидоров, Н.В. Никоноров, В.А. Цехомский // Письма в журнал технической физики. - 2011. - Т. 37. - № 8. - С. 22-28.
3. Валов, П.М. Стадия формирования и рост зародышей фазы CuCl в стекле / П.М. Валов, В.И. Лейман // Физика твердого тела. – 2005. – Т. 47. – вып. – 11. – С. 2060-2065.
4. Нокс, Р. Теория экситонов : монография / Р. Нокс. – Москва: Мир, - 1966. – 220с.

5. Купчак, И.М. Характеристики экситонов и экситонная фотолюминесценция структур с кремниевыми квантовыми точками / И.М. Купчак, Д.В. Корбутяк, Ю.В. Крюченко, А.В. Саченко, И.О. Соколовский, О.М. Сресели // *Физика и техника полупроводников*. – 2006. –Т. 40. – вып. 1. – С. 98-107.
6. Sugakov, V. I. *Localized exciton states with giant oscillator strength in quantum well in vicinity of metallic nanoparticle* / V. I. Sugakov and G. V. Vertsimakha // *Phys. Rev. B*. – 2010. –V. 81. - P. 235308.
7. Chmereva, T.M. *Influence of Conducting Nanocylinder on Resonance Energy Transfer in Donor–Acceptor Pair of Molecules* / T.M. Chmereva, M.G. Kucherenko // *Optics and Spectroscopy*. – 2011. - V. 110. - No. 5. - P. 767–774.
8. Климов, В.В. *Наноплазмоника : монография* / В.В. Климов. -Москва: Физматлит, - 2009. - 480 с. – ISBN 978-5-9221-1030-3.
9. Розеншер, Э. *Оптоэлектроника : монография* // Э. Розеншер, Б. Винтер. - Москва: Техносфера, - 2004. - 592с. ISBN 5-94836-031-8.
10. Чмерева, Т.М. *Энергетическая релаксация квантовых точек вблизи металлической нанопроволоки* / Т.М. Чмерева, М.Г. Кучеренко, А.Д. Дмитриев // *Сборник трудов VIII Международной конференции «Фундаментальные проблемы оптики – 2014»*.- Санкт-Петербург, 2014. - С. 317-319. - ISBN 5-7577-0485-2.

СБОРНИК ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ СО СПОРТИВНЫМ, БИОФИЗИЧЕСКИМ, ИСТОРИЧЕСКИМ И ТЕХНИЧЕСКИМ СОДЕРЖАНИЕМ

Якупов Г.С.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

В предисловиях к сборникам задач по физике для средних школ подробно излагаются для решения каких целей составлен тот или иной задачник. Например, в предисловии к сборнику задач А. П. Рымкевич и П. А. Рымкевич, самому массовому и много раз переиздаваемому изданию, по мнению автора, указано “овладеть школьным курсом физики – это значит не только понять физические явления и закономерности, но и уметь применять их на практике. Всякое применение общих положений физики для решения конкретного, частного вопроса есть решение физической задачи”.

Но как научить школьника понимать физические явления? Для любого человека понимание начинается с наблюдения, осмысления. Для понимания же физических явлений чаще всего необходима демонстрация этого явления, проведение эксперимента, опыта. С такой проблемой стараются справиться сборники задач с заданиями качественного характера и сборники задач с проведением той или иной физической демонстрации с использованием иногда подручных средств. А может ли сам человек, учащийся, быть “подручным” средством? Или предметы увлечения /велосипед, баскетбольный мяч, боксерская груша, бильярд и многое другое/? Как на себе и через себя понять некоторые закономерности физических явлений? На все эти вопросы автор делает попытку ответить в данном сборнике задач различного прикладного характера /спорт, техника, медицина, биология, компьютерные модели, реальные жизненные ситуации и многое другое/. Основным действующим лицом в данных задачах является сам ученик, и окружающие его реальные предметы. Существует термин «межпредметные связи». Если понимать его буквально, то это означает, как связаны одни предметы с другими. Как связать физику и другие предметы, в том числе гуманитарного цикла, как заинтересовать учащихся? Без четкой и ясной связи сложно что-то донести до учеников. Зачем нам физика? Баскетбольный мяч летит в корзину, потому что мы его так бросили, шайба попадает в ворота, потому что мы так постарались, трюки скейтборде получаются благодаря нашему умению и долгим тренировкам... А физика здесь ни при чем... Как бы нет так. За всем этим стоит физика. Да! Так и не иначе. Но вот в том, чтобы убедить в этом наших всезнающих учеников и есть наша задача. Среди известных ученых-физиков были спортсмены. Фредерик Жолио Кюри (1900 – 1958) французский физик, член Парижской Академии Наук, был нападающим сборной Франции по футболу. Футболистом был и другой великий физик – Нильс Бор (1885 – 1962). В свое время он был запасным вратарем датского футбольного клуба Академиск. В этом же клубе на позиции полузащитника играли и брат Нильса Бора Харальд Бор, впоследствии ставший знаменитым математиком. В истории

физики известна такая комичная ситуация, когда Н. Бор получил Нобелевскую премию по физике, датские газеты опубликовали заметку под названием «Нашему вратарю дали Нобелевскую премию!» Кроме футбола Бор занимался боксом, горными лыжами и парусным спортом.

Сборник состоит из трех частей. В первой части представлены задачи связанные, так или иначе, с различными видами спорта и спортивными ситуациями. Во второй части приведены качественные задачи, основанные на личных наблюдениях учащихся явлений природы и на личном опыте использования различных предметов. И, наконец, в третьей части представлены сами количественные задачи, в которых необходимо, что либо вычислить /вторая цель, описанная в предисловии к сборнику задач А. П. Рымкевич и П. А. Рымкевич /. Многие задачи требуют количественно описать физическое явление, приведенное в первой части задачника, а также подтвердить расчетами ответы к некоторым простым качественным задачам из второй части сборника.

Стоит отметить, что пытаясь разнообразить содержание физических задач, авторы иногда создают задания с нелепым, а то и абсурдным содержанием. Вот несколько подобных примеров.

Пример 1.

Белку с полными лапками орехов посадили на гладкий, горизонтальный стол и толкнули по направлению к краю. Приближаясь к краю стола, белка почувствовала опасность. Она понимает законы Ньютона и предотвращает падение на пол. Каким образом?

Пример 2.

В озеро упала ветка. Пробегавший мимо олень, успел заметить, что волна, созданная падением ветки, дошла до берега за 10 с, причем расстояние между соседними гребнями волн было равно 10 см и за 2 секунды было 4 всплеска о берег. Помогите оленю определить, как далеко от берега упала ветка.

Пример 3.

Снилось ему, что он превратился в огромный конденсатор, емкостью 2 Ф, который какое-то рыбообразное существо настойчиво пыталось включить в цепь переменного тока с периодом колебания 0,1 с. Проснулся он только тогда, когда почувствовал, как по нему начинает идти ток с действующим значением 0,5 А. Чему равна амплитуда напряжения?

Оригинальный текст, приведенных в качестве примеров заданий сохранен. Это лишь несколько примеров того, как искусственно создается физическая проблема, завуалированная часто текстом абсурдного содержания. Решение подобных заданий нисколько не повышает интерес учащихся к физике, а наоборот, создает у них впечатление того, что это дисциплина оторвана от реальной жизни и лишенная практического смысла.

Подобная тенденция встречается и в некоторых олимпиадных задачах по физике.

Пример.

Горизонтально летящая со скоростью v бабочка оказывается над трубкой фонтана в момент его включения. Струи воды разлетаются их трубки во всех направлениях со скоростью $2v$. Пренебрегая трением капель о воздух, найти

минимальную высоту бабочки над трубкой, при которой она не будет сбита водой.

Данная задача составлена на базе традиционной задачи о радиусе поражения цели, которая является наиболее трудной и редко встречающейся задачей.

В заключении рассмотрим ряд задач из каждой части сборника по некоторым разделам физики.

Пример 1. Задача по кинематике.

Во время забега на 800 метров два примерно равных по силам спортсмена Иванов и Петров используют разную тактику борьбы за первое место. Иванов первую половину дистанции бежит со скоростью $v_1 = 12$ км/ч, а вторую со скоростью $v_2 = 16$ км/ч. Петров выбрал другую тактику, он половину времени бежит со скоростью 12 км/ч, а вторую половину времени — 16 км/ч. Кто из них победит в забеге и с каким отрывом?

Пример 2. Задача по динамике.

Легкоатлеты используют для бега шиповки, считающейся удобной обувью для пробежек. Коэффициент трения с дорогой равен 0,25. Найти максимальное ускорение, которое может развить бегущий спортсмен и силу, если его масса равна 70 кг.

Пример 3. Задача на закон сохранения механической энергии.

Сноубордист массой 70 кг скатывается по уклону горы под углом к горизонту 15° . Длина спуска составляет 70 м. Коэффициент трения скольжения сноубордиста равен 0,1. Определить: а) ускорение сноубордиста при движении с горы; б) скорость в конце спуска; в) время спуска; г) кинетическую энергию в конце спуска; д) какое расстояние прокатится сноубордист после спуска по горизонтали; е) сколько времени продолжалось движение по горизонтали; ж) ускорение при движении по горизонтальному участку пути.

Примеры качественных задач из второй части сборника.

Почему вратарь видит хорошо игроков на поле и зрителей, а лицо вратаря зрители и игроки не видят?

Почему при повороте хоккеист уменьшает скорость?

Почему хоккеист на поворотах наклоняется?

Какую клюшку легче сломать: длинную или короткую? Почему?