

**Секция 7**

**«ВОПРОСЫ  
ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ  
И ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ  
В РУСЛЕ СОВРЕМЕННОГО  
ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»**

## Содержание

ВЛИЯНИЕ ДИЭТИЛАМИНА НА ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНА С ГОЛЬМИЕМ В ДИМИТИЛФОРМАМИДЕ Алиджанов Э.К., Пашкевич С.Н, Никиян А.Н., Раздобреев Д.А.,.....	1721
РОЛЬ УЧЕБНОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО ТЕПЛОФИЗИКЕ В ФОРМИРОВАНИИ ПК СТУДЕНТОВ, ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ 20.03.01 ТЕХНОСФЕРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ Анисина, И.Н., Волков Е.В., Четверикова А.Г.....	1728
РАДИОЗОНДИРОВАНИЕ ВЕНЕРЫ Борцов М.А. ....	1733
РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ ИНТЕРЕСОВ НА УРОКАХ ФИЗИКИ В 5-6 КЛАССАХ Гладышева Ю.А.....	1737
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МЕЗОСТРУКТУРЫ ДИСПЕРСНЫХ ГЛИНИСТЫХ ПОРОШКОВ Каныгина О.Н., Филяк М.М., Четверикова А.Г. ....	1742
ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ ПО ВОЗОБНОВЛЯЕМЫМ ИСТОЧНИКАМ ЭНЕРГИИ Кирин И.Г.....	1747
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛНЕЧНЫХ ЯЧЕЕК ГРЕТЦЕЛЯ МЕТОДОМ FDTD Кислов Д.А. ....	1751
ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОПРОЦЕССОВ В ОБРАЩЁННЫХ МИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ РАДИУСОВ Климова Т.В. ....	1759
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛЫ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА НА ПОВЕРХНОСТИ ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. ....	1767
АНАЛИЗ СЕМЕСТРОВОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ФИЗИКЕ СТУДЕНТА-ПЕРВОКУРСНИКА ЭЛЕКТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА Кучеренко М.А. ....	1773
ТРАНСФОРМАЦИЯ СПЕКТРОВ УДЕЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ СЛОИСТЫХ НАНОПРОВОЛОК В МАГНИТНОМ ПОЛЕ Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.....	1778

АННИГИЛЯЦИЯ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В СФЕРИЧЕСКИХ ПОРАХ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ Кучеренко М.Г., Неясов П.П. ....	1787
СПЕКТРЫ $\gamma$ DMR ТУШЕНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ СПИН-ДУБЛЕТНЫМИ АКЦЕПТОРАМИ В НАНОСТРУКТУРАХ Кучеренко М.Г., Пеньков С.А. ....	1796
ИНДУЦИРОВАННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОЛЕКУЛАХ ВБЛИЗИ НАНОАНТЕНН ИЗ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ Кучеренко М.Г., Русинов А.П. ....	1803
ГЕНЕРАЦИЯ ЭКСИТОНОВ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА МОЛЕКУЛАМИ В ОБОЛОЧКЕ СЛОИСТОЙ КОМПОЗИТНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ С ЗАМАГНИЧЕННОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ЧАСТЬЮ Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. ....	1812
ГИДРАТАЦИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК, СОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИЕ КРАСИТЕЛИ Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Алиджанов Э.К., Чайченко К.В. ....	1822
ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЗАМЕДЛЕННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЭРИТРОЗИНА В ТКАНЯХ МЫШЕЙ IN VITRO Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Чакак А.А., Муханова А.Ф., Сокабаева С.С., Ишемгулов А.Т. ....	1828
СТАБИЛИЗАЦИЯ МАГНИТНОЙ ЗАПИСИ НА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦАХ СИСТЕМОЙ МАГНИТОЖЁСТКИХ ЧАСТИЦ Манаков Н.А., Толстобров Ю.В., Монтэн М., Чакак А.А. ....	1832
МЕСТО ФИЗИКИ В СИСТЕМЕ ОБРАЗОВАНИЯ И ВОСПИТАНИЯ Манаков Н.А., Чакак А.А. ....	1837
КАЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ОБРАЗЦЕ ИЗ ПРИРОДНОЙ ГЛИНЫ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ Савинкова Е.С., Каныгина О.Н. ....	1844
ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА СОБСТВЕННУЮ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ РАСТВОРОВ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА Степанов В.Н. ....	1848
ИССЛЕДОВАНИЕ СТЕПЕНИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЁНОК ЖЕЛАТИНА, ХИТОЗАНА И ИХ СМЕСИ Тихонов Г.А., Каныгина О.Н., Лантух Ю.Д., Чайченко К.В. ....	1854
ТЕХНОЛОГИЯ СКВОЗНОГО ИЗЛОЖЕНИЯ КУРСА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО ДИНАМИКЕ ДЛЯ УЧИТЕЛЕЙ ФИЗИКИ «УСЛОВНЫХ СПЕЦИАЛИСТОВ», ЧИТАЕМОГО В ОРЕНБУРГСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ Узенбаев Ф. Г. ....	1860

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДИЧЕСКИХ УКАЗАНИЙ В ОРГАНИЗАЦИИ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО ФИЗИКЕ В УСЛОВИЯХ СОВРЕМЕННОГО ОБРАЗОВАНИЯ	1863
Цветкова Е.В., Белокопытова О.Г. ....	1863
БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ МЕЖДУ МОНОСЛОЯМИ J- АГРЕГАТОВ ПОСРЕДСТВОМ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОНОВ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ	1868
Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г., Курмангалеев К.С. ....	1868
ПСИХОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СТУДЕНТОВ ГУМАНИТАРНЫХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ В КОНТЕКСТЕ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКИ	1875
Якупов Г. С. ....	1875

# **ВЛИЯНИЕ ДИЭТИЛАМИНА НА ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА ЭНДОМЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНА С ГОЛЬМИЕМ В ДИМИТИЛФОРМАМИДЕ**

**Алиджанов Э.К., Пашкевич С.Н., Никиян А.Н., Раздобреев Д.А.,  
Кареев И.Е, Бубнов В.П.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург  
ИПХФ РАН, г. Черноголовка**

Уникальная структура эндометаллофуллеренов (ЭМФ), в совокупности с возможностью изменения их физико-химических свойств в зависимости от типа внедренного металла, вызывают большой интерес с точки зрения как фундаментальной, так и прикладной науки [1]. Проведенные на сегодняшний день исследования [2, 3] показывают, что ЭМФ имеют перспективу найти применение в качестве молекулярных магнетиков, молекулярных проводников, ферроэлектриков, контрастирующих материалов для ЯМР-томографии. Однако физические и химические свойства ЭМФ до сих пор остаются недостаточно изученными.

Молекулы ЭМФ обладают значительными собственными дипольными моментами (3-4 Дебая). В объеме растворителя за счет Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий молекулы ЭМФ формируют устойчивую систему кластеров при самых незначительных концентрациях ( $10^{-7}$  –  $10^{-6}$  М).

Кластерные системы представляют интерес для формирования элементов функциональной электроники. Их физико-химические свойства могут существенно отличаться от свойств как объемного материала, так и одиночных молекул. Одним из ключевых параметров управления физико-химическими свойствами кластеров является контролируемое изменение их размеров. Образование кластеров заданного размера определяется термодинамическими параметрами кластерной системы, при которых ее энергия Гиббса достигает минимальной величины. Термодинамические параметры кластерной системы можно варьировать, изменяя ионную силу коллоидного раствора.

Согласно теории агрегативной устойчивости коллоидных растворов (ДЛФО) [4], коллоидные частицы (из-за наличия теплового броуновского движения) могут сближаться друг с другом, пока не соприкоснутся своими диффузными слоями. Когда диффузные слои имеют достаточную толщину, то сближение частиц происходит до расстояний, на которых электростатические силы отталкивания преобладают над Ван-дер-Ваальсовыми силами притяжения и частицы не слипаются. Такой раствор обладает агрегативной устойчивостью.

При увеличении ионной силы растворителя (увеличении концентрации электролита), вследствие обменной адсорбции ионов (переходе из диффузного слоя в адсорбционный) толщина диффузного слоя изменяется. Это нарушает электростатическое равновесие и в растворе начинается процесс агрегации (фрагментации) коллоидных частиц. Так, например, в работе [5] наблюдался

процесс агрегации кластеров фуллеренов в водном растворе при увеличении в нем концентрации электролита (NaCl, CaCl<sub>2</sub>).

С другой стороны, в работе [6] показано, что небольшие добавки AlCl<sub>3</sub> к о-дихлорбензолу существенно повышают растворимость ЭМФ и переводят молекулу M@C<sub>82</sub> в катионную форму M@C<sub>82</sub><sup>+</sup>. В работе [7] высказано предположение, что высокая эффективность селективного выделения ЭМФ из сажи полярным растворителем диметилформамидом (ДМФА) связана с восстановлением нейтральных ЭМФ до моноанионов диметиламином, образующимся при частичном разложении ДМФА. Взаимодействие молекул диметиламина с нейтральным ЭМФ приводит к их восстановлению до диамагнитных моноанионов M@C<sub>82</sub><sup>-</sup>, которые являются основной компонентой таких экстрактов.

Таким образом, в настоящее время отсутствует однозначное понимание процессов, происходящих в растворах фуллеренов и эндоэдральных фуллеренов при добавлении к ним молекул окислителя или восстановителя.

В настоящей работе исследовались изменения структурных и фотофизических характеристик коллоидного раствора Ho@C<sub>82</sub> при добавлении в раствор ЭМФ в ДМФА небольшого количества диэтиламина в качестве восстановителя.

Растворы ЭМФ в ДМФА в концентрационных пределах 10<sup>-5</sup>–10<sup>-4</sup> М формируют монодисперсный коллоидный раствор со средними размерами кластеров 200 нм [8]. Для приготовления такого исходного раствора навеска из 0.2 мг Ho@C<sub>82</sub> растворялась в 2 мл ДМФА. Расчетная величина концентрации Ho@C<sub>82</sub> при этом составила  $C = 1,74 \times 10^{-5}$  моль/литр. Далее к полученному раствору добавляли небольшое (от 3 до 5 мкл) количество диэтиламина. Затем проводили сравнительное исследование оптических и структурных свойств полученных растворов методами фотометрии, флуориметрии, атомно-силовой микроскопии (АСМ) и динамического корреляционного светорассеяния (ДКС).

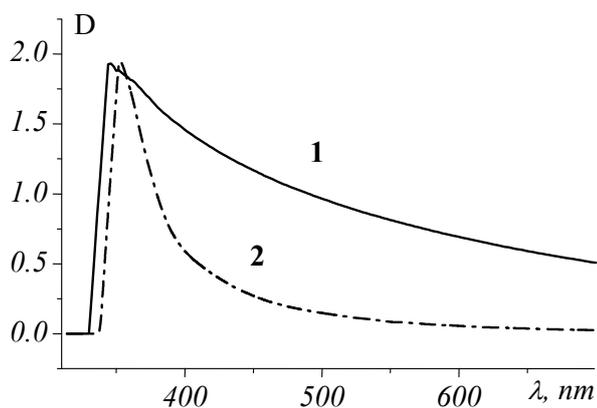


Рисунок 1 – Спектр поглощения раствора Ho@C<sub>82</sub> в ДМФА: (1)- исходный раствор; (2)- раствор с добавлением диэтиламина

На рисунке 1 представлен спектр оптической плотности исходного свежеприготовленного раствора (кривая 1) и спектр оптической плотности

этого раствора после добавления диэтиламина (кривая 2). При проведении измерений концентрация раствора (2) уменьшена на два порядка для того, чтобы его оптическая плотность в максимуме соответствовала пределам измерения спектрофлуориметра. Из рисунка 1 видно, что добавление диэтиламина приводит к сильному просветлению раствора в длинноволновой области и повышению поглощения в коротковолновой.

На рисунке 2 представлены спектры испускания: чистого растворителя ДМФА (кривая 1); исходного раствора  $\text{Ho@C}_{82}$  в ДМФА (кривая 2); раствора  $\text{Ho@C}_{82}$  в ДМФА с добавлением диэтиламина (кривая 3). В спектре испускания чистого ДМФА в области 400-450 нм присутствуют два пика комбинационного рассеяния (кривая 1). В спектре испускания раствора  $\text{Ho@C}_{82}$  в ДМФА пики комбинационного рассеяния сохраняются, но их интенсивность заметно падает. После добавления в раствор ЭМФ диэтиламина начинает формироваться люминесцентный сигнал, максимум которого приходится на 490 нм (кривая 3). При экспозиции раствора при комнатной температуре в течении 1-2 недель люминесцентный сигнал стабилизируется, достигая максимальной интенсивности. Сравнительный анализ интенсивности спектров испускания показывает, что квантовый выход люминесцентного сигнала в 4 раза больше квантового выхода сигнала комбинационного рассеяния ( $\approx 4 \cdot 10^{-6}$ ).

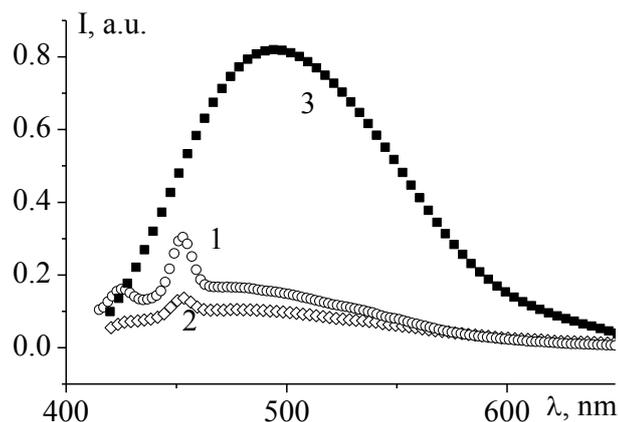


Рисунок 2 – Спектры испускания: (1)- растворителя ДМФА, (2)- раствора  $\text{Ho@C}_{82}$  в ДМФА, (3)- раствора  $\text{Ho@C}_{82}$  в ДМФА с добавлением диэтиламина. Длина волны возбуждения  $\lambda_{\text{EX}}=400 \text{ nm}$

В работе [9] для раствора  $\text{C}_{60}$  в пиридине наблюдали появление люминесценции в области 480 нм после ультрафиолетового облучения. Формирование люминесцентного сигнала связывали с образованием аддукта  $\text{C}_{60}$  с пиридином. Возможно, и в нашем случае происходит фотостимулированный процесс формирования небольшого количества аддукта ЭМФ с диэтиламином, что приводит к возникновению люминесценции в синезеленой области спектра.

Структурные изменения кластеров ЭМФ в ДМФА при добавлении в исходный раствор диэтиламина изучали методами ДСР и АСМ. На рисунке 3а приведен скан АСМ поверхности слюды, на которой сформированы кластеры ЭМФ путем полива поверхности раствором ЭМФ с последующим исключением

растворителя. Распределение кластеров по размерам близко к монодисперсному со средним значением 200 нм. На рисунке 3б приведена гистограмма распределения кластеров ЭМФ по гидродинамическим радиусам в исходном растворе ДМФА. Распределение также близко к монодисперсному и характеризуется средним значением гидродинамического радиуса 95 нм.

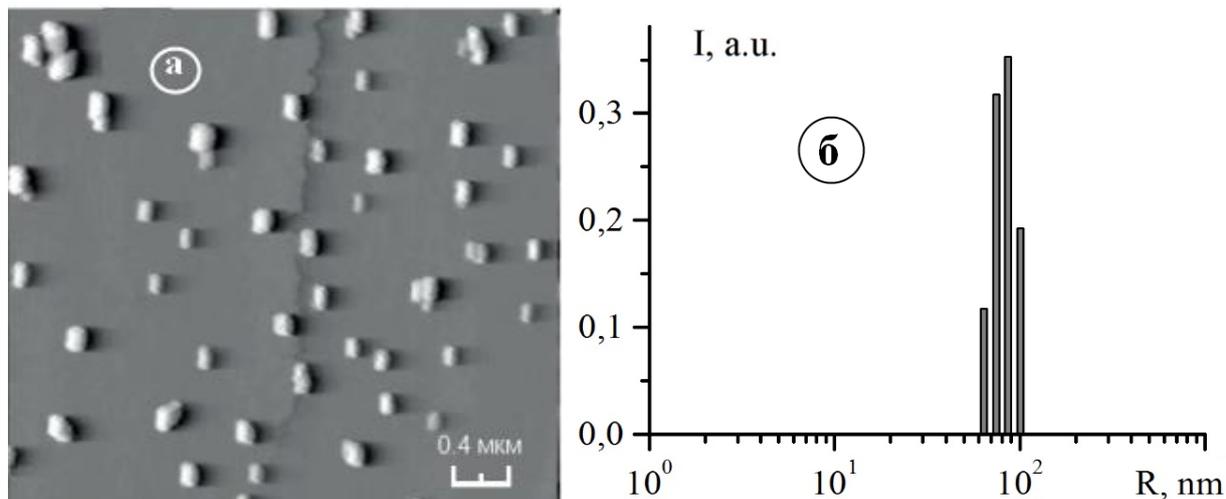


Рисунок 3 (а)- АСМ скан ЭМФ кластеров иммобилизованных из исходного раствора ЭМФ в ДМФА; (б) - распределение ЭМФ кластеров по гидродинамическим радиусам в исходном ДМФА растворе. Получено методом ДСР

На рисунке 4 приведены гистограмма распределения кластеров ЭМФ по гидродинамическим радиусам, полученная для раствора ЭМФ в ДМФА после добавлением диметиламина и АСМ скан поверхности слюды, политой таким же раствором. Гистограмма 4 б была зарегистрирована на первых минутах после добавления диметиламина. Видно, что исходное распределение кластеров ЭМФ уширяется и появляется сигнал рассеяния от мелких ( $R \approx 10$  нм) частиц. В дальнейшем сигнал светорассеяния ( $\lambda = 650$  нм) убывает до значений, характерных для чистого растворителя (3000 - 4000 имп. сек.), что делает невозможным корректное построение корреляционной кривой.

АСМ скан поверхности слюды, политой раствором ЭМФ в ДМФА с добавлением диметиламина (рисунок 4а), кардинально отличается от предыдущего. Кластеров больших (200 нм) размеров на нем практически не наблюдается. На поверхности слюды удастся обнаружить небольшое количество кластеров с большим разбросом по размерам (от 20 до 100 нм).

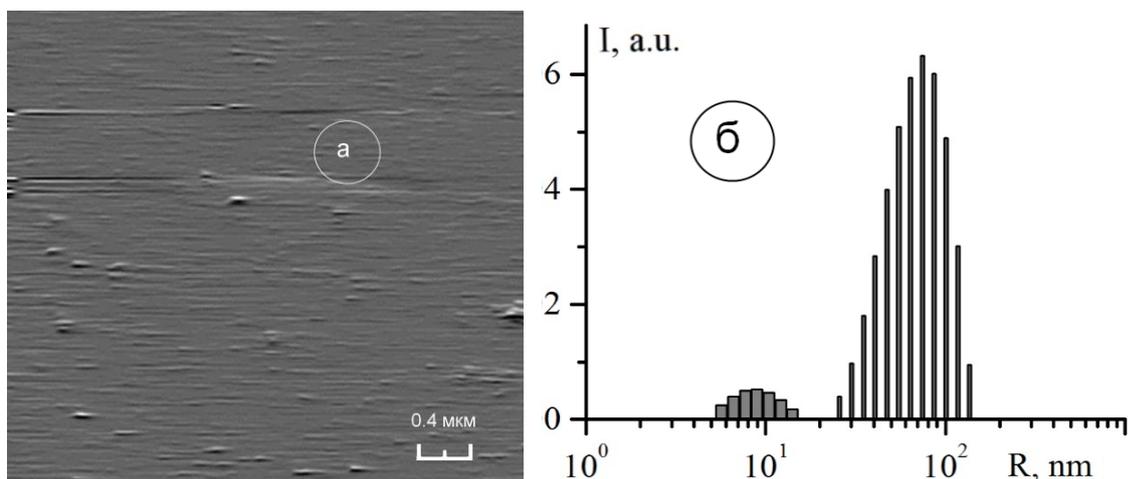


Рисунок 4. (а)- АСМ скан ЭМФ кластеров иммобилизованных на поверхности слюды из раствора ЭМФ в ДМФА с добавлением диэтиламина. (б) – гистограмма распределения ЭМФ кластеров в растворе по гидродинамическим радиусам после добавления диэтиламина.

Можно заключить, что добавление диэтиламина в коллоидный раствор ЭМФ в ДМФА инициирует процесс эффективной фрагментации кластеров ЭМФ. При этом происходит уменьшение оптической плотности раствора в области 500-700 нм и ее увеличение в области 300-400 нм, что, как показывают измерения по светорассеянию, тоже можно объяснить значительным уменьшением размеров коллоидных частиц.

В работе [10] показано, что  $C_{60}$  имеет реакционную способность в присоединении атомов диэтиламина в количестве до 10-13 радикалов. С другой стороны, согласно [7], можно предположить, что межмолекулярное взаимодействие между ЭМФ и диэтиламином происходит на уровне формирования комплекса с переносом заряда (КПЗ). На рисунке 5 приведены возможные схемы взаимодействия молекул  $Ho@C_{82}$  и диэтиламина.

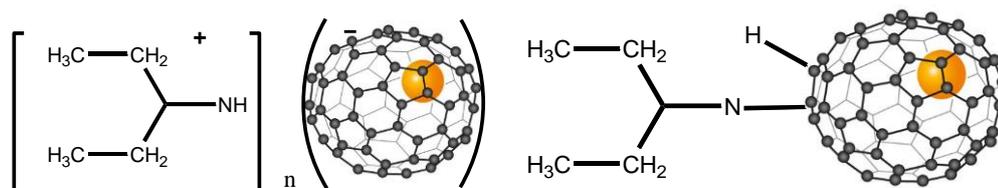


Рисунок 5. Возможные схемы взаимодействия ЭМФ с диэтиламином. Слева показана схема формирования КПЗ. Справа приведена схема формирования аддукта  $M@C_{82}[(C_2H_5)_2NH]$ .

Известно, что при формировании КПЗ молекулы ЭМФ переходят в анионное диамагнитное состояние, которое характеризуется отсутствием сигнала электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

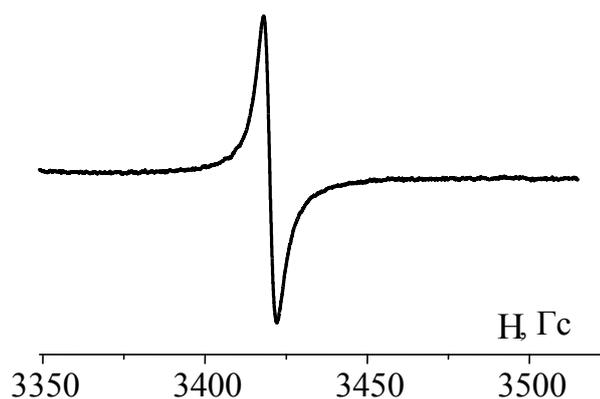


Рисунок 6. ЭПР спектр сухого экстракта Ho@C82.  
Полуширина ЭПР пика 4 Гс, g-фактор – 1.97.

На рисунке 6 приведен спектр ЭПР, полученный для сухого экстракта Ho@C<sub>82</sub>. При этом для исходного раствора Ho@C<sub>82</sub> и для раствора с добавлением диэтиламина ЭПР сигнала зарегистрировать не удалось. Из этого следует, что в наших растворах ЭМФ преимущественно присутствует в диамагнитном анионном состоянии, которое образуется по схеме формирования КПЗ.

Обнаружено, что добавление диэтиламина в коллоидный раствор ЭМФ в ДМФА инициирует процесс эффективной фрагментации ЭМФ кластеров. В исследуемом растворе, вероятно, имеет место фотостимулированный процесс формирования небольшого количества аддукта ЭМФ с диэтиламином, что приводит к возникновению люминесценции в сине-зеленой области спектра.

Для раствора Ho@C<sub>82</sub> в ДМФА с добавлением диэтиламина ЭПР сигнал не наблюдается, что указывает на присутствие в нем ЭМФ преимущественно в диамагнитном анионном состоянии. Следовательно, взаимодействие молекул Ho@C<sub>82</sub> и диэтиламина преимущественно происходит по схеме формирования комплекса с переносом заряда.

#### Список литературы

1. Popov A.A., Yang S., Dunsch L., "Endohedral Fullerenes", *Chem. Rev.*, 2013, 113 (8), pp. 5989–6113.
2. Mikawa M., Kato H., Okumura M., Narazaki M., Kanazawa Y., Miwa N., Shinohara H., "Paramagnetic Water-Soluble Metallofullerenes Having the Highest Relaxivity for MRI Contrast Agents"// *Bioconjugate Chem.*, 2001, 12, pp. 510-514.
3. Lu X., Feng L., Akasaka T., Nagase S., "Current status and future developments of endohedral metallofullerenes"// *Chem. Soc. Rev.*, 2012, 41, pp 7723–7760.
4. Дерягин Б.В., Чураев М.В., Муллер В.М. *Поверхностные силы.* — М.: Наука, 1985. — С. 3. — 398 с.
5. Kai Loon Chen and Menachem Elimelech. *Aggregation and Deposition Kinetics of Fullerene (C60) Nanoparticles.*// *Langmuir* 2006, 22, pp. 10994-11001

6. James W. Raebiger and Robert D. Bolskar. *Improved Production and Separation Processes for Gadolinium Metallofullerenes*//*J. Phys. Chem. C* 2008, 112, pp. 6605-6612.

7. S. P. Solodovnikova\_ and S. F. Lebedkinb *ESR spectra of endohedral metallofullerene Ce@C82 radical anions in dimethylformamide and pyridine*//*Russian Chemical Bulletin, International Edition*, 2003, Vol. 52, No. 5, pp. 1111—1113.

8. И.Е. Кареев, В.П. Бубнов, Э.К. Алиджанов, С.Н. Пашкевич, Ю.Д. Лантух, С.Н. Летута, Д.А. Раздобреев. *Кластерообразование эндоэдральных металлофуллеренов с Y, Gd, Ho в растворе и на поверхности твердого тела*// *Физика твердого тела*, 2016, том 58, вып. 9, С. 1859-1863.

9. Ji-xin Cheng, Yan Fang, Qun-jian Huang, Yi-Jing Yan 1, Xiao-Yuan Li. *Blue-green photoluminescence from pyridine-C60 adduct*// *Chemical Physics Letters*. 2000, 330. pp. 262-266.

10. J. Janaki\*, M. Premila, Padma Gopalan, V.S. Sastry, C.S. Sundar. *Thermal stability of a fullerene-amine adduct*// *Thermochimica Acta* (2000), 356, pp. 109-116

**РОЛЬ УЧЕБНОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА  
ПО ТЕПЛОФИЗИКЕ В ФОРМИРОВАНИИ ПК СТУДЕНТОВ,  
ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО НАПРАВЛЕНИЮ  
20.03.01 ТЕХНОСФЕРНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ**

**Анисина, И.Н., Волков Е.В., Четверикова А.Г.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург**

Знание теплофизических законов является одним из необходимых условий интенсивного развития промышленности, снижения материальных и энергетических затрат, повышения качества ее продукции и обеспечения экологической безопасности.

Научной базой теплофизики являются основные теоретические положения физики, химии, математики и других естественнонаучных дисциплин.

В совокупности с другими курсами базовой части профессионального цикла ФГОС ВО дисциплина «теплофизика» обеспечивает формирование профессиональных компетенций бакалавра: способностью использовать законы и методы математики, естественных, гуманитарных и экономических наук при решении профессиональных задач (ПК-21) и способностью применять на практике навыки проведения и описания исследований, в том числе экспериментальных (ПК-22) [1].

Реализация профессиональных компетенций возможна как во время выполнения научно-исследовательской работы студентами по базовым или специальным дисциплинам [2-4], так и во время выполнения лабораторных практикумов, предусмотренных учебным планом. В результате выполнения лабораторного практикума по теплофизике бакалавр должен:

- знать основные теплофизические характеристики, законы термодинамики, циклы холодильных и тепловых машин, основы теории теплообмена;
- уметь применять теоретические знания к решению конкретных задач теплопереноса;
- владеть навыками применения основных теплофизических законов к решению конкретных прикладных задач, навыками применения современных средств измерения величин, определяющих теплофизические процессы, методами экспериментального исследования теплофизических характеристик.

Применение функциональных материалов различного назначения требует экспериментального определения их теплопроводности, теплоемкости и температуропроводности. Тепловые измерения отличаются трудоемкостью и сравнительно низкой точностью [5]. Для совершенствования сертификации изделий по теплофизическим свойствам необходима разработка автоматизированных рабочих приборов и освоение гостированных методов. В процессе выполнения лабораторного практикума по теплофизике студенты знакомятся с двумя методами определения теплопроводности: металлов и диэлектриков [6-8]. Лабораторные исследования проводятся на учебно-лабораторном комплексе ЛКТ-8.

Идея определения коэффициента теплопроводности следующая. Между нагревателем и радиатором, отбирающим строго определенную порцию энергии в единицу времени, устанавливаем тепловой контакт только через исследуемый образец, размеры которого заданы заранее ( $S$  и  $\Delta x$ ). Перепишем уравнение Фурье в виде:

$$\frac{dQ}{dt} = k \frac{T_1 - T_2}{\Delta x} S, \quad (1)$$

где  $\frac{dQ}{dt} = W$  - тепловая энергия, которая передается через поперечное сечение  $S$  в единицу времени.

Согласно закону Джоуля-Ленца:

$$W = W_1 - W_2 = (I_1 U_1 - I_2 U_2), \quad (2)$$

где  $W_i$  - мощность, выделяющаяся в нагревателе при прохождении по нему тока  $I_i$  (при напряжении  $U_i$ ),  $W_2$  - мощность потерь.

Тогда коэффициент теплопроводности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{(I_1 U_1 - I_2 U_2) \Delta x}{S(T_1 - T_2)}. \quad (3)$$

Модуль ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ (рисунок 1,а) содержит нагреватель 1 с тепловыделяющим элементом 2 и радиатор 6 с вентилятором 7. Исследуемые образцы – металлические пластины 5 крепятся на нагревателе и радиаторе с помощью винтов 3 и гаек 4. В месте контактов образца с нагревателем и радиатором смонтированы датчики температуры. Гайки обеспечивают тепловой контакт датчиков с нагреваемым и охлаждаемым концами пластин-образцов. Все элементы модуля установлены на основании 8. Нагреватель, вентилятор и датчики температуры с помощью специального кабеля через разъем 9 подключаются к блоку ИСТ-4К (рисунок 1,б).

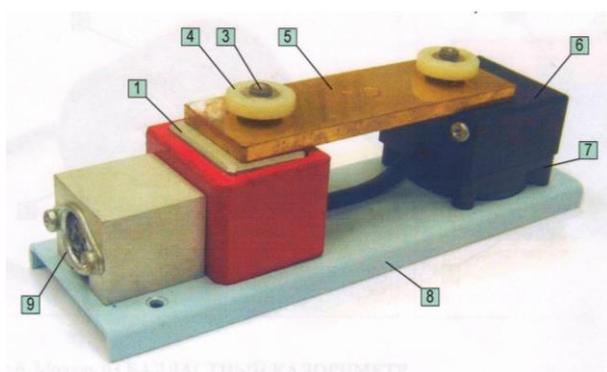


Рисунок 1, а – Модуль  
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ  
МЕТАЛЛОВ



Рисунок 1, б – Передняя панель ИСТ-4К

Блок ИСТ-4К содержит регулируемый блок питания, измеритель температуры нагревателя ( $T_1$ ) и радиатора ( $T_2$ ), напряжения ( $U_1$ ) и тока нагревателя ( $I_1$ ), режимы индикации прибора ИСТ-4 выбираются переключателем S1 ( $T_1, T_2, I_1, U_1$ ). Напряжение на нагревателе регулируется переключателем «Питание  $U_1$ ». В модуле предусмотрено устройство стабилизации температуры нагревателя, режим работы которого для температуры  $T_1$  выбирается ручкой «Термостат». О выходе стабилизатора на установленный режим сигнализируют светодиоды.

Определение теплопроводности образца основано на измерении мощности нагрева и установившейся разности температур двух точек образца, разнесенных на расстояние  $\Delta x = 65$  мм (эффективное расстояние между точками контакта датчиков температуры с образцом).

Чтобы уточнить значение тепловой мощности, поступающей в образец, необходимо определить мощность потерь в окружающей среде. Для этого к нагревателю вместо образца прикрепляют алюминиевую шайбу, а затем термостатируют при температуре  $T_1$ , соответствующей режиму измерения теплопроводности.

По величине напряжения и тока, необходимым для того, чтобы поддержать режим стабилизации  $T_1$ , определяют мощность потерь  $W_2$ . Затем по формуле (2) находят мощность потока тепла  $W$ , передаваемую в образец.

Для определения коэффициента теплопроводности диэлектриков используется модуль ПЕЧЬ-ТЕРМОСТАТ (рисунок 2,а), а также модуль БАЛЛАСТНЫЙ КАЛОРИМЕТР (рисунок 2,б).

Он содержит алюминиевый цилиндр 1, датчик температуры 2 и теплоизолирующий кожух 3. Датчик с помощью разъема 4 подключается ко входу Д2 блока ИСТ-4К (рисунок 1,б).

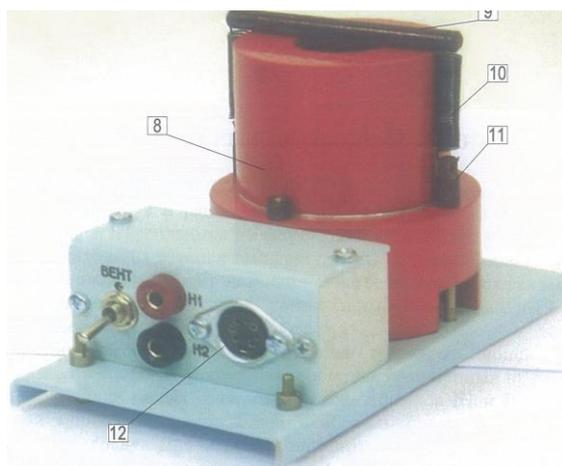


Рисунок 2, а – Модуль ПЕЧЬ-  
ТЕРМОСТАТ

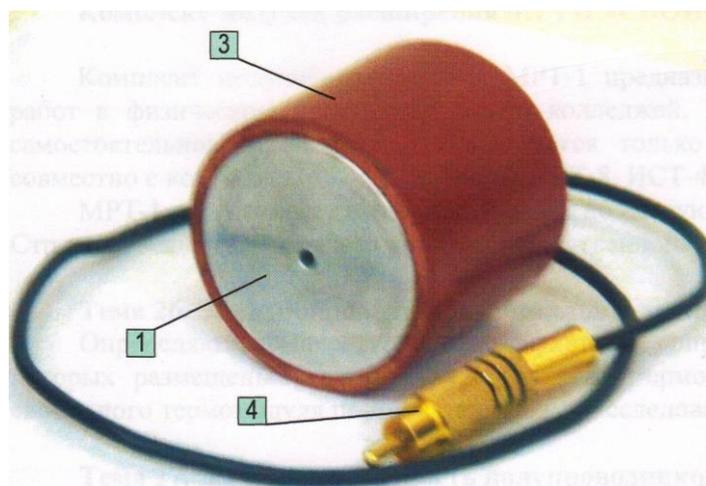


Рисунок 2, б - Модуль БАЛЛАСТНЫЙ  
КАЛОРИМЕТР

**На печь термостата, прогретую до температуры 60-80 °С, помещают образец (диск) из исследуемого материала.**

Сверху накладывают холодный балластный калориметр и прижимают его стержнем с пружинами. Проводят измерения температуры печи  $T_1$  и температуры цилиндра калориметра и интервалом 30-60 с.

По скорости нагрева цилиндра и его теплоемкости  $C$  определяют теплопроводность материала. Перепишем уравнение Фурье в виде:

$$C \frac{dT_2}{dt} = k \frac{T_1 - T_2}{h} S, \quad (4)$$

где  $T_1$  - температура печи, К;

$T_2$  - температура калориметра, К;

$h$  - толщина исследуемого образца, м;

$S$  - площадь контакта цилиндра с образцом (меньшее значение из площади торца цилиндра калориметра и площади сечения образца), м<sup>2</sup>;

$C = 125$  Дж/К – теплоемкость калориметра.

Отсюда коэффициент теплопроводности равен:

$$k = \frac{C(dT_2/dt)h}{S(T_1 - T_2)} \quad (5)$$

Таким образом, трудно переоценить роль учебного лабораторного практикума, осваиваемого бакалаврами, в формировании их профессиональных компетенций.

#### Список литературы

1. Приказ «Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 20.03.01 Техносферная безопасность (уровень бакалавриата)».

Режим доступа: [http://www.osu.ru/docs/fgos/vo/bak\\_20.03.01.pdf](http://www.osu.ru/docs/fgos/vo/bak_20.03.01.pdf)

2. Четверикова, А. Г. Роль физико-химической трансдукции на примере реакции Белоусова-Жаботинского в формировании ОПК студентов специальности «Аналитическая химия» [Электронный ресурс] / А. Г. Четверикова, Ф. Г. Узенбаев, Н. А. Чигринева, В. В. Абрамова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 3-5 февр. 2016 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург, 2016. – С. 3356-3361.

3. Четверикова, А. Г. Формирование исследовательских компетенций в области естественных наук у студентов, обучающихся по специализации «Аналитическая химия», при изучении курса общей физики [Электронный ресурс] / А. Г. Четверикова, В. Г. Узенбаев, Е. А. Осипова, А. И. Дюсенов // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 4-6 февр. 2015 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург, 2015. – С. 1117-1122.

4. Стрекаловская, А. Д. НИРС как средство реализации компетенций на примере бакалавриата профиля ИДМБ [Электронный ресурс] / А. Д. Стрекаловская, О. Н. Каныгина, Н. С. Ретенр, В. В. Шишкин, А. К. Сагындыкова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 4-6 февр. 2015 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург, 2015. – С. 1112-1116.

5. Корнев, Е.А. Измерение коэффициента теплопроводности строительных термоизоляционных материалов / Е. А. Корнев, В. М. Лелевкин, А. С. Лелюхин, М. Г. Петрушанский, А. Г. Четверикова // Измерительная техника. - 2000. - № 7. – С. 51-53.

6. Четверикова, А. Г. Лабораторный практикум по теплофизике : учебное пособие / А. Г. Четверикова, О. С. Кравцова, И. Н. Анисина, Е. В. Волков. – Оренбург : ОГУ, 2015. – 110 с. ISBN 978-5-7410-1223-9.

7. Четверикова, А. Г. Теплопроводность кирпичных глин Оренбуржья / А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина, А. А. Огерчук // Вестн. Оренбург. гос. ун-та. – 2014. - № 1 (162). – С. 218-222.

8. Старостин, А. А. Специальные температурные измерения / А. А. Старостин, Е. М. Шлеймович, В. Г. Лисиенко. - Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2016. — 168 с. ISBN 978-5-7996-1825-4.

## РАДИОЗОНДИРОВАНИЕ ВЕНЕРЫ

**Борцов М.А.**

**МАОУ «Нежинский лицей Оренбургского района», с. Нежинка**

Начиная с 1961 года советские учёные проводили планомерное изучение планеты Венера. К этой планете было запущено 16 советских автоматических станций, 8 из которых совершили посадку на поверхность Венеры.

Радиофизические исследования Венеры проводились радиолокационными и радиоастрономическими методами.

Радиолокационные методы позволяют исследовать характер поглощения, отражения, рассеяния и преломления радиоволн средой, в которой распространяется радиолокационный сигнал.

Радиоастрономическими методами исследуются характеристики радиоизлучения среды.

Успешные радиолокационные наблюдения Венеры около нижнего соединения 1961 года были проведены в институте радиотехники и электроники Академии наук СССР группой учёных, возглавлявшейся академиком В.А. Котельниковым.

Исследования с помощью автоматических станций осуществляются по различным схемам: пролётный вариант, вариант спутника планеты, вариант посадки на небесное тело.

Советский космический аппарат “Венера - 1” весной 1961 года пролетел на расстоянии  $10^5$  км от планеты. Приборы показали, что у планеты нет магнитного поля и радиационных поясов. Аппарат пролётного типа “Венера - 2”, прошел на расстоянии 24000 км от Венеры в феврале 1966 года.

В связи с запуском искусственных спутников планет стали возможны систематические исследования их атмосфер методом радиопросвечивания.

“Венера – 9, 10” в октябре 1975 года осуществили мягкую посадку на освещённой стороне планеты на расстоянии 2200 км друг от друга. Также были получены новые данные о рельефе планеты методом бистатической радиолокации.

Перед “Венерами – 15 и - 16” были поставлены новые задачи: провести радиолокационную съёмку северной полярной области. “Венера - 15” провела целый сеанс радиозондирования планеты. Для картографирования поверхности Венеры с помощью космических аппаратов “Венера - 15” и “Венера - 16” технически оказалось возможным создать радиолокационную станцию с синтезированной апертурой с фактическим разрешением 1–2 км.

Для получения необходимого пространственного разрешения применен метод радиолокации с «синтезом искусственного раскрыва антенны (с “синтезом апертуры”», который для исследования Венеры с космического аппарата использовался впервые.

Он основан на том, что расположенная на космическом аппарате антенна перемещается в пространстве, последовательно занимая позиции 1,2,...N (рис.1).

Обработывая отраженные сигналы одновременно, синтезируют антенну в  $N$  раз длиннее той, что была на космическом аппарате. Соответственно возрастает пространственное разрешение по направлению трассы космического аппарата ( $\Delta x$  на рис. 1). Разрешение, достигнутое обработкой сигналов радиолокационной станции космических аппаратов “Венера - 15” и “Венера - 16”, можно было получить при длине антенны 70 м, в то время как ее длина составляла всего 6 м. В направлении, перпендикулярном трассе, разрешение ( $\Delta y$  на рис. 1) достигалось, как обычно, за счет модуляции зондирующего сигнала, позволяющей разделять отраженные сигналы по времени их прихода к антенне.



**Рис.1. Принцип синтеза апертуры.**

Методы радиолокации позволили: определить величину астрономической единицы с очень большой точностью, о какой и не мечтали астрономы до применения этого метода:  $1a.e. = 149597870 \pm 1,5 км$ , радиус Венеры, определить расстояние до ближайшей к Земле точки поверхности планеты, определить период вращения Венеры, изучить физические свойства пород поверхности планеты.

На автоматических станциях, осуществлявших посадку на поверхность планеты Венеры, были проведены эксперименты по моностатической радиолокации.

При бистатической (двухпозиционной) радиолокации приёмник и передатчик, размещают в разных точках пространства. В этом случае приёмник может принимать не только прямой сигнал передатчика, но и сигнал, отражённый поверхностью планеты.

Широкое применение в космических исследованиях нашёл метод радиопросвечивания для изучения рефракционных свойств атмосфер планет. Цель радиопросвечивания – определение высотного профиля коэффициента преломления радиоволн атмосферой.

Радиолокационный метод исследований помог изучить характеристики Венеры.

Планета Венера очень похожа на Землю и по размерам, и по массе. Поэтому её часто называют двойником Земли. За свой исключительный блеск планета была названа в честь богини любви и красоты Венеры. Венера – внутренняя планета; её орбита лежит внутри орбиты Земли. Радиус Венеры 6051 км, масса Венеры

составляет 0,815 массы Земли, средняя плотность  $5240 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ , ускорение свободного падения на экваторе  $8,76 \frac{\text{м}}{\text{с}^2}$ , что составляет 0,89 земного.

Она совершает один оборот по орбите вокруг Солнца за 225 земных суток. Собственное вращение Венеры необычно: длительность одного оборота превышает венерианский год и равна 243 земным суткам, направление вращения противоположно вращению других планет. При этом солнечные сутки длятся около 117 дней. Средняя скорость движения Венеры по орбите  $34,99 \frac{\text{км}}{\text{с}}$ . Угол между плоскостями экватора и орбиты равен  $25^\circ$ , орбита планеты круговая, и поэтому на Венере не происходит смены времён года.

Исследования Венеры продолжаются. Для зондирования надоблачной дымки и верхней атмосферы до высоты 200 км был использован космический аппарат “Венера - Экспресс”, высокогорных областей. Взаимодействие верхней атмосферы планеты с набегающим солнечным ветром и процессы эрозии атмосферы исследует эксперимент АСПЕРА, который регистрирует плотность и потоки молекул, ионов и электронов вблизи планеты.

Аппарат “Венера - Экспресс” был запущен 9 ноября 2005 года российской ракетой-носителем “Союз” с космодрома Байконур. В начале апреля 2006 года аппарат достиг окрестностей Венеры и перешёл на орбиту искусственного спутника планеты.

“Венера - Экспресс” открыл новую эру в исследовании загадочной Венеры. За ней в 2010 году последовал космический аппарат под названием “Планета - С”, разработанный японскими специалистами. Он работал на экваториальной орбите и выполнил детальные метеорологические исследования при помощи 5 фотокамер, настроенных на различные спектральные диапазоны.

Радиолокация – высшее достижение радиотехники. Совершенствование космической техники и бортовой радиофизической аппаратуры позволяет прогнозировать значительное увеличение вклада радиофизических исследований в общий арсенал космических средств изучения удалённых от Земли планет.

На примере данной планеты ярко проявилась эффективность использования автоматических космических аппаратов, по существу открывших человечеству уникальный мир Венеры.

В нашей стране осуществлялась планомерная программа зондирования Венеры. Применение методов радиопросвечивания для исследования атмосферы Венеры показали высокую эффективность. Этот метод хорошо дополняет данные, полученные ранее с помощью спускаемых аппаратов.

*Список литературы*

1. Крупенио Н.Н. *Радиофизические исследования планет.* – Москва: Наука, 1978. – 64 с.

2. Кузьмин А.Д. *Радиофизические исследования Венеры.* – Москва: Наука, 1985. – 92 с.

3. Ржига О.Н. *Новая эпоха в исследовании Венеры.* – Москва: Знание, 1988. – 108 с.

## **РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ ИНТЕРЕСОВ НА УРОКАХ ФИЗИКИ В 5-6 КЛАССАХ**

**Гладышева Ю.А.**

**Оренбургский государственный университет, г. Оренбург**

Одной из задач любого пропедевтического курса в школе является формирование интереса у учащихся к данному предмету. Направленность раннего изучения должна способствовать возникновению желания изучать этот предмет в дальнейшем, а также осознанию перспектив науки для продолжения образования и профессионального становления.

Изучение физики в 5-6 классах позволяет ненавязчиво сформировать представления о возможностях физики как науки, ее значимости, а самое главное – доступности понимания сложного учебного материала.

Пропедевтический курс физики проводится по авторской программе А.Е.Гуревич, Д.А.Исаева, Л.А. Понтак «Естествознание», при этом учениками используется учебник для 5-6 классов Гуревич А.Е. «Естествознание», а также рабочая тетрадь на печатной основе.

Психологические особенности детей 10-12 лет таковы, что восприятие информации не должно быть теоретически перегружено, поэтому при изучении учебного материала необходимо ориентироваться на познавательную активность учащихся. Вследствие этого введение пропедевтического курса позволяет ненавязчиво сформировать у учащихся знания о явлениях окружающего мира, что не требует владения сложным математическим аппаратом, но способствует развитию внимания и наблюдательности у детей.

Согласно возрастной периодизации развития психики, предложенной Д.Б. Элькониным [1], возраст учеников, на который приходится введение пропедевтического курса по физике - это начало среднего школьного возраста. Этот период характеризуется некоторым ослаблением мотивации учебной деятельности, поэтому так важно на уроках формировать положительную мотивацию к изучению физики. В своих трудах Л.И. Божович [2] рассматривает деление мотивов на две категории, первая из которых связана с содержанием самой учебной деятельности, процессом ее выполнения. Именно тут на первый план выходят познавательные интересы учащихся и их потребность в интеллектуальной активности.

В этом возрасте школьники проявляют интерес к различным фактам окружающего нас мира, поэтому так важно на данном этапе помочь не просто накопить знания, а помочь им их правильно переработать и осмыслить.

Ученики начального среднего школьного возраста готовы на качественном уровне понять многие явления природы, изучать которые им предстоит в старших классах.

Введение раннего изучения физики помогает ребятам устанавливать причинно-следственные связи физических явлений в окружающем мире, а также их объяснению с научной точки зрения. Это позволяет прежде всего

понять важность изучения данной дисциплины в школе: «Физика вокруг нас!». Способствует пониманию того, что даже в этом возрасте учащиеся могут объяснить то, что вокруг них существует, несмотря на то, что формирование мировоззрения у них еще на одной из первых ступеней.

Для успешного обучения деятельность обучающихся должна быть активной, в ходе которой приобретаются знания и навыки. Поэтому при проведении занятий возможно сочетание различных видов деятельности на занятиях. Познавательная, практическая, организационная и другие виды деятельности направлены на формирование целостного представления о природе, что способствует ознакомлению учащихся с основными явлениями окружающего мира, встречающимися в повседневной жизни.

В возрасте 10-12 лет многие учащиеся тяжело воспринимают абстрактные понятия, поэтому при объяснении таких разделов, как «строение атома, электрический ток, электрическое и магнитное поля, давление», можно рассказывать как люди об этом догадались, подкреплять видеофрагментами опытов, небольшими мультимедийными материалами, способствующими наглядному представлению данного учебного материала.

Именно знакомство школьников этого возраста с физическими явлениями, в которых проявляются свойства тел, с темами, связанными со строением вещества, движением и взаимодействием частиц вещества, не только углубляют данные понятия, но и структурируют представления о физической картине мира. Такое постепенное углубление представлений о природе взаимодействий позволяет расширить кругозор и научить мыслить абстрагировано.

Даже простой на первый взгляд способ познания мира, такой как наблюдение, требует глубокого осмысления этого процесса учеником 10-12 лет. Поэтому перед применением данного метода как научного, можно обговорить план действий.

Например, задавая следующие наводящие вопросы:

- Что вы будете наблюдать? (Способствует уточнению объекта наблюдения)

- Что вы хотите узнать? (Помогает осмыслить цель наблюдения)

- Каков план проведения наблюдения? (Требует записи в тетрадь)

- Когда будете осуществлять фиксацию наблюдаемых явлений - в процессе наблюдения или после его окончания?

- Как будете осуществлять фиксацию наблюдаемых явлений - визуально или с помощью приборов?

После проведения наблюдения необходимо проговорить все признаки наблюдаемого явления или процесса, что нового было обнаружено, а что уже было известно, как можно описать наблюдаемое явление или процесс?

Четкий план действий, проговаривание каждого пункта позволяют ученику этого возраста не просто правильно организовать процесс наблюдения изучаемого явления, но и не допустить ошибок при дальнейшем его описании.

Применение таких методов и приемов, как физический эксперимент и лабораторные занятия, показывает многообразие природных явлений и процессов, их взаимосвязь, что способствуют не только взглянуть на окружающий мир глазами экспериментатора, но и позволяют без перегрузки занимательно раскрыть место физики в естественно-научном образовании в школе.

Большое количество разнообразных опытов и экспериментов, которые можно проводить вместе с детьми это, прежде всего активный способ изучения физики в пропедевтическом курсе средней школы. Это позволяет расширить представления о мире у обучающихся, способствует интеллектуальному и творческому развитию школьника.

Проведение эксперимента учениками дает им возможность самим делать «открытия», позволяет понять причины различных физических явлений, дает возможность убедиться, что даже у самых обычных предметов могут проявляться необычные свойства. Выполнение самых простых опытов позволяет увлекательно провести занятие, вызвав интерес и дальнейшее желание изучать физику в старших классах. А проведение домашних опытов способствует развитию интеллектуальных и творческих способностей при приобретении практического опыта, делает науку физику понятной и интересной, подталкивают учащихся к активному познанию мира.

Проведение таких, на первый взгляд взрослого человека, простых, но являющимися достаточно сложными в силу возрастных особенностей, тем не менее увлекательных опытов помогают сформировать интерес и поверить в собственные силы. Возможны следующие опыты, которые учащиеся могут проводить в классе, а некоторые потом и дома - определение цены деления шкалы различных приборов, измерение объёмов тел правильной и неправильной формы, измерение массы на рычажных весах, измерение температуры воды с помощью термометра, наблюдение диффузии, определение давления тела на опору, и т.д.

После изучения курса физики в 5-6 классах у учеников должны быть выработано целостное восприятие природы, сформированы первые представления о физических явлениях, об атомно-молекулярном строении вещества, о планетарной модели строения атома, а также сформированы умения обращения с простейшим физическим оборудованием и умения производить простейшие измерения.

Создание развивающей образовательной среды, направленной на стимуляцию активных форм познания, таких как наблюдение и опыт, является одним из условий формирования и развития познавательной активности учащихся.

Введение пропедевтического курса физики прежде всего позволяет не передавать готовые знания ученикам, а организовывать такую познавательную деятельность, в процессе которой у ребят формируется радость познания и открытия нового, так как ученики сами совершают "открытия", сами путём решения проблемных задач узнают что-то новое. А это ведет к формированию

у детей положительной познавательной мотивации, за счет которой возникающие в процессе обучения трудности при изучении предмета преодолеваются, что ведет к развитию волевой сферы учеников.

При проведении домашних опытов в отличие от экспериментов, проводимых в классе, возможно применение подручных средств. Это помогает пониманию, что всегда можно при возникновении различных практических задач, пользоваться тем, что есть под рукой, совсем не похожим на учебное, оборудование, имеющееся в школе, и при этом проводить опыт и получать заведомо планируемый результат. Именно поэтому так важны домашние эксперименты. К тому же они позволяют выработать умение самостоятельно планировать ход опыта, подобрать оборудование, рассматривая обыденные предметы и материалы, встречающиеся в быту как научную лабораторную базу. В свою очередь это является одним из залогов формирования успешной положительной мотивации обучения, направленной на активизацию познавательной деятельности и одним из способов развития мышления.

Возможны следующие домашние эксперименты: определение объема небольшой картофелины и вычисление ее массы, исследование зависимости скорости испарения жидкости от различных факторов, и др. После проведения опытов ученик отвечает на вопросы в рабочей тетради и делает соответствующие выводы. Такие задания помогают учащимся понять значимость самостоятельной работы на всех ее этапах, включая осмысление и получение результатов экспериментальной деятельности, направленной на углубление и пополнение знаний.

На уроках физики в 5-6 классах можно использовать игровую деятельность не только при изучении нового материала, но и проводя обобщающие занятия, на которых класс делится на группы, каждая из которых проходит квест по заданной теме, прохождение каждой ступени которого еще раз закрепляет изученный материал. Познавательный интерес учащихся формируется при составлении кроссвордов по пройденной учебной теме, или при написании сказки.

После изучения пропедевтического курса физики у обучающихся формируются следующие умения:

- проводить наблюдения и умение описать их;
- задавать вопросы и находить ответы на них опытным путем, т.е. планировать проведение простейших опытов и исследований;
- производить простейшие прямые измерения величин при помощи приборов, наиболее часто используемых в повседневной жизни.

Результатом введения первой ступени изучения физики в 5-6 классах является сформированность понятийного аппарата, осмысление различных физических явлений и понимание их причин, готовность к самостоятельному планированию и проведению простейших экспериментов, что способствует формированию познавательного интереса к данному предмету и желанию дальнейшего изучения школьного курса физики на следующей ступени в 7-9 классах.

### *Список литературы*

1. Эльконин, Д.Б. *К проблеме периодизации психического развития в детском возрасте // Хрестоматия по возрастной психологии. Учеб.пособие для студ.: Сост. Л.И.Семенюк. Под ред. Д.И.Фельдштейна: издание 2-е, дополненное. – Москва : Институт практической психологии, 1996. – 304 с.*

2. Божович, Л.И. *Проблемы развития мотивационной сферы ребенка / Л.И. Божович // Изучение мотивации поведения ребенка и подростков. / Под ред. Л.И.Божович, Л.В.Благонадежиной – Москва, 1972. – 352 с.*

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МЕЗОСТРУКТУРЫ ДИСПЕРСНЫХ ГЛИНИСТЫХ ПОРОШКОВ

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

Создание керамических материалов со стабильными физико-механическими свойствами по-прежнему требует разработки новых методов их исследования. Основные свойства материалов закладываются уже на стадии формирования структуры керамической массы: минералогического, химического и дисперсного состава частиц, их удельной поверхности и качества самой поверхности. Состояние керамической массы обусловлено как случайными изменениями параметров самой системы, так и внешними воздействиями. Адекватно оценить реальные процессы, происходящие в дисперсной системе, возможно, если выбрать такие методы оценки ее морфологии, которые охарактеризуют не только отдельные элементы, но и свойства системы в целом.

Традиционные методы количественной оптической и электронной микроскопии не способны решить эти задачи, в то время как современные статистические методы, базирующиеся на подходах синергетики, теории диссипативных структур [1], позволяют охарактеризовать не только мезоструктуру поверхности образцов, но и процессы ее изменения-агломерации или диспергирования - под действием внешних воздействий.

Целью данной работы является определение возможности использования фрактального- и вейвлет-преобразования для сравнительного анализа мезоструктур порошков природной глины по оптическим изображениям поверхности образцов.

Объектами исследования служили порошки трех фракций природной монтмориллонит содержащей глины с размерами частиц 40, 160 и 630 мкм (рисунок 1).

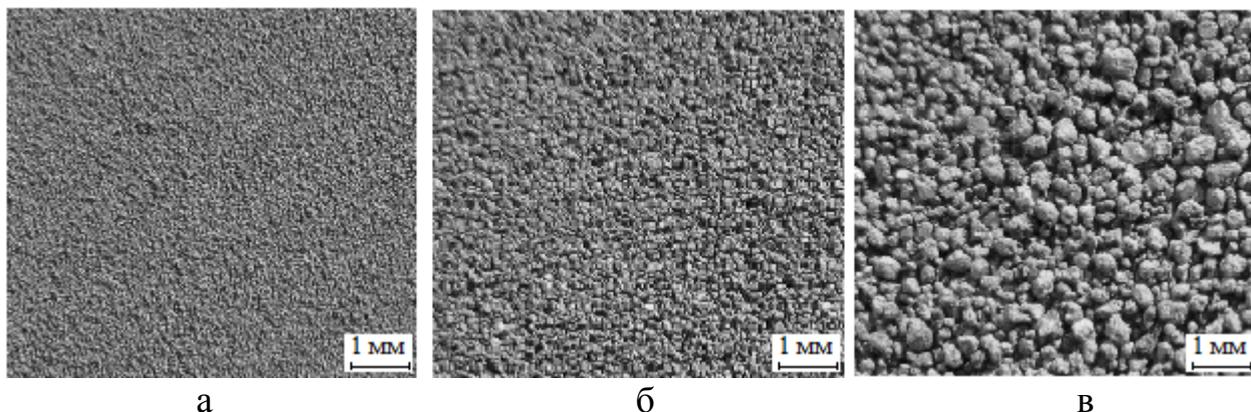


Рисунок 1- Фотографии монодисперсных фракций образцов с размерами частиц 40 (а), 160 (б), 630 (в) мкм

Фрактальный анализ морфологии дисперсных образцов проводили с использованием программы ImageJ и дополнительного модуля FracLac 2.5 [2]. Определение фрактальной размерности выполняется методом сеток, при котором изображение объекта разбивается на множество ячеек заданных размеров. Сканирование изображения дисперсных систем осуществляется за несколько циклов, при этом на каждом последующем цикле размеры ячеек сетки увеличиваются. Фрактальная размерность  $D_s$  анализируемого объекта вычисляется по методике [3].

Значимым параметром при описании стохастических фрактальных структур является лакуарность. Термин «лакуарность» был введен Мандельбротом [4] в качестве меры неоднородности заполнения пространства объектом. Мерой лакуарности ( $\Lambda$ ) является изменение плотности изображения образца при сканировании сеткой с ячейками различных размеров. Для ее расчета используется методика [5].

Зависимость фрактальной размерности и лакуарности от размеров частиц монодисперсных порошков приведены на рисунке 2.

Как известно, фрактальная размерность характеризует форму поверхности объекта и представляет собой показатель меры заполнения пространства фрактальной структурой. Уменьшение фрактальной размерности связано, по нашему мнению, с ростом размером частиц, и, как следствие уменьшением показателя меры заполнения пространства фрактальной структурой. Изменение величины  $D_s$  влечет за собой одновременное изменение лакуарности. Чем выше лакуарность, тем больше в изучаемом распределении имеется пустых областей.

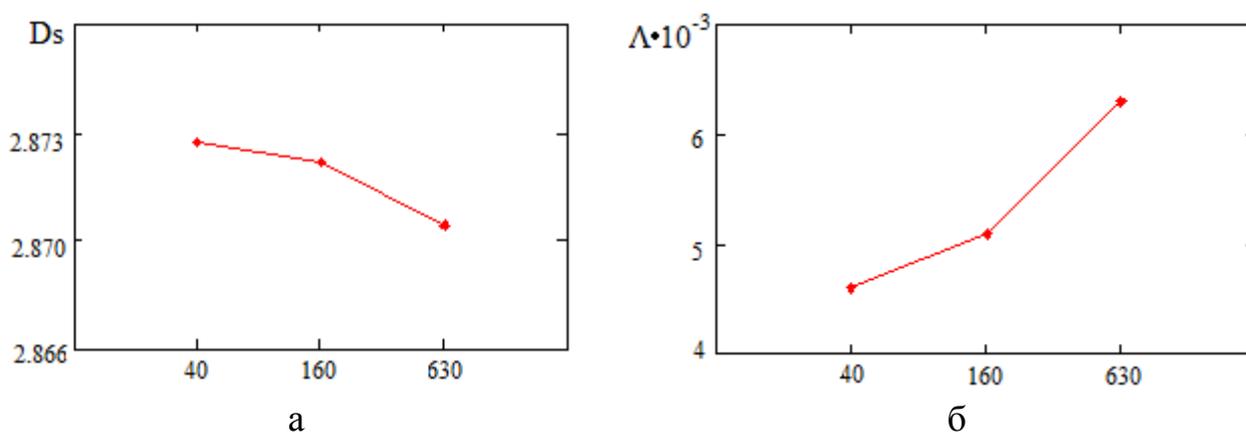
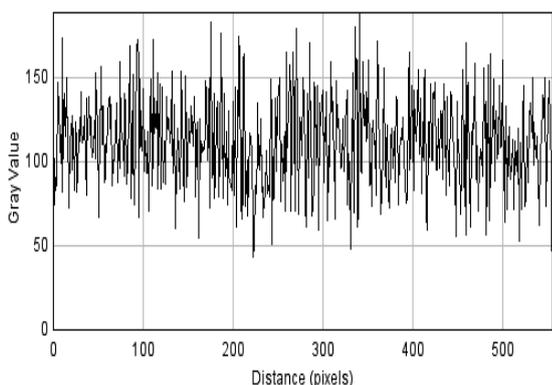


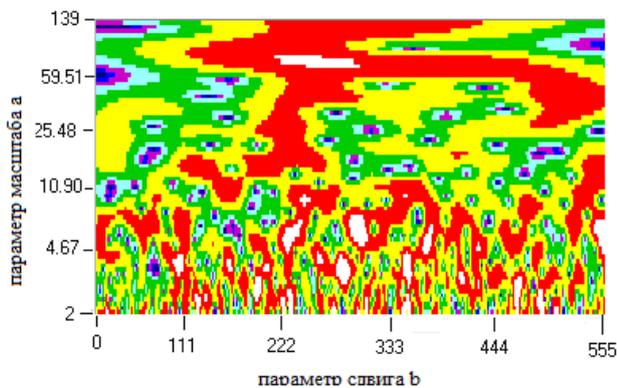
Рисунок 2 – Зависимость фрактальной размерности (а) и лакуарности (б) от размеров частиц монодисперсных порошков

К числу вероятностных подходов для анализа свойств диссипативных систем относится получивший широкое распространение вейвлет-анализ. Его основу составляет разложение сигнала по функциям, называемым базисными вейвлетами. Вейвлеты представляют собой особые функции в виде коротких волн с нулевым интегральным значением и с локализацией по оси координат, способных к сдвигу по этой оси и масштабированию (растяжению/сжатию).

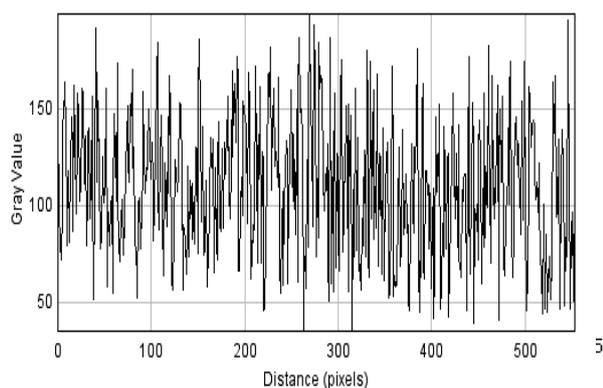
Результатом вейвлет – преобразования является спектрограмма  $W(a, b)$  – функция двух переменных: параметра так называемого «масштаба» вейвлета –  $a$  и параметра  $b$ , условно называемого «сдвигом» вейвлета. Спектрограмма представляет значения вейвлет – коэффициентов в плоскости масштаб – координата.



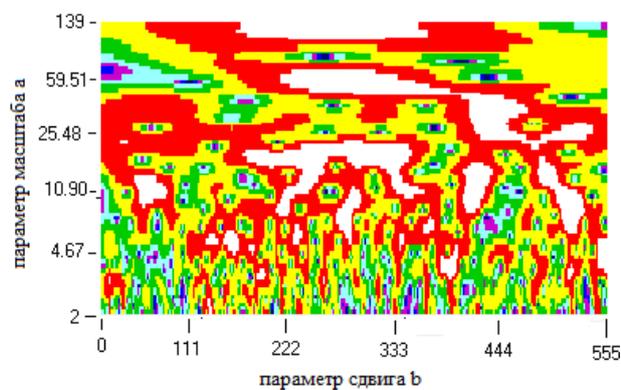
а



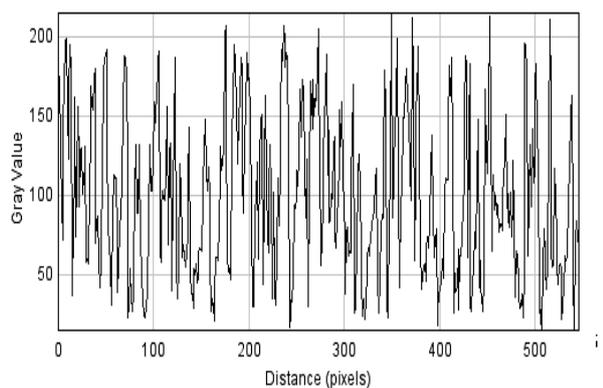
а



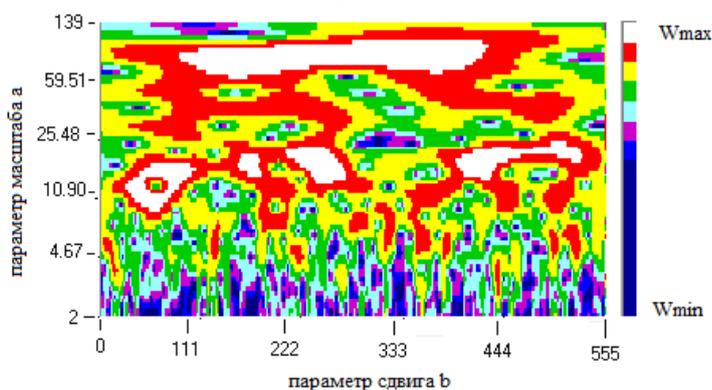
б



б



в



в

Рисунок 3 – Профили сечения поверхностей  
размеры частиц монодисперсных образцов: а - 40, б - 160, в - 630 мкм

Рисунок 4 – Вейвлет-спектрограммы поверхностей

В нашем случае по оси абсцисс отложена координата вдоль сечения изображения образца, измеряемая в пикселях. По оси ординат откладывается величина масштабирования базисного вейвлета. Многие исследователи

называют подобный вейвлет-анализ "математическим микроскопом" [6]. Если применить эту аналогию, то параметр сдвига  $b$  устанавливает точку фокусировки микроскопа, масштабный коэффициент  $a$  – его увеличение [7].

При помощи программы ImageJ получали профили поверхности в виде зависимости интенсивности точек цифрового изображения от пространственной координаты, представленные на рисунке 3. Вейвлет – анализ полученных профилей проводили с использованием программы Spectra Analyzer. Преобразования проводились на основе Morlet – вейвлета. В результате были получены спектрограммы поверхностей монодисперсных систем частиц, несущие информацию о распределении неоднородностей различных масштабов на поверхности образцов (рисунок 4).

При этом внизу спектрограммы расположены малые значения масштаба, представляющие детальную картину рельефа, а сверху – большие значения, дающие обобщенную картину [4].

Значение коэффициентов вейвлет – преобразования в точке тем больше, чем сильнее корреляция между вейвлетом данного масштаба и поведением профиля в окрестности этой точки. Величина коэффициентов корреляции определяет цвет соответствующей области вейвлет – спектрограммы: белый цвет соответствует - максимуму, а темно синий – минимуму совпадений.

Вейвлет-спектр первой фракции (рисунок 4а) показывает, что корреляция между профилем поверхности и вейвлетом является достаточно сильной на первом и втором масштабе. Это соответствует морфологии образца, состоящего из мелких частиц (40 мкм). На спектрограмме второй фракции (рисунок 4 б) вейвлет-коэффициенты на первом масштабе несколько уменьшаются (больше лиловых и бирюзовых участков), а на втором и третьем масштабах увеличиваются, то есть поверхность становится крупнозернистой. На вейвлет-спектрограмме третьего образца образце (рисунок 4 в) на малых значениях масштаба появляются темно-синие участки, то есть полностью отсутствует корреляция между профилем поверхности и вейвлетом данного масштаба. Напротив, значения вейвлет-коэффициентов увеличиваются на третьем и четвертом масштабах (больше белого и красного цвета). Это соответствует морфологии поверхности с размером частиц 630 мкм.

Таким образом, используя методы фрактального и вейвлет-анализов можно отслеживать динамику изменения в мезоструктуре дисперсных систем и отношения структурных параметров при большой выборке измерений.

#### Список литературы

1 Ролдугин, В.И. Свойства фрактальных дисперсных систем / В.И. Ролдугин // *Успехи химии*. – 2003. – № 72 (11). – С. 1027-1054.

2. Программный модуль FracLac 2.5 [Электронный ресурс]: Режим доступа <https://imagej.nih.gov/ij/plugins/fracLac/FLHelp/Introduction.htm> – 02.12.2016.

3. Каныгина, О. Н. Фрактальный подход к анализу поверхностей керамических материалов / О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова, М. М. Филяк, А.А

*Огерчук // Стекло и керамика. – 2015. – № 12. – с. 11 – 16.*

*Kanygina, O. N. Fractal Approach to the Analysis of Ceramic Surfaces / O. N. Kanygina, A. G. Chetverikova, M. M. Filyak, et al. // Glass and Ceram. – 2016. – Vol. 72, Iss. 11. – P. 444-448.*

4. *Мандельброт, Б. Фрактальная геометрия природы: перевод с английского / Б. Мандельброт. – М. : Институт компьютерных исследований, 2002. – 656 с. – ISBN 5-93972-108-7.*

5. *Филяк, М. М. Фрактальный формализм в применении к анализу СВЧ-модификации нативной глины / М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина, Л. С. Багдасарян // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2016. – т. 18. - № 4. – С. 578-585.*

4. *Астафьева, Н.М. Вейвлет-анализ: Основы теории и примеры применения / Н.М. Астафьева // Успехи физических наук. – 1996. – т. 166, № 11. – С. 1145-1170.*

7. *Филяк, М.М. Анодирование алюминия в щелочных электролитах: кинетика образования, морфология и свойства пленок Автореферат дисс. ... канд. техн. наук: 01.04.07. – Ульяновск: ООО ИПК Университет, 2014. – 22с.*

# **ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ ПО ВОЗОБНОВЛЯЕМЫМ ИСТОЧНИКАМ ЭНЕРГИИ**

**Кирин И.Г.**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет», г. Оренбург**

В понятие возобновляемые источники энергии принято включать следующие формы энергии: гидроэнергия, ветровая, солнечная, геотермальная, энергия морских волн, течений, приливов и океана, энергия биомассы, низкопотенциальная тепловая энергия и другие "новые" виды возобновляемой энергии. Условно принято разделять возобновляемые источники энергии на две группы: традиционные - это гидравлическая энергия, преобразуемая в электроэнергию ГЭС мощностью более 30 МВт; энергия биомассы, используемая для получения тепла традиционными способами сжигания (дрова, торф и некоторые другие виды печного топлива); геотермальная энергия и нетрадиционные - это солнечная, ветровая, энергия морских волн, течений, приливов и океана, гидравлическая энергия, преобразуемая в используемый вид энергии малыми и микроГЭС, энергия биомассы, не используемая для получения тепла традиционными методами, низкопотенциальная тепловая энергия и другие "новые" виды возобновляемой энергии.

В последние годы тенденция роста использования возобновляемых источников энергии становится достаточно явной и соответствует высшим приоритетам и задачам энергетической стратегии России.

В работе представлен разработанный лабораторный практикум по возобновляемым источникам энергии.

Разработанный лабораторный практикум включает десять следующих специально разработанных для практикума работ: 1.Лабораторная работа «Солнечная электростанция» [2]; 2.Лабораторная работа «Ветрогенератор» [3]; 3. Лабораторная работа «Гибридные ветро-солнечные системы»; 4. Лабораторная работа «Солнечный коллектор» [4]; 5. Лабораторная работа «Тепловой насос», 6. Лабораторная работа «Комбинированные системы с солнечными коллекторами»; 7. Лабораторная работа «Микро ГЭС»; 8. Лабораторная работа «Приливные электростанции»; 9. Лабораторная работа «Изучение контроллера»; 10. Лабораторная работа «Изучение инвертора».

Условно лабораторный практикум можно разделить на следующие группы: лабораторные работы, посвященные изучению принципа действия электростанций построенных на основе возобновляемых источников энергии (первые восемь работ) и лабораторные работы посвященные изучению важнейших составляющих этих электростанций, без которых их работа невозможна (последние две работы).

При разработке лабораторного практикума особое внимание уделялось элементной базе, на которой могут быть построены работы. Прежде всего, предпочтение отдавалось выпускаемому промышленностью учебному оборудованию [5]. Элементы и узлы, входящие в состав лабораторных установок, разработаны таким образом, чтобы они могли быть изготовлены самостоятельно с использованием распространенных и доступных материалов и компонент. Так, в качестве солнечной батареи использованы выпускаемые промышленные модули, в качестве генератора в лабораторных работах по изучению ветровой электрической станции, микро ГЭС, приливных электростанций, использованы генераторы тока для транспортных средств. В лабораторных работах по изучению тепловых насосов используются циркуляционные насосы систем отопления.

Лабораторные работы практикума позволяют в достаточно широких пределах варьировать объем выполняемых заданий и их сложность, а также выполнять исследовательские задания.

Лабораторный практикум может быть использован в составе различных школьных элективных курсов, например, таких как «Возобновляемые источники энергии», «Энергосбережение», «Физическая экология», «Экологические проблемы и энергоресурсосбережение», в вузе в лабораторных практикумах по физике и в спецкурсах для студентов, обучающихся по направлениям «Электроэнергетика», «Экономика», в составе спецпрактикумов например, по таким дисциплинам, как «Малая энергетика» [6], «Экономика предприятий городского хозяйства», «Экономика теплосбережения в городском хозяйстве» [7], «Энергия и окружающая среда» [8].

Использование разработанного лабораторного практикума в курсе физики обусловлено тем, что проблемы энергосбережения, использование современных отопительных систем на основе «тепловых насосов» в этом курсе практически не анализируются. Например, основное внимание курса термодинамики отводится анализу работы тепловых двигателей и холодильников, а «тепловые насосы» не рассматриваются. Лабораторный практикум восполняет рассмотрение этого и других вопросов, затрагивающих физическую основу энергосбережения.

Предлагаемый лабораторный практикум может быть использован и на курсах повышения квалификации, направленных на совершенствование экспериментальной компетенции учителей. В этом случае, лабораторный практикум обеспечивает подготовку учителей к требованиям ФГОС. Согласно ФГОС реализация основной образовательной программы при изучении физики должно обеспечивать получение основ физических знаний, формирование теоретических и экспериментальных умений, освоения основ метода научного познания, развития физического мышления. Для практической реализации этих задач, теоретическую и экспериментальную деятельность на уроках физики необходимо дополнять внеурочной проектной деятельностью школьников не только по учебному исследованию физических явлений, но и их практическому

применению. Разработанный лабораторный практикум такую возможность предоставляет.

Кроме того, лабораторные работы практикума могут быть использованы для выявления и контроля уровня сформированности знаний по курсу «Физика» у студентов.

Чтобы оценить деятельность студента и его уровень усвоения материала, используется интерактивный способ [9]. В этом случае материал лабораторного практикума используется для контроля реконструктивного уровня деятельности обучающегося, его продуктивного действия.

Для практической реализации этой задачи, на базе материала лабораторного практикума формируются нетиповые качественные задачи или предлагается подробное описание эксперимента.

Такие задания предлагают поиск, формирование и реализацию идеи решения, что всегда выходит за пределы прямого формального опыта и требует от обучающегося варьирования условий задания и усвоенной ранее информации.

Это дает возможность осуществлять контроль не только теоретических знаний по физике и умения применять их на практике, но и проконтролировать умение формулировать проблему, выдвигать гипотезу, составлять теоретические модели, иметь возможность к абстракции, интуитивному анализу, то есть в конечном счете оценить компетенции, которыми студент овладел в процессе обучения курса физики.

#### *Список литературы*

1. Дьяков А.Ф. *Малая энергетика России. Проблемы и перспективы.* - М.: НТФ «ЭНЕРГОПРОГРЕСС», 2003. – 128 с.

2. Кирин И.Г. *Лабораторная работа «Солнечная электростанция» // Проблемы учебного физического эксперимента: Сборник научных трудов. Выпуск 25.* – М.: ИСРО РАО, 2015. 128 С., С.81.

3. Кирин И.Г. *Лабораторная работа «Ветрогенератор» // Проблемы учебного физического эксперимента: Сборник научных трудов. Выпуск 26.* – М.: ИСРО РАО, 2016. 132 С., С.69-70

4. Кирин И.Г. *Лабораторная работа «Солнечный коллектор» // Проблемы учебного физического эксперимента: Сборник научных трудов. Выпуск 26.* – М.: ИСРО РАО, 2016. 132 С., С.70-71.

5. *Учебное оборудование для кабинетов физики общеобразовательных учреждений // Под ред. Г.Г. Никифорова.* - М.: Дрофа, 2005. -396 с.

6. Кирин И.Г., Кирин А.И. *О дисциплине специализации «Малая энергетика» // Научный вестник Оренбургского государственного института менеджмента: Сборник статей 5 международной конференции «Россия как трансформирующее общество: экономика, культура, управление», ч. 3-я.* - М.: «Логос», 2004. - 232 С., С. 165.

7. Кирин И.Г., Кирин А.И. *О дисциплине специализации «Экономика теплосбережения в городском хозяйстве» // Научный вестник Оренбургского государственного института менеджмента: Сборник статей 5*

*международной конференции «Россия как трансформирующее общество: экономика, культура, управление», ч. 3-я.- М.: «Логос», 2004. - 232 С., С. 169-170.*

*8. Кирин И.Г, Кирина М.И. О дисциплине специализации «Энергия и окружающая среда // Научный вестник Оренбургского государственного института менеджмента: Сборник статей 5 международной конференции «Россия как трансформирующее общество: экономика, культура, управление». Оренбург: Оренб. Гос. Ин-т менеджмента, 2006. 135 С., С. 118-119.*

*9. Селевко Т.К. Энциклопедия образовательных технологий. Том 1.-М.: Народное образование. 2002 г. 535 С.*

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЛНЕЧНЫХ ЯЧЕЕК ГРЕТЦЕЛЯ МЕТОДОМ FDTD

Кислов Д.А.

Оренбургский государственный университет,  
Центр лазерной и информационной биофизики, г. Оренбург

Один из способов повышения КПД сенсibilизированных красителем солнечных элементов добавление в структуру пористого слоя диоксида титана, наночастиц металла. Действительно, на сегодняшний день опубликован ряд экспериментальных работ, в которых показано влияние наночастиц металла на работу ячеек, в частности на КПД. Так, например, в недавних работах сотрудников ЦЛИБФ ОГУ [1] показано, что при добавлении серебряных наночастиц диаметром 40 нм в структуру ячеек Гретцеля их КПД, в зависимости от концентрации наночастиц, возрастает в два и более раз.

Наряду с описанными выше публикациями известен ряд схожих экспериментальных работ зарубежных авторов. Так в работе [2] рассматривались сенсibilизированные красителем фотоячейки с инкапсулированными золотыми наночастицами. Полученные данные свидетельствуют о повышении КПД солнечного элемента. В работе [3] представлены результаты измерения основных параметров работы ячеек Гретцеля с наночастицами серебра. Получено увеличение основных параметров системы фотовольтаических ячеек, на 2011 год КПД системы с добавлением наночастиц серебра достигло 9%.

Однако, несмотря на достаточно убедительные экспериментальные доказательства существования описанных эффектов на сегодняшний день нет четкого объяснения их физической природы. Кроме того, не обнаружено работ, в которых была бы представлена исчерпывающая математическая модель влияния наночастиц металла на работу ячеек.

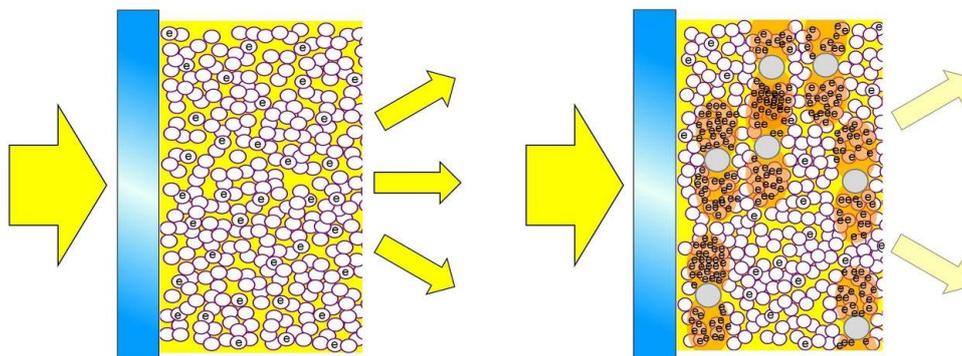


Рис.1 - Молекулы красителя в ячейке Гретцеля, попавшие в область локально усиленного ближнего поля металлической наночастицы, генерируют больше свободных носителей заряда

Уникальной особенностью металлических наночастиц является генерация очень сильных локальных электрических полей (так называемое ближнее поле

или поле в ближней зоне) при поглощении квантов света определенной частоты (плазмонный резонанс). У молекулы красителя или полупроводниковой квантовой точки попадающей в зону такого усиленного электрического поля в значительной степени меняются различные оптические характеристики, в частности сечение поглощения и сечение рассеяния [4-6]. На наш взгляд, данный эффект является одним из наиболее существенных при описании влияния наночастиц металла с плазмонными свойствами на работу ячеек Гретцеля. Основная идея исследования представлена на рисунке 1.

Для математического описания влияния наночастиц металла на поглощательную способность молекул органического красителя, по нашему мнению необходимо использовать модель, разработанную профессором Кучеренко М.Г. [7]. В данной работе показано, что если молекула красителя находится на некотором расстоянии от наночастицы серебра (или любого другого металла), изменяется скорость поглощения фотонов этой молекулой. Это связано с добавочным дипольным моментом, который возникает на молекуле красителя из-за переотражённого наночастицей электромагнитного поля падающей световой волны. Таким образом, при добавлении наночастиц металла изменяется коэффициент поглощения расположенных неподалеку молекул красителя из-за наведенной поляризации частицы металла.

Рассмотрим подробнее устройство исследуемых фотоячеек. На рисунке 3 показана система из спаянных между собой частиц диоксида титана (размеры частиц 25 нм), образующая сложную пористую структуру. В окружении частиц  $TiO_2$  находится наночастица серебра (размер 40 нм). Поверхность пористого слоя диоксида титана покрыта тонким слоем органического красителя. В реальности благодаря наличию у молекул красителя функциональных групп – OH, –COOH и др., образуется прочная химическая связь с поверхностью наночастиц  $TiO_2$ . Этот факт позволяет эффективно инжектировать электрон с возбужденного уровня энергии красителя в зону проводимости  $TiO_2$ .

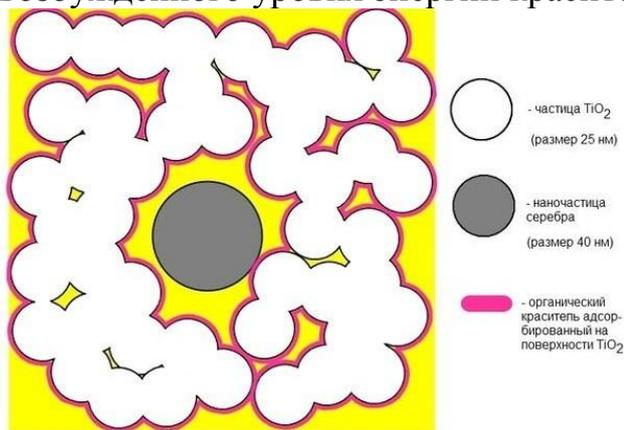


Рис. 3 – Схема сенсibilизированного красителем пористого слоя диоксида титана с наночастицей серебра.

В работе [8] были проведены исследования, в которых показано, что при определенных геометрических и спектральных параметрах возможно усиление поглощения света молекулами красителя в присутствии наночастиц серебра в десятки, а иногда и в сотни раз.

Для подтверждения выдвинутого предположения о влиянии наночастиц металла на работу солнечной батареи была реализована сложная геометрическая

3D модель ячеек Гретцеля с внедренными наночастицами серебра с учетом заданной пористости образца. Объектом моделирования являются наносферы

из серебра в пористом слое диоксида титана, при облучении электромагнитной волной в диапазоне от 390 до 650 нм. На рисунке 4 можно видеть схематическое изображение этапов моделирования.



Предварительная подготовка численного эксперимента осуществлялась в математическом пакете WOLFRAM MATHEMATICA 9.0. Здесь была сгенерирована сложная геометрическая структура ячейки Гретцеля. Написанная программа позволят учитывать макро размеры образца, концентрацию наночастиц серебра, размеры

Рис. 4 – Схема этапов численного эксперимента наночастиц диоксида титана и серебра, а также пористость слоя диоксида титана. Кроме того, в коде программы при моделировании пористой структуры слоя диоксида титана реализована возможность регулировать глубину спекания отдельных наночастиц  $TiO_2$  между собой.

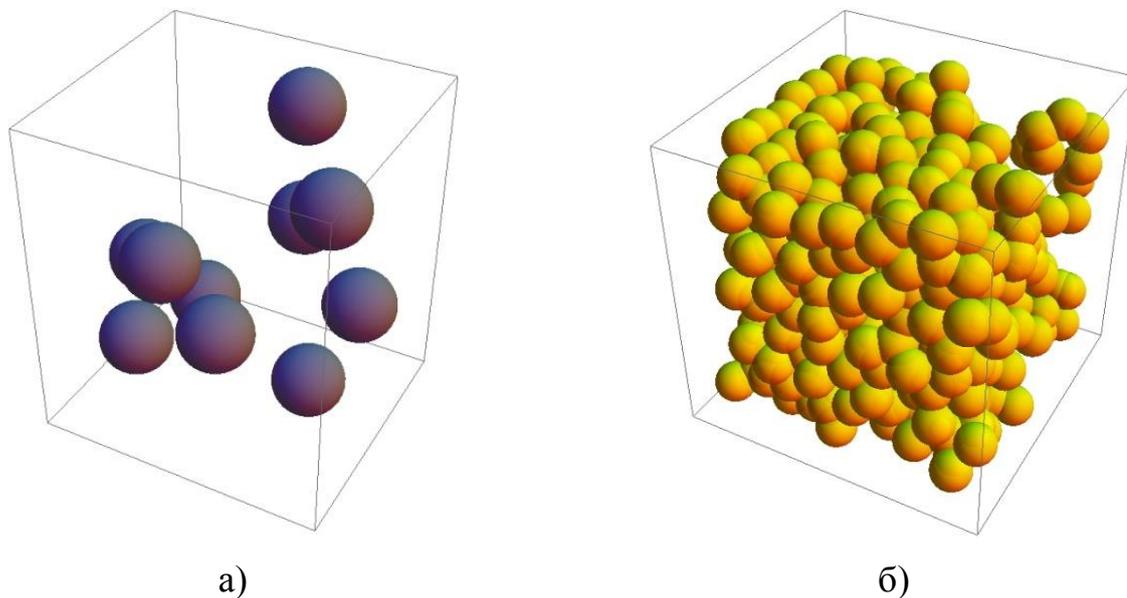


Рис. 5 – Схематическое расположение а) частиц серебра и б) частиц диоксида титана в счётной области полученное путём генерации в WOLFRAM MATHEMATICA 9.0

В пустом кубе со сторонами  $500 \times 500 \times 500$  нм для начала случайным образом были размещены около 25 наночастиц серебра. Радиус наночастиц выбирался равным 45 нм. В программе контролировалось условие не пересечения наночастиц друг с другом. В результате моделирования получена 3D структура представленная на рисунке 5а. На выходе программа выдает

текстовый файл с массивом координат  $\{x,y,z\}$  центров сгенерированных наночастиц серебра. В дальнейшем этот файл использовался при генерации скрипта для моделирования методом FDTD полей в программном пакете МЕЕР.

Далее в объем полученной трехмерной структуры также случайным образом добавлялись наночастицы  $TiO_2$ . Радиус частиц 25 нм. На данном этапе в программе контролировалось несколько важных условий:

- наночастицы диоксида титана не должны выходить за границу куба;
- наночастицы диоксида титана не должны пересекаться с наночастицами серебра;
- пересечение наночастиц диоксида титана возможно, при этом глубина взаимного проникновения не должна превышать 10 нм [9];
- пористость получаемой структуры должно соответствовать наперед заданному значению. Из литературных источников [10-12] и наших предыдущих независимых экспериментов значение пористости было выбрано равным 50%.

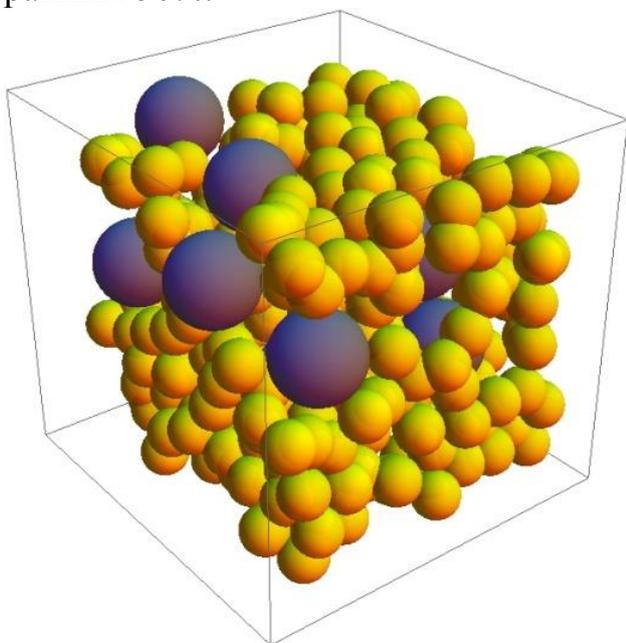


Рис. 6 - 3D образец ячейки Гретцеля состоящий из наночастиц диоксида титана и серебра

рассматриваемой структуры. Отдельно задаются свойства наночастиц серебра с учетом частотной зависимости диэлектрической проницаемости в модели Друде-Лоренца, а также свойства слоя красителя с учетом частотной дисперсии в модели ангармонического осциллятора.

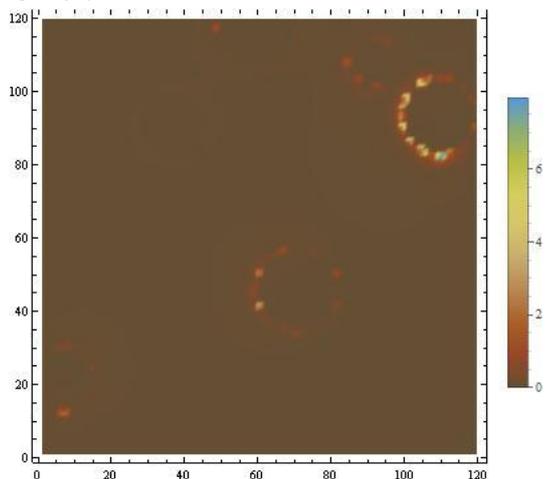
Достоинством данной модели является: максимально приближенная к реальному образцу геометрическая структура; случайное расположение частиц относительно друг друга, исключающее искусственную симметрию; простота изменений начальных условий, таких как пористость и концентрация частиц. Основным же недостатком является достаточно большие требования к вычислительным ресурсам, как следствие невозможность расчетов на

В результате получена трехмерная пористая структура из порядка 900 спеченных между собой наночастиц диоксида титана представленная на рисунке 5б.

На рисунке 6 представлен готовый 3D образец ячейки Гретцеля состоящий из наночастиц диоксида титана и серебра. Краситель в данной структуре задавался сферами с теми же координатами центров, что и у наночастиц диоксида титана, но с радиусом, увеличенным на 1 нм. Таким образом, получившаяся структура состоит из почти 2000 объектов!

Далее задавались диэлектрические свойства

домашних персональных компьютерах. По этой причине данные расчеты были выполнены с привлечением вычислительных мощностей суперкомпьютера ОГУ.



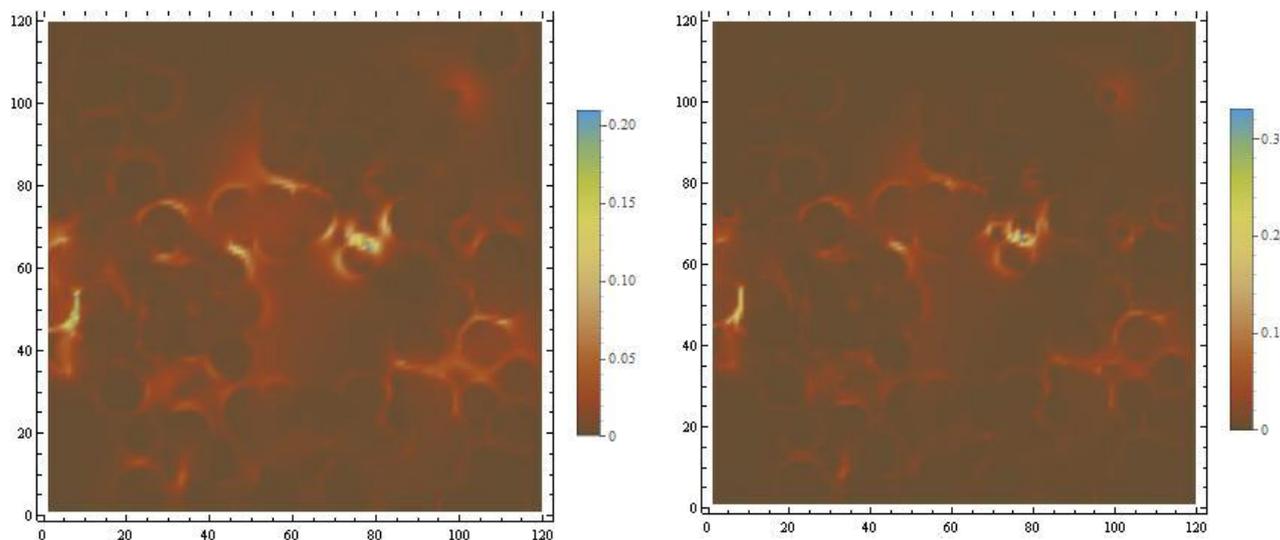
Сечение XY

Рис. 7 - Усредненное по времени распределение интенсивности электрического поля в счетном объеме, в котором присутствуют только наночастицы серебра. Длина волны 550 нм

На рисунке 7 представлены двумерные карты усредненного по времени распределения интенсивности электрического поля в счетном объеме, в котором присутствуют только наночастицы серебра.

Из рисунков видно, что вокруг наночастиц серебра образуется локально-усиленное электрическое поле. Что должно сказываться на поглощательной способности молекул красителя попавших в эту область. По полученным данным поле усиливается примерно в 10 раз. При этом также стоит обратить внимание на сложную конфигурацию электрического поля. Второй этап моделирования заключался в рассмотрении взаимодействия электромагнитной волны с

неокрашенным и окрашенным мезопористым слоем диоксида титана без наночастиц серебра. На рисунке 8 представлено усредненное по времени распределение интенсивности электрического поля в описанном выше счетном объеме.

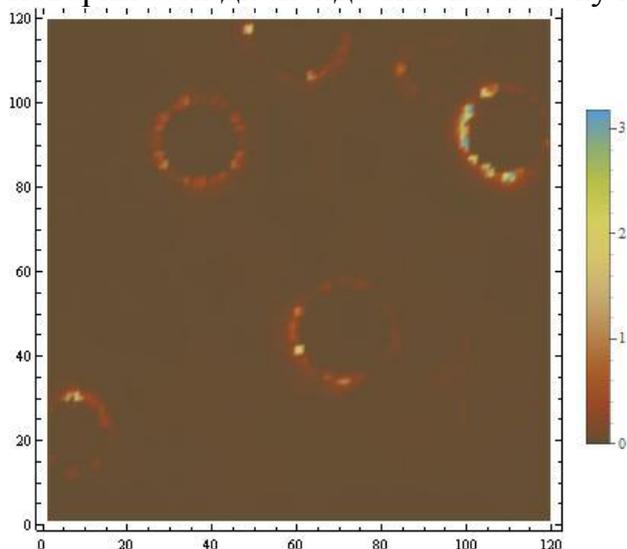


Сечение XY

Рис.8 - Усредненное по времени распределение интенсивности электрического поля в счетном объеме, в котором присутствуют только наночастицы диоксида титана: слева – неокрашенные, справа - окрашенные. Длина волны 550 нм

Следует отметить, что слой, составленный из спеченных наночастиц диоксида титана очень сильно рассеивает световую волну. Конфигурация поля

в образце при этом становится чрезвычайно сложной. На рисунках видны области между наночастицами  $\text{TiO}_2$ , в которых некоторой происходит концентрация поля. При этом можно отметить, что полученные распределения интенсивности волны в окрашенном образце более темные по сравнению с такими же распределениями, но для неокрашенного образца. Возможно, это связано с поглощением электромагнитной волны слоем адсорбированного на поверхности диоксида титана молекул красителя.



Сечение XY

Рис. 9 - Усредненное по времени распределение интенсивности электрического поля в счетном объеме, в котором присутствуют три компонента наночастицы диоксида титана-наночастицы серебра-краситель. Длина волны 550 нм

интенсивности. На это влияние могут оказывать как слой красителя, поглощающий энергию волны, так и слой диоксида титана - рассеивающий поле.

Для более детального сравнения полученных результатов необходимо рассчитать энергию, поглощенную образцами. При помощи Фурье преобразования временной зависимости напряженности электрического поля в определенных точках счетного объема, можно найти спектры рассеяния и поглощения исследуемых образцов (рис. 10).

Последним этапом моделирования было рассмотрение взаимодействия электромагнитной волны с трехкомпонентной структурой  $\text{AgNP}+\text{TiO}_2+\text{DYE}$ . На рисунке 9 представлено усредненное по времени распределение интенсивности электрического поля в счетном объеме, в котором присутствуют все компоненты характерные для ячейки Гретцеля и наночастицы серебра.

Сравнивая распределения интенсивности на рис 7 и 9 можно заметить, что изменилась конфигурация поля. Она усложнилась, по-видимому, за счет рассеяния волны частицами диоксида титана. Кроме того, изменились и максимальные величины

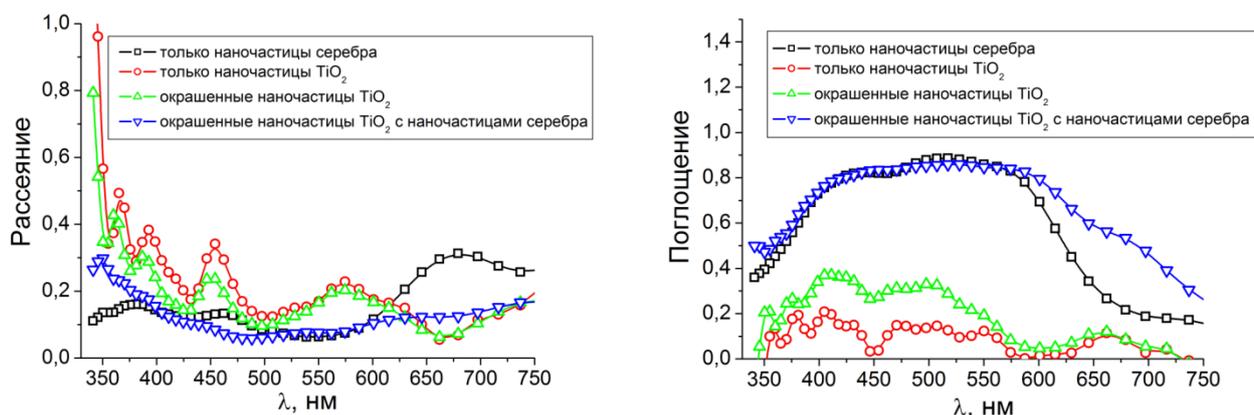


Рис. 10 - Спектры поглощения и рассеяния исследуемых образцов

Из спектров видно, что образцы с внедренными наночастицами серебра поглощают больше света, чем стандартные образцы ячеек Гретцеля

Таким образом, в результате исследования показано, что одним из механизмов влияния плазмонных наночастиц серебра на параметры работы фотоячеек является плазмонное усиление поглощательной способности молекул красителя. Разработана и реализована (методом FDTD) в МЕЕР сложная геометрическая трехмерная модель ячеек Гретцеля с внедренными наночастицами серебра с учетом заданной пористости образца, концентрации частиц и других параметров. Для этого было проведено компьютерное моделирование диэлектрических свойств оболочек красителя из молекул антоцианина с использованием соотношения Крамерса-Кронига и с привлечением TD-DFT моделирования. Показано, что образцы с внедренными наночастицами серебра поглощают больше света, чем стандартные образцы ячеек Гретцеля.

Сравнение расчетов с экспериментальными данными показывает хорошее качественное и количественное согласование.

*Работа поддержана РФФИ (проект № 16-42-560671p\_a и проект № 15-08-04132\_a) и Советом по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых (стипендия Президента Российской Федерации, № СП-1340.2015.1).*

#### Список литературы

1. Kislov, D. *Effect of plasmonic silver nanoparticles on the photovoltaic properties of Graetzel solar cells* / D. Kislov // *Physics Procedia*. – 2015. – Vol. 73. – P. 114-120.
2. Ng, S. P. *Plasmonic enhanced dye-sensitized solar cells with self-assembly gold-TiO<sub>2</sub>@core-shell nanoislands* / S. P. Ng, X. Q. Lu, N. Ding, C. L. Wu, C. Lee // *Solar Energy*. – 2014. - № 99. – P. 115–125.
3. Qi, J. *Highly Efficient Plasmon – Enhanced Dye – Sensitized Solar Cells through Metal@Oxide Core - Shell Nanostructure* / J. Qi, X. Dang, P. T. Hammond, A. M. Belcher // *ACS Nano*. – 2011. - № 5. – P. 7108–7116.

4. Кучеренко М. Г. Дипольные поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров из проводящих однородных и слоистых частиц с вырожденным электронным газом / М. Г. Кучеренко, Д. М. Налбандян // *Известия высших учебных заведений. Физика.* – 2016. – Т. 59. – № 9. – С. 87-93.
5. Kucherenko M. G. Possibilities of Improving the Characteristics of the Scanning Near-Field Optical Microscope due to the Plasmon Resonance Increase of the Nonradiative Energy Transfer Rate / M. G. Kucherenko, D. A. Kislov, T. M. Chmereva // *Nanotech. in Russia.* – 2012. – Vol. 7. – № 3–4. – P. 196-204.
6. Izmodenova S. V. Accelerated Nonradiative Electron Excitation Energy Transfer between Molecules in Aqueous Pools of Reverse Micelles Containing Encapsulated Silver Nanoparticles / S. V. Izmodenova, D. A. Kislov, M. G. Kucherenko // *Colloid Journal.* – 2014. – Vol. 76. – № 6. – P. 683-693.
7. Зейниденов А. К. Влияние наночастиц серебра на электронные переходы в молекулах красителей и генеральные характеристики жидкостных лазеров на их основе / А. К. Зейниденов, Н. Х. Ибраев, М. Г. Кучеренко // *Вестник ОГУ,* – №9 (170). – 2014. – С. 96 – 102.
8. Кучеренко М. Г. Интерференционные эффекты молекулярного поглощения света вблизи сферической металлической наночастицы / М. Г. Кучеренко, А. П. Русинов // *IV Международная конференция по фотонике и информационной оптике, 28-30 января 2015, Москва, МИФИ* – С. 336-337.
9. Malyukov, S. P. Optimization of the structure nanoporous TiO<sub>2</sub> film in a dye-sensitized solar cell/ S.P. Malyukov, I.V. Kulikova, A.V. Sayenko, Yu.V. Klunnikova // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2014. – № 541. – P. 1-6.
10. Ashi Ofir Porosity dependence of electron percolation in nanoporous TiO<sub>2</sub> layers/Ashi Ofir, Snir Dor, Larisa Grinis, Arie Zaban, Thomas Dittrich, Juan Bisquert, // *J Chem Phys.* – 2008. – Vol. 128. – №6. – P. 9
11. Dittrich, Th. Influence of the porosity on diffusion and lifetime in porous TiO<sub>2</sub> layers / Th. Dittrich, A. Ofir, S. Tirosh, L. Grinis, A. Zaban // *Applied Physics Letters.* – 2006. – Vol. 88. – № 18 – P. 3.
12. Linyun, L. Porosity Effects on Electron Transport in TiO<sub>2</sub> Films and Its Application to Dye- Sensitized Solar Cells/ Linyun Liang, Songyuan Dai, Linhua Hu, Fantai Kong, Weiwei Xu, and Kongjia Wang. // *J. Phys. Chem. B.* – 2006. – Vol. 110. – № 25 – P. 12404–12409.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОПРОЦЕССОВ В ОБРАЩЁННЫХ МИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ РАЗЛИЧНЫХ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ РАДИУСОВ

Климова Т.В.

Оренбургский государственный университет,  
Центр лазерной и информационной биофизики, г. Оренбург

Интерес к фотопроцессам в мицеллярных системах обусловлен увеличением вероятностей протекания данных процессов за счёт пространственного ограничения реакционной зоны, уменьшения расстояния между молекулами, возникновения локализации с повышенной концентрацией взаимодействующих молекул, а значит увеличением их эффективности.

Теоретический радиус мицелл в мицеллярном растворе составляет порядка  $10^{-7}$ - $10^{-9}$  м, а обменный перенос энергии электронного возбуждения проходит на расстояниях 1-5 нм. Поэтому можно сделать вывод, что влияние наночастицы на безызлучательный перенос энергии в люминесцентном зонде будет идти эффективнее.

Согласно работам [1-5] предсказана возможность увеличения скорости безызлучательного переноса энергии от донора к акцептору при размещении их вблизи проводящих тел. В работе [3] экспериментально обнаружено влияние металлической наночастицы серебра на скорость индуктивно-резонансной передачи энергии электронного возбуждения в донор-акцепторных парах органических молекул при размещении компонентов системы в мицеллярном нанореакторе.

В нашей работе мы исследовали влияние гидродинамического радиуса мицеллы на безызлучательный перенос энергии в водных пулах обратного мицеллярного раствора катионного поверхностно-активного вещества цетилтриметиламмония бромид (ЦТАБ) вблизи сфероидальной металлической наночастицы серебра (рисунок 1).

## ПОДГОТОВКА ОБРАЗЦОВ И СХЕМА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

Различные гидродинамические радиусы обратной мицеллы удалось получить, меняя объемную долю воды в растворе [6]. Соотношение ПАВ и со-ПАВ, при котором удается сохранить термодинамическую стабильность микроэмульсии, составляет по 9.42 весовых процента, весовое отношения вода/гексан находится в интервале 0.02 - 40.

Схематическое изображение обратной мицеллы представлено на рисунке 1. Для получения микроэмульсии были использованы следующие вещества: ПАВ - цетилтриметиламмония бромид (ЦТАБ), со-ПАВ - н-бутанол, растворители гексан и вода.

Таблица 1 Состав микроэмульсии с различным весовым отношением

Вещества	$\varphi_w=0.01$	$\varphi_w=0.035$	$\varphi_w=0.1$
ЦТАБ, М (мг)	0,2 (380)	0,2 (380)	0,2 (380)
Гексан, мл	5	5	5
Бутанол, мл	0,47	0,47	0,47
Вода, мл	0,05	0,2	0,6

Обратный мицеллярный раствор был приготовлен путем смешивания ЦТАБ, гексана, бутанола и воды. После встряхивания или непрерывного помешивания получали оптически прозрачную микроэмульсию.

В работе Ю.Ф. Зуева с соавторами использовалось модифицированное соотношение Стокса-Эйнштейна (1), учитывающего прямые столкновения между микрокаплями. [6].

$$D_{\text{ЦТАБ}} = \frac{k_B T}{6\pi\eta r} (1 - 2\varphi), \quad (1)$$

где  $D_{\text{ЦТАБ}}$  – коэффициент диффузии;

$k_B$  - постоянная Больцмана;

$T$  - абсолютная температура;

$\eta$  - вязкость растворителя;

$r$  - гидродинамический радиус мицелл;

$\varphi$  - объемная доля микрокапель в системе.

По измеренным в работе коэффициентам диффузии были определены средние гидродинамические радиусы  $r$  микрокапель.

$$r = \frac{k_B T}{6\pi\eta D_{\text{ЦТАБ}}} (1 - 2\varphi), \quad (2)$$

Объемная доля воды в системе определялась следующим образом:

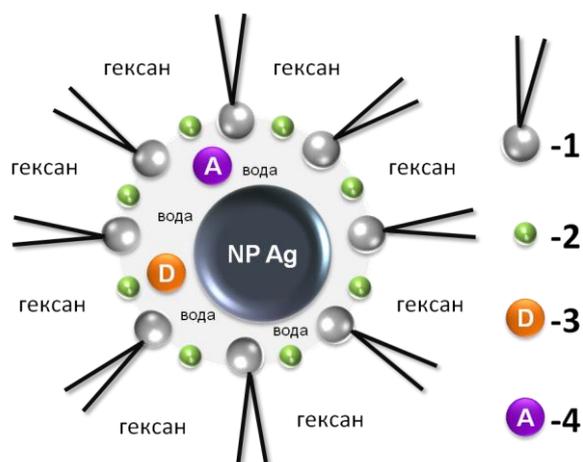
$$\varphi = \frac{V_B}{V_M}, \quad (3)$$

где  $V_B$  – объем воды;

$V_M$  – объем мицеллярного раствора.

Таким образом, для микроэмульсии вода/масло с объемной долей воды  $\varphi_w=0.035$  гидродинамический радиус мицелл, посчитанный по формуле (2) составляет 6,1 нм, для  $\varphi_w=0.1$  размер микрокапель оказался равным 5.3 нм. Для  $\varphi_w=0.01$  радиус составляет  $r=4.9$  нм [6]

Для исследования безызлучательного переноса энергии необходимо смешать ЦТАБ, гексан, бутанол и водный раствор красителей (донор + акцептор). В нашей работе использовались следующие пары:



1 - молекула ПАВ; 2-молекулако-ПАВ; 3- молекула донора; 4-молекула акцептора.

Рисунок 1- Схематическое изображение мицеллярной системы

- нильский синий в качестве донора (Д) и метиленовый голубой в качестве акцептора энергии (А);
- акридиновый оранжевый в качестве донора (Д) и кристаллический фиолетовый в качестве акцептора энергии (А).

Концентрация красителей, заключенных в пуле обратной мицеллы рассчитывалась на весь объем, по следующей формуле:

$$m = M C_0 V_0 V / V_{\text{пула}}, \quad (4)$$

где  $M$  – молярная масса красителя;  $C_0$  – концентрация красителя в микроэмульсии;  $V_0$  – объем всего раствора (вода+масло+ со-ПАВ);  $V$  – объем воды, используемой для получения раствора Д+А;  $V_{\text{пула}}$  – объем водного пула обратной мицеллы.

При смешивании двух красителей массы каждого увеличивали в два раза, во избежании уменьшения концентрации смеси.

Для синтеза наночастиц меди необходимо приготовить 2 мицеллярных раствора. В первом мицеллярном растворе использовался водный раствор соли серебра с  $C_{\text{AgNO}_3} = 0,05$  моль/л. Во втором мицеллярном растворе водный раствор восстановителя с концентрацией  $C_{\text{NaBH}_4} = 0,1$  моль/л. Затем к мицеллярному раствору с водным раствором  $\text{AgNO}_3$  медленно добавляли мицеллярный раствор с водным раствором  $\text{NaBH}_4$ , при непрерывном перемешивании.

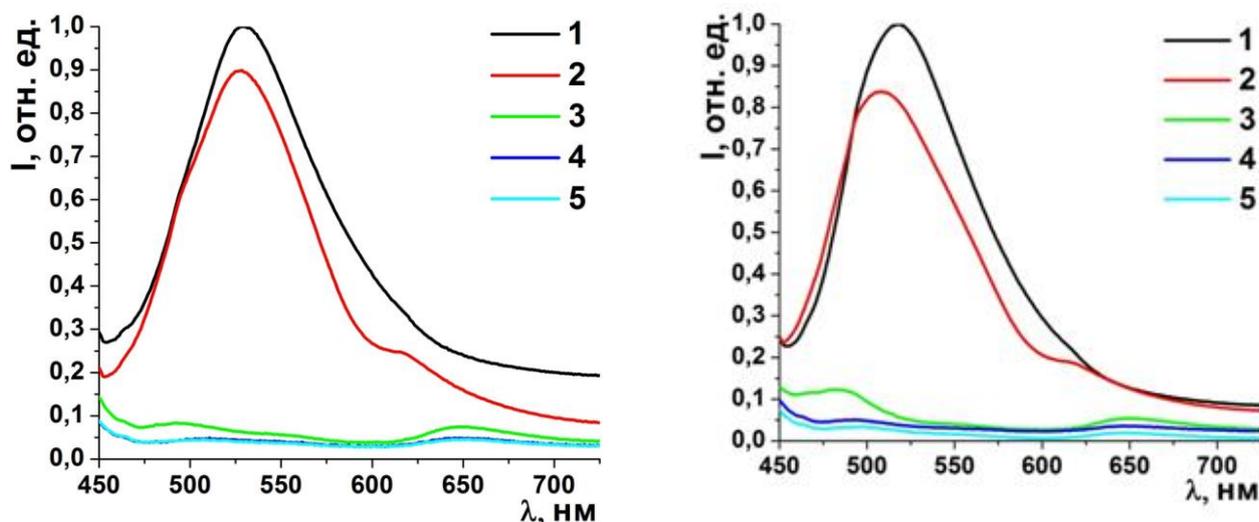
Для исследования безызлучательного переноса энергии в присутствии наночастицы серебра необходимо по методике, описанной выше, получить микроэмульсию. Затем добавить необходимый объем мицеллярного раствора с наночастицами серебра в мицеллярный раствор донорно-акцепторной пары, с определенной концентрацией красителей.

Возбуждение бимолекулярного зонда в мицеллярном растворе ПАВ в присутствии наночастицы серебра и без неё осуществлялось с помощью полупроводникового лазерного модуля с длиной волны возбуждения 405 нм

для донор-акцепторной пары акридиновый оранжевый - кристаллический фиолетовый (АО-КФ).

Возможность выбора КФ в качестве акцептора заключается в зарядовом взаимодействии ПАВ-краситель. Кристаллический фиолетовый обладает положительным зарядом и “рыхлой” структурой, что не позволяет ему люминесцировать в водных растворах, исключение составляют, вязкие среды типа глицерина. Тем не менее, находясь в обратных мицеллах из катионного ПАВ, такие молекулы начинают излучать. Это связано с зарядовым взаимодействием катионного ПАВ и красителя. Катионные ПАВ обладают положительным зарядом, в свою очередь краситель КФ также имеет положительный заряд, и, находясь в пуле обратной мицеллы, из-за сил отталкивания, концентрируется в центральной ее части, что уменьшает его подвижность.

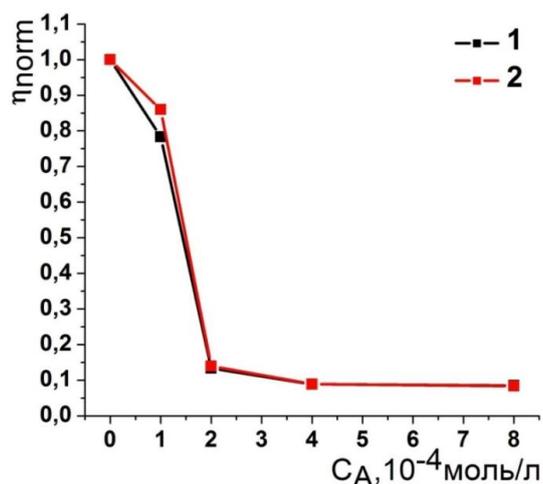
Для пары АО+КФ были получены следующие графики спектров флуоресценции в обратном мицеллярном растворе рисунки 2а,б и график квантового выхода рисунок 3 с радиусом водного пула мицелл 4,9 нм.



а) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

б) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{КФ}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

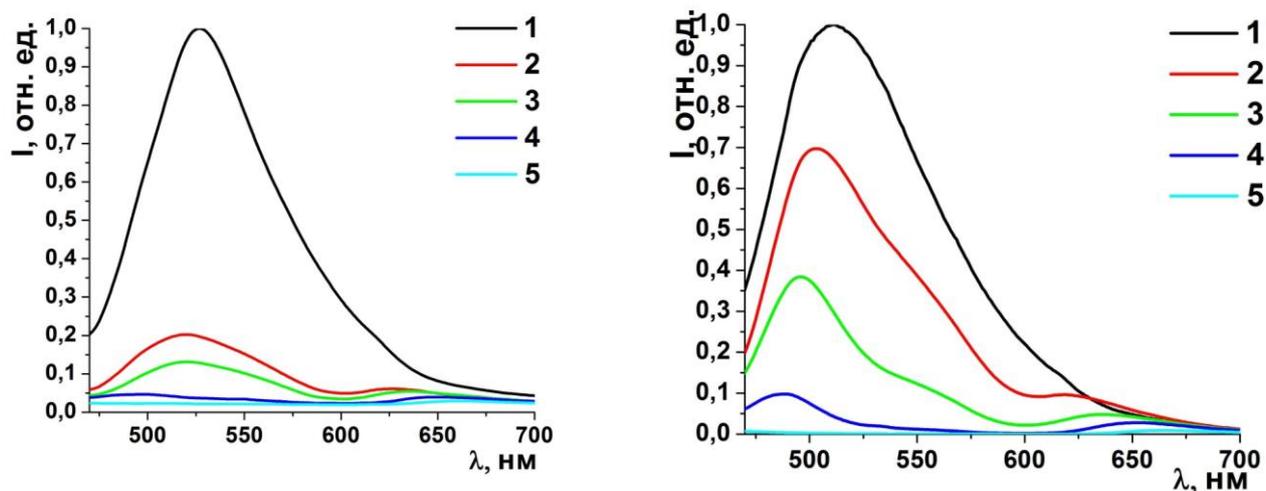
Рисунок 2 - графики спектров флуоресценции донора АО с  $C_{АО}=10^{-5}$  моль/л в обратном мицеллярном растворе с радиусом водного пула мицелл 4,9 нм с разной концентрацией акцептора КФ а) в отсутствии НЧ Ag б) в присутствии НЧ Ag



1-без НЧ Ag; 2 – в присутствии НЧ Ag

Рисунок 3 – Относительный квантовый выход молекулы донора (АО) в обратном мицеллярном растворе с гидродинамическим радиусом водного пула мицеллы 4,9 нм

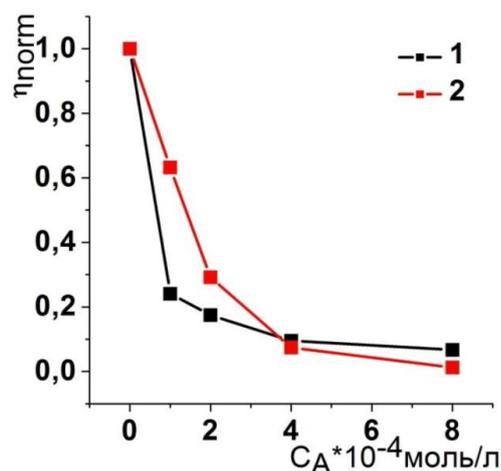
Были получены следующие графики спектров флуоресценции АО+КФ в обратном мицеллярном растворе рисунки 4 а, б и график квантового выхода рисунок 5 с радиусом водного пула мицелл 5,3 нм.



а) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

б) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

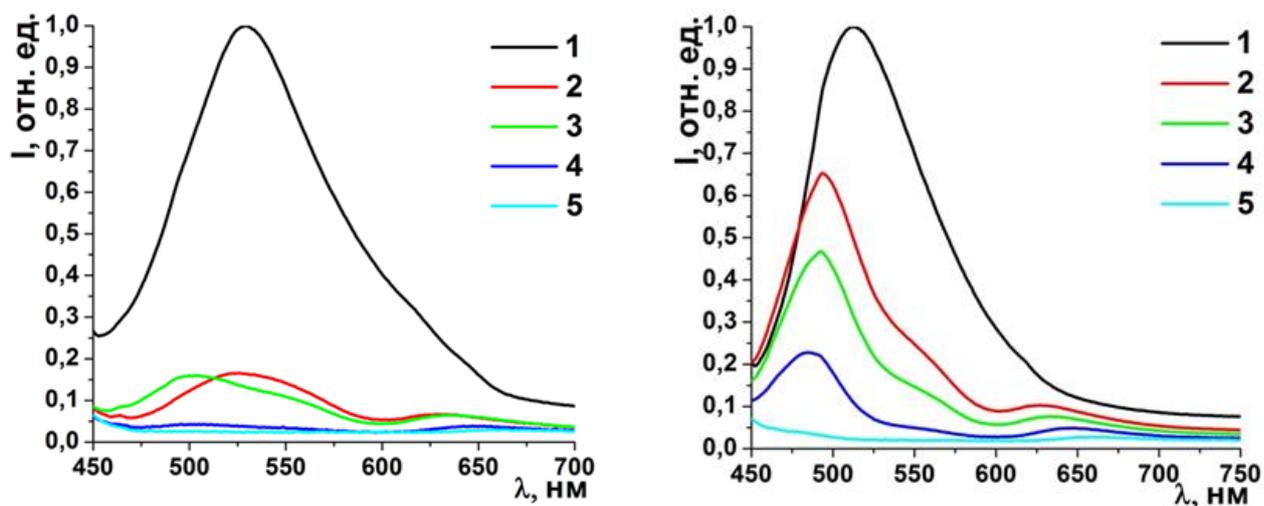
Рисунок 4 - графики спектров флуоресценции донора АО с  $C_{\text{АО}}=10^{-5}$  моль/л в обратном мицеллярном растворе с радиусом водного пула мицелл 5,3 нм с разной концентрацией акцептора КФ а) в отсутствии НЧ Ag б) в присутствии НЧ Ag



1-без НЧ Ag; 2 – в присутствии НЧ Ag

Рисунок 5 – Относительный квантовый выход молекулы донора (АО) в обратном мицеллярном растворе с гидродинамическим радиусом водного пула мицеллы 5,3 нм

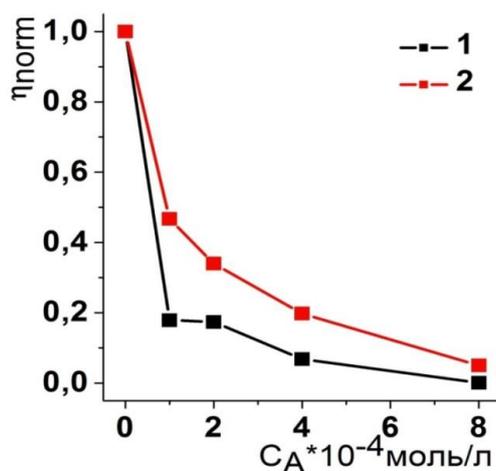
Были получены следующие графики спектров флуоресценции АО+КФ в обратном мицеллярном растворе рисунки б а,б и график квантового выхода рисунок 7 с радиусом водного пула мицелл 6,1 нм.



а) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

б) 1-спектр флуоресценции АО; 2 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=10^{-4}$  моль/л; 3 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=2 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 4 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=4 \cdot 10^{-4}$  моль/л; 5 - спектр флуоресценции АО в присутствии акцептора КФ с  $C_{\text{КФ}}=8 \cdot 10^{-4}$  моль/л

Рисунок 6 - графики спектров флуоресценции донора АО с  $C_{\text{АО}}=10^{-5}$  моль/л в обратном мицеллярном растворе с радиусом водного пула мицелл 6,1 нм с разной концентрацией акцептора КФ а) в отсутствии НЧ Ag б) в присутствии НЧ Ag



1 - без НЧ Ag; 2 – в присутствии НЧ Ag

Рисунок 7 – Относительный квантовый выход молекулы донора (АО) в обратном мицеллярном растворе с гидродинамическим радиусом водного пула мицеллы 6,1 нм

В спектрах флуоресценции АО(Д)+КФ(А) наблюдалось монотонное тушение донора по мере увеличения концентрации акцептора, что дает возможность сделать вывод о наличии безызлучательного переноса энергии между донором и акцептором.

Анализируя полученные графики относительных квантовых выходов донора энергии АО для гидродинамических радиусов 4,9 нм, 5,3 нм, 6,1 нм представленных на рисунках 3, 5, 7 водного пула обратной мицеллы, можно сделать вывод, что скорость БПЭ в водном пуле обратного мицеллярного раствора катионного ПАВ ЦТАБ, в присутствии НЧ Ag уменьшается, причем, чем больше радиус водного пула обратной мицеллы, тем эффективнее замедление скорости БПЭ.

Вероятно, замедление БПЭ в присутствии наночастицы серебра связано с углом взаимодействия молекул красителей и наночастицы серебра.

#### Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Кислов Д.А., Чмерева Т.М. // *Российские нанотехнологии*. 2012, Т.7. №1-2. С.71.
2. A.O. Govorov, J. Lee, N.A. Kotov // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 76., – P. 125308.
3. Измоденова, С. В. Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения в обратных мицеллах с инкапсулированными металлическими наночастицами / С.В. Измоденова, Д.А. Кислов, М.Г. Кучеренко // *Коллоидный журнал*. – 2014. - Т. 76. - №6. - С. 1-11.
4. Кислов, Д.А. Ускоренный режим безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения между молекулами вблизи проводящих тел/ Д. А.

*Кислов, М.Г.Кучеренко, Т.М.Чмерева.// Вестник ОГУ. – 2011. - №4 (123). - С. 128-135.*

5. Чмерева, Т. М. Влияние металлических наночастиц на перенос энергии между молекулами красителей / Т.М.Чмерева // Сборник материалов конференции. - Секция 26 Проблемы фундаментальной и прикладной физики. – Оренбург, ОГУ. - 2009. – С. 2341 – 2349.

6. Зуев, Ю.Ф. Инверсия фаз в микроэмульсии, на основе катионного ПАВ цетилтриметиламмоний бромида/Ю.Ф., Зуев, А.Б., Миргородская, Б.З., Идиятуллин, Р. Н., Хамидуллин // Структура и динамика молекулярных систем. - 2002. - Т. 1. - С. 193-196.

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАКРОМОЛЕКУЛЫ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА НА ПОВЕРХНОСТИ ОДНОСЛОЙНОЙ УГЛЕРОДНОЙ НАНОТРУБКИ

Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Наноструктуры, представляющие собой углеродные нанотрубки, покрытые полимерными цепями, в ряде работ предлагается использовать в качестве различных сенсоров, элементов устройств нанoeлектроники, контейнеров для доставки лекарственных препаратов, а также для создания нанокompозитных материалов [1-7]. Нанотрубки могут покрываться как биополимерами, так и другими органическими макромолекулами, например, полифениленвинилена (PPV), который является электропроводящим полимером.

Ранее в работах [8-11] было показано, что уже на данном этапе развития технологий возможно создание и применение функциональных наносистем, в которых полимерные цепи адсорбированы на поверхности наночастицы или размещены внутри полости пористой среды. Было показано, что двустадийные фотореакции с участием электронно-возбужденных молекул в приповерхностных областях таких структур обладают специфической кинетикой, которая определяется характером размещения одного из реагентов в структуре полимера [8-11].

Согласно статистической теории распределения плотности звеньев полимерной цепи на поверхностях адсорбентов [12], в поле  $V(\mathbf{r})$  поверхности пространственное распределение звеньев макромолекулы описывается уравнением:

$$(a^2/6)\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = [(V(\mathbf{r}) - \lambda)/kT]\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $a$  – размер мономера,  $\lambda$  – свободная энергия, приходящаяся на одну частицу,  $\nabla^2$  – оператор Лапласа,  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор точки над поверхностью. Плотность звеньев макроцепи  $n(\mathbf{r})$  определяется функцией  $\psi(\mathbf{r})$ :

$$n(\mathbf{r}) = \text{const } \psi^2(\mathbf{r}) \quad (2)$$

Для нахождения радиального распределения плотности звеньев макромолекулы, размещенной на поверхности углеродной нанотрубки, запишем уравнение (1) в цилиндрической системе координат [13]:

$$\frac{a^2}{6} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) = \frac{(V(r) - \lambda)}{k_B T} \psi(r) \quad (3)$$

$$\lambda = -\frac{a^2}{6} q^2 kT, \quad (4)$$

где параметр  $q$  определен ниже.

В работах [8-9, 13], были определены радиальные зависимости концентрации звеньев внутри нанополостей и на поверхности наночастиц различной формы с  $\delta$ - функциональной ямой, моделирующей притяжение звеньев полимерной молекулы к непроницаемым стенкам поры или поверхности наночастицы:

$$V(r) = \begin{cases} -\alpha\delta(r-r_0), & r > R \\ \infty, & r = R \end{cases} \quad (5)$$

Для цилиндрической наночастицы с потенциалом (5) решение уравнения (3) имеет вид:

$$\begin{cases} \psi_I = A \left( I_0(qr) - K_0(qr) \frac{I_0(qR)}{K_0(qR)} \right), & R < r < r_0 \\ \psi_{II} = AK_0(qr) \left( \frac{I_0(qr_0)}{K_0(qr_0)} - \frac{I_0(qR)}{K_0(qR)} \right) & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (6)$$

где  $I_0$  и  $K_0$  функции Бесселя мнимого аргумента нулевого порядка первого и второго рода, а параметр  $q$  находится из уравнения:

$$K_0(qr_0)I_0(qr_0) = \frac{a^2 k_B T}{6\alpha r_0} + K_0^2(qr_0) \frac{I_0(qR)}{K_0(qR)} \quad (7)$$

Для определения характера размещения звеньев макромолекулы PPV было произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование на поверхности однослойной углеродной нанотрубки.

В стартовой конфигурации макромолекула полифениленвинилена располагалась на небольшом расстоянии от поверхности углеродной нанотрубки. Макромолекула PPV состояла из 100 звеньев и формировалась либо в линейной конформации (в вакууме), либо была предварительно свернута в неравновесную клубковую структуру (в вакууме и в воде). Использовалась однослойная углеродная нанотрубка длиной 15 нм, диаметром 4.05 нм, хиральность -  $n=30$  и  $m=30$ .

МД-моделирование производилось в вакууме и в воде с использованием программного комплекса NAMD 2.11 [14] при постоянной температуре с шагом по времени 0.001 пс, все атомы нанотрубки при этом фиксировались. Температура моделирования задавалась равной 300 К, а также 600 и 900 К с дальнейшим понижением температуры до 300 К. Для поддержания температуры использовался термостат Берендсена (коэффициент сцепления 1). В вакууме МД-моделирование производилось до 2 нс, в воде - до 15 нс.

Для полифениленвинилена использовалось силовое поле CHARMM General Force Field (CGenFF) [15-16]. Параметры для атомов углерода нанотрубки задавались такими же, как и для атомов типа CA силового поля CHARMM22 [17], которые используются для описания молекул бензола [18].

В случае моделирования в вакууме рассматривалась изолированная система, электростатический и Ван-дер-Ваальса потенциалы обрезались на расстоянии 3 нм.

При моделировании в воде молекулярная система помещалась в ячейку с периодическими граничными условиями (размер ячейки по оси  $x$  - 24 нм, по осям  $y$  и  $z$  - 16 нм). Электростатический и Ван-дер-Ваальса потенциалы обрезались на расстоянии 2 нм. Для расчета далекодействующих электростатических взаимодействий использовался метод частица-сетка Эвальда (PME).

По результатам МД-моделирования рассчитывалось радиальное распределение средней концентрации атомов макромолекулы на поверхности углеродной нанотрубки по 5-ти произведенным модельным расчетам  $\langle n(r) \rangle$ . После этого проводилась аппроксимация полученной радиальной концентрации формулами (2, 6, 7).

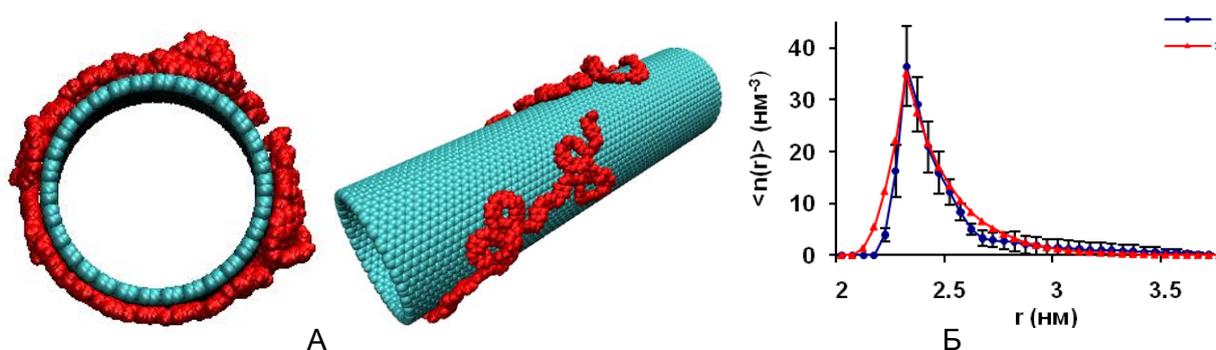


Рис. 1. Макромолекула PPV на поверхности углеродной нанотрубки (А) и радиальная зависимость средней концентрации атомов макромолекулы через 15 нс после МД-моделирования при 300 К (Б, 1). Выделенные вертикальные интервалы на кривой - оценка средноквадратичного отклонения, аппроксимирующая кривая (Б, 2).

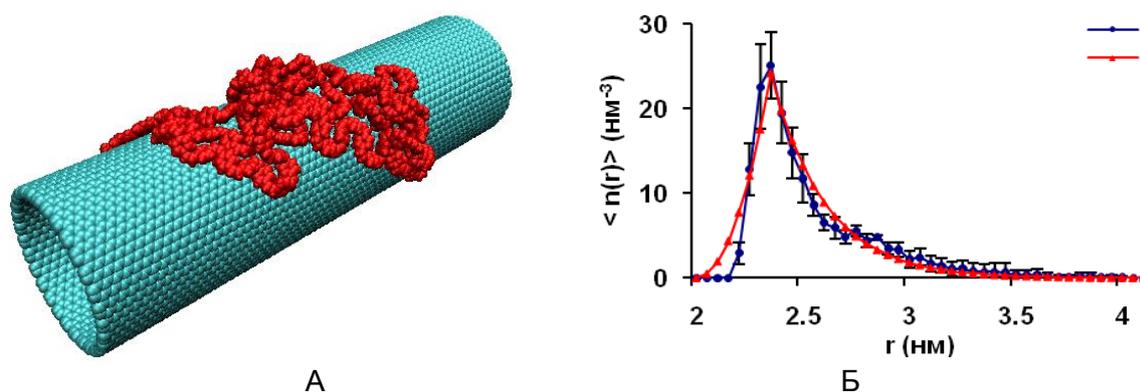


Рис. 2. Макромолекула PPV на поверхности углеродной нанотрубки (А) и радиальная зависимость средней концентрации атомов макромолекулы через 2 нс после моделирования в вакууме при температуре 300 К (Б, 1), аппроксимирующая кривая (Б, 2), начальная конформация линейная.

На рисунке 1А изображена макромолекула PPV из 100 звеньев спустя 15 нс после МД-моделирования в воде на поверхности углеродной нанотрубки, стартовая конфигурация – неравновесный клубок. МД- моделирование было произведено 5 раз с разными начальными неравновесными клубковыми конфигурациями PPV. На рисунке 1Б изображено распределение средней радиальной концентрации атомов PPV на поверхности углеродной нанотрубки и аппроксимирующая кривая к ней. Максимум радиальной концентрации равен 2.3 нм, параметр  $\alpha$  равен 0.0063 эВ·нм, параметр  $q$  равен 2.1 нм<sup>-1</sup>.

На рисунке 2А изображена макромолекула PPV спустя 2 нс после МД-моделирования в вакууме при 300 К на поверхности углеродной нанотрубки, стартовая конфигурация – линейная. На рисунке 2Б изображено распределение средней радиальной концентрации атомов PPV на поверхности углеродной нанотрубки и аппроксимирующая кривая к ней. Максимум радиальной концентрации равен 2.35 нм, параметр  $\alpha$  равен 0.0054 эВ·нм, параметр  $q$  - 1.8 нм<sup>-1</sup>.

В результате МД-моделирования в вакууме и воде макромолекулы PPV из 100 звеньев и углеродной нанотрубки обнаружена адсорбция макромолекулы поверхностью углеродной нанотрубки. Было показано, что средние радиальные зависимости концентрации атомов макромолекул хорошо аппроксимируются формулами (2, 6, 7), полученными методами статистической теории макромолекул с  $\delta$ -функциональной потенциальной ямой адсорбционного потенциала. Данные результаты могут быть использованы для корректного описания кинетики двустадийных фотореакций в приповерхностных слоях таких наносистем. Такая информация может быть востребована при создании активного элемента прецизионного люминесцентно-оптического измерителя концентрации молекулярного кислорода или сенсора синглетного кислорода для биомедицинских применений. Другая область возможного использования – синтез эффективных сенсбилизаторов генерации синглетного кислорода для фотодинамической терапии.

Конформационная структура исследованной наносистемы важна и для изучения особенностей экситон-плазмонного взаимодействия в композитах «проводник-полимерная цепь», поскольку известно, что в макромолекулах PPV эффективно активируются френкелевские экситонные состояния.

Исследования поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований и правительством Оренбургской области (проект № 16-42-560671).

#### *Список литературы*

1. Baibarac, M. *Nanocomposites Based on Conducting Polymers and Carbon Nanotubes from Fancy Materials to Functional Applications*/ M. Baibarac, P. Gómez-Romero // *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. - Vol. 6.- 1–14. - 2006.

2. Deria, P. *Single-Handed Helical Wrapping of Single-Walled Carbon Nanotubes by Chiral, Ionic, Semiconducting Polymers* / P. Deria, C. D. Von Bargen, J. Olivier, A. S. Kumbhar, J. G. Saven, M. J. Therien // *Am. Chem. Soc.* – 2013. - 135 (43).- pp 16220–16234.

3. Drouvalakis, K. A. *Peptide-coated nanotube-based biosensor for the detection of disease-specific autoantibodies in human serum* / K. A. Drouvalakis, S. Bangsaruntip, W. Hueber, L.G. Kozar, P. J. Utz, H. Dai // *Biosensors and Bioelectronics.* - 2008. – V. 23. – pp. 1413–1421.

4. Fujigaya, T. *Non-covalent polymer wrapping of carbon nanotubes and the role of wrapped polymers as functional dispersants* / T. Fujigay, N. Nakashima // *Sci. Technol. Adv. Mater.* – 2015. -16. – 024802 (21pp).

5. Münzer, A. M. *Carbon Nanotubes for the Label-Free Detection of Biomarkers* / A. M. Münzer, Z. P. Michael, A. Star // *ACS Nano.* – 2013.- 7 (9).- pp. 7448-7453.

6. Yarotski, D.A. *Scanning Tunneling Microscopy of DNA-Wrapped Carbon Nanotubes* / D.A. Yarotski, S.V. Kilina, A.A. Talin, S. Tretiak, O.V. Prezhdo, A.V. Balatsky, A.J. Taylor // *NANO LETTERS.* - 2009. - V. 9. - N. 1. – pp. 12-17.

7. Wang, H. *Molecular Dynamics Study of Dipalmitoylphosphatidylcholine Lipid Layer Self-Assembly onto a Single-Walled Carbon Nanotub* / H. Wang, S. Michielssens, S. L. C. Moors, A. Ceulemans // *Nano. Res.*- 2009. – V. 2 (12). –pp. 945-954.

8. Кучеренко, М.Г. *Кинетика диффузионно-контролируемых фотореакций в приповерхностном слое фуллерен-тубуленовой наночастицы с адсорбированной полимерной цепью* / М. Г. Кучеренко, Т. М. Чмерева, Н. Ю. Кручинин, С. В. Измоденова, Н. С. Подрезова // *Вестник Оренбургского государственного университета.* 2013. - №9. – С. 100-109.

9. Кучеренко, М.Г.. *Кинетика бимолекулярных диффузионно-контролируемых фотореакций в приповерхностном слое наночастиц с адсорбированными макроцепями* / М. Г. Кучеренко, С. В. Измоденова, Н. Ю. Кручинин // *Матер. междунаrod. конфер. Фотоника молекулярных наноструктур, Оренбург, ОГУ.* 2009. С. 29-31.

10. Kucherenko, M. G. Izmodenova S. V., Kruchinin N. Yu., Chmereva T. M. *Change in the Kinetics of Delayed Annihilation Fluorescence During Rearrangement of Polymer-Chain Structure in a Nanocavity of a Solid Adsorbent* / M. G. Kucherenko, S. V. Izmodenova, N. Yu. Kruchinin, T. M. Chmereva // *High Energy Chemistry.* 2009. - V. 43.- N. 7. – P. 592-598.

11. Кучеренко, М.Г. *Кинетика фотореакций в регулярной пористой наноструктуре с цилиндрическими ячейками, заполненными активаторсодержащими макромолекулами* / М. Г. Кучеренко, А. П. Русинов, Т. М. Чмерева, А. А. Игнатъев, Д. А. Кислов, Н. Ю. Кручинин // *Оптика и спектроскопия.* 2009. - Т. 107. - № 3. с. 510-516.

12. Гросберг, А. Ю. *Статистическая физика макромолекул* / А. Ю. Гросберг, А. Р. Хохлов // М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. - 1989. - 344 с.

13. Кучеренко, М.Г. Размещение звеньев полимерной цепи в поле гладкой твердой поверхности и в нанополостях пористого сорбента / М. Г. Кучеренко, Т. М. Чмерева // Вестник Оренбургского государственного университета. 2008. - №9. – С. 177-184.
14. Phillips, J.C. Scalable molecular dynamics with NAMD / J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R.D. Skeel, L. Kale, K. Schulten // *Journal of Computational Chemistry*. 2005. – V. 26. – pp. 1781-1802.
15. Vanommeslaeghe, K. CHARMM General Force Field: A Force field for Drug-Like Molecules Compatible with the CHARMM All-Atom Additive Biological Force Field / K. Vanommeslaeghe, E. Hatcher, C. Acharya, S. Kundu, S. Zhong, J. Shim, E. Darian, O. Guvench, P. Lopes, I. Vorobyov, A. D. MacKerell Jr. // *J. Comput. Chem.* 2010. – 31. – pp. 671-690.
16. Yu, W. Extension of the CHARMM General Force Field to Sulfonyl-Containing Compounds and Its Utility in Biomolecular Simulations / W. Yu, X. He, K. Vanommeslaeghe, A. D. MacKerell Jr. // *J. Comput. Chem.* 2012, 33, 2451-2468.
17. MacKerell Jr., A. D. All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins / A. D. MacKerell Jr., D. Bashford, M. Bellott, R. L. Dunbrack Jr., J. D. Evanseck, M. J. Field, S. Fischer, J. Gao, H. Guo, S. Ha, D. Joseph-McCarthy, L. Kuchnir, K. Kuczera, F. T. K. Lau, C. Mattos, S. Michnick, T. Ngo, D. T. Nguyen, B. Prodhom, W.E. Reiher III, B. Roux, M. Schlenkrich, J. C. Smith, R. Stote, J. Straub, M. Watanabe, J. Wiorkiewicz-Kuczera, D. Yin, M. Karplus // *Journal of Physical Chemistry B*. 1998. – V. 102. – P. 3586-3616.
18. Zhu, F. Water and Proton Conduction through Carbon Nanotubes as Models for Biological Channels / F. Zhu, K. Schulten // *Biophysical Journal Volume*. - 2003. – V. 85. – pp. 236-244.

# АНАЛИЗ СЕМЕСТРОВОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ФИЗИКЕ СТУДЕНТА-ПЕРВОКУРСНИКА ЭЛЕКТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ФАКУЛЬТЕТА

Кучеренко М.А.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Проблема проектирования, организации и контроля самостоятельной работы студента в условиях реализации компетентностной модели образования отчетливо констатируется и решается различными средствами в образовательной среде вуза.

В данном контексте последние немногочисленные публикации в журналах о высшем образовании позволяют сделать некоторые заключения о путях решения указанной проблемы. Так в [1] представлены основные эффективные технологии организации рационального умственного труда с большим массивом интернет-материалов на основе активизации работы обоих полушарий мозга, особенностей биоритма человека, возможностей аутотренинга, приемов запоминания и концентрации внимания. В [2] рассмотрен пример планирования и организации эффективного контроля самостоятельной работы будущих врачей на основе перечня заданий определенного «балльного веса» и различного уровня сложности (репродуктивного, реконструктивного, творческого или исследовательского характера), направленных на формирование профессиональных компетенций, предусмотренных ФГОС. Концепция личностного проективного образования иллюстрируется в [3] приемами формирования (списки универсальных вопросов для осмысления) способности студента к созданию знания из получаемой информации на основе доминирования принципа «веди себя сам» над принципом «следуй за мной» (то есть, за обучающим).

Планирование, организация и контроль самостоятельной работы по физике для студентов направлений подготовки 13.03.01 Теплоэнергетика и теплотехника и 13.03.02 Электроэнергетика и электротехника осуществляется нами на основе созданного учебно-методического комплекса, включающего:

1. Учебно-методическое пособие «Стратегии смыслового чтения по физике» (2014г.).

2. Учебное издание – практикум «Самостоятельная работа с учебным текстом по физике» (2016г.).

3. Методические указания для самостоятельной работы «Тестовые задания по курсу общей физики» (2013г.).

Заметим, что в [4] были выявлены и проанализированы у студентов электроэнергетического факультета 2015-2016 у. г. способы и формы выполнения учебной задачи «самостоятельное изучение раздела дисциплины «Физика» на основе наличных стратегий работы с учебной информацией», качество учебных результатов и их корреляция с набором приемов и средств выполнения учебной задачи, а также мотивационный, операционный и

эмоционально-ценностный компоненты учебной деятельности и психологическая готовность студента к самостоятельной работе. Была рассмотрена модель организации самообразовательной деятельности студента на основе разработанного практикума «Самостоятельная работа с учебным текстом по физике», который ориентирован на все компоненты содержания образования в вузе и обеспечивает расширение субъектного опыта студента в процессе применения стратегий смыслового чтения для самостоятельного освоения разделов учебной дисциплины «Физика».

В данной статье представлены результаты анализа практической реализации некоторых структурных элементов модели самообразовательной деятельности студента-первокурсника в осеннем семестре 2016-2017 у.г., выполненного на основе использования практических методов «изучение продуктов деятельности» и «индивидуальное собеседование». В экспериментальной работе принимало участие 107 студентов-первокурсников электроэнергетического факультета.

Согласно рабочей программе учебной дисциплины «Физика» академического балакавриата для направлений подготовки, указанных выше, самостоятельная работа студента состояла из 4 тематических разделов: Физические основы механики (30ч.); Колебания и волны (36ч.); Молекулярная физика и термодинамика (36ч.); Электричество и магнетизм (30ч.).

Цель анализа продуктов деятельности и индивидуального собеседования заключалась в определении качества применения отдельных стратегий смыслового чтения для освоения содержания внеаудиторной работы по физике на информационно-репродуктивном и частично-поисковом уровнях (таблица 1).

Основные задачи формулировались следующим образом:

1. Выявить личностное отношение студента к предлагаемой форме самостоятельной работы, предполагающей 6 этапов разрешения различных по характеру герменевтических ситуаций, когда перед читателем-студентом стоит задача «понять авторский текст» на основе постижения и выстраивания собственных многообразных смыслов посредством арсенала интерпретационных техник и принципов [5].

2. Сделать первичную оценку способности студента к эффективному выбору источников учебной информации для решения поставленной учебной задачи и качества ее решения.

3. Обнаружить неоправданную перегруженность или, напротив, облегченность заданий для самостоятельного освоения содержания дисциплины на основе определенного набора смысловых стратегий.

Очевидно, что решение данных задач является непременным условием дальнейшей коррекции распределения часов по разделам (темам, подтемам), уровня сложности заданий, рейтингового балла, характера и количества индивидуальных консультаций в процессе самообразовательной деятельности учащихся.

Таблица 1 –Стратегии смыслового чтения

<p><i>Информационно-репродуктивный уровень освоения стратегии смыслового чтения (% учащихся, применивших стратегию верно)</i></p>	<p><i>Частично-поисковый уровень освоения стратегии смыслового чтения (% учащихся, применивших стратегию верно)</i></p>
<p>1.Письменный разбор примера решения физической задачи из предложенного источника информации (17)                  2.Самостоятельное решение физической задачи на основе предварительно-самостоятельно разобранного алгоритма (30)                  3. Решение задачи - тестового задания с возможностью последующей самопроверки (26)                  4. Дополнение тематического словаря понятий, необходимого для понимания заявленной темы (29)                  5. Письменное составление предложений с новыми понятиями (30)                  6. Составление письменного рассказа-комментария по предложенной теме с опорой на рисунок к параграфу учебника (4)                  7. Схематическое установление логических связей между понятиями (18)                  8. Определение объема понятий (100)                  9. Дополнение разветвленной карты – графа понятий (12)                  10. Определение содержания понятий (23)                  11. Объяснение понятий и терминов на основе изучающего чтения и осмысления авторского текста и предложенных элементов содержания понятий и терминов (6)</p>	<p>1. Решение количественной физической задачи с опорой на материал предварительно самостоятельно-дополненной сравнительной таблицы (26)                  2. Дополнение систематизирующей таблицы с предложенными основаниями для систематизации учебной информации без использования прямого цитирования авторского текста (35)                  3. Письменный ответ на вопрос, предполагающий обобщение содержания самостоятельно дополненной систематизирующей таблицы (22)                  4. Создание таблицы с использованием приемов развития критического мышления без прямого цитирования авторского текста (23)                  5 Самостоятельно сокращенный письменный вывод уравнения из предложенного источника (29)                  6. Письменное составление вопросов 6 типов (простые, уточняющие, объясняющие, оценочные, практические) (24)                  7. Письменное объяснение характера зависимостей одних физических величин от других (22)                  8. Письменная самопостановка вопросов по предварительно осмысленной теме, и ответы на эти вопросы (17)</p>

В таблице 1 приведены количественные оценки правильного применения стратегий смыслового чтения.

Основные выводы из анализа работы студента по выполнению заданий практикума «Самостоятельная работа с учебным текстом по физике» позволяют констатировать, что:

1. Учащиеся легко адаптируются к условиям организации самостоятельной работы и ее содержанию, не испытывают затруднений в поиске необходимых источников учебной информации в сети Интернет и на сайте научной библиотеки ОГУ.

1. В понимающей текстовой деятельности обучаемого чтение ознакомительное преобладает над чтением изучающим, обеспечивающим «вычленивание» полной информации из учебного текста с последующей ее интерпретацией на основе герменевтических техник и принципов. Подчеркнем, что освоение названных техник и принципов должно быть сопряжено с напряженной интеллектуальной работой и мобилизацией мотивационно-волевой сферы личности студента.

2. Только около 2% учащихся проявляют самостоятельность в таких действиях восприятия, осмысления и понимания учебной информации, как ориентирование, анализ, перекодирование, запоминание, варьирование и поиск средств решения поставленной учебной задачи.

3. Самообразовательная деятельность студентов имеет, главным образом, компилирующий характер: используется прямое цитирование авторского текста без выявления семантически значимых смысловых структурных единиц и выполнения смыслового свертывания выделенных фактов и мыслей.

4. Преобладает недопустимое и неэффективное заимствование продуктов деятельности у студентов, имеющих явно выраженную учебную мотивацию и навыки самоорганизации предметной познавательной деятельности.

5. Следует дополнить систему заданий задачами качественного и количественного содержания различного уровня сложности. Необходимо акцентировать внимание учащихся на приемах осмысления и методике решения задачи как специфического учебного текста – компактного исследования физического явления или процесса.

Эти и другие выводы из анализа самостоятельной работы студента ориентируют нас на возможные пути коррекции контроля и содержания учебной деятельности студентов. К таким путям мы относим, прежде всего, следующие:

- Изменение графика индивидуальных консультаций (установочных, тематических, проблемных).

- Выбор и включение осознанно необходимых стратегий смыслового чтения во все виды учебных занятий (лабораторный практикум, практическое занятие, лекция).

▪ Разработку заданий информационно-репродуктивного, частично-поискового и креативно-творческого характера для контроля усвоения учебного материала, вынесенного на самостоятельное изучение.

В заключение отметим отчетливое понимание того, что формирование и диагностика общекультурных и общепрофессиональных компетенций в процессе выполнения самостоятельной работы студентом могут быть эффективно осуществлены в условиях единства требований всего сообщества преподавателей, обеспеченных учебными часами для планирования и контроля самообразовательной деятельности учащихся.

#### *Список литературы*

1. Перлова, И.В. Умения рационального умственного труда как способы интенсификации самостоятельной работы студентов при чтении интернет-материалов / И.В. Перлова // Вестник высшей школы. – 2016. - №8. – С. 42-45.

2. Васильева, Е.А., Самодова, О.В. Как формировать умения и навыки самостоятельной работы у будущих врачей / Е.А. Васильева, О.В. Самодова // Вестник высшей школы. – 2016. - №9. – С. 63-67.

3. Ильин, Г.Л. Проектное образование как работа с информацией врачей / Г.Л. Ильин // Высшее образование в России. – 2016. - №7. – С. 88-93.

4. Кучеренко, М.А. Совершенствование самостоятельной работы по физике на основе стратегий смыслового чтения / М.А. Кучеренко // Вестник Оренбургского государственного университета. – Оренбург: ОГУ, 2016. - №4. - С. 11-18.

5. Кучеренко, М.А. Самостоятельная работа с учебным текстом по физике: практикум / М.А. Кучеренко. – Оренбург: Университет, 2016.-С.7-8.

# ТРАНСФОРМАЦИЯ СПЕКТРОВ УДЕЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ СЛОИСТЫХ НАНОПРОВОЛОК В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.

Центр лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Исследованы изменения спектров дипольной электрической поляризуемости композитных проводящих нанопроволок с диэлектрической оболочкой, происходящие при включении внешнего магнитного поля. Рассмотрены случаи, когда материал поверхностного изолирующего слоя проволок характеризовался бездисперсионной диэлектрической проницаемостью, либо обладал выраженной частотной дисперсией.

В ряде теоретических работ [1-6] приводятся результаты моделирования взаимодействия света с нанообъектами сферической и цилиндрической формы. В работе [1], на основе теории рассеяния Ми, получено выражение для тензора динамической поляризуемости сплошного кругового цилиндра, возбуждаемого полем произвольной конфигурации, а также представлены компактные выражения для всех элементов этого тензора. Авторы показали, что полученный тензор поляризуемости удовлетворяет ряду условий, и изучили поведение его компонент при изменении угла возбуждения, свойств материала и радиуса цилиндра. В работах [2, 3] получены выражения для тензоров поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров, состоящих из слоистых сферических наночастиц и построены спектры мнимых частей поляризуемостей. В [3], при выведении выражения для поляризуемости кластера, была учтена вырожденность электронного газа металлов, из которых состоят наночастицы. Было показано, что спектры поляризуемости таких систем существенно отличаются от спектров кластеров, в которых электронный газ металла не вырожден. Варьируя толщины металлических и диэлектрических компонент композитов, можно регулировать форму их спектров поглощения света.

Кроме того, появилось много работ, в которых разными способами рассчитаны поляризуемости нанопроволок из металлов, полупроводников и диэлектриков [4-6]. В рамках теории функционала плотности и модели "желе" исследованы электронная структура и линейный отклик на внешнее электрическое поле нитей простых металлов с квантово-размерным поперечным сечением. Обнаружено немонотонное изменение работы выхода и статической поляризуемости нити при увеличении ее радиуса [5].

В данной работе произведен расчет спектров дипольной электрической поляризуемости проводящих нанопроволок кругового сечения радиуса  $R$  (двухслойных нанопроволок с металлической или диэлектрической жилой) в монохроматическом поле  $E_0(\omega)$  электрической компоненты поля

электромагнитной волны. Предполагалось, что внутренняя жила нанопровода радиуса  $\rho$ , покрыта диэлектрическим материалом, который либо не имеет выраженной частотной дисперсии, т.е. характеризуется постоянной диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\varepsilon_2$ , либо его ДП  $\varepsilon_2(\omega)$  зависит от частоты  $\omega$ , как, например, в случае, когда оболочка толщиной  $R - \rho$  представляет собой кристаллоподобный слой, составленный из молекулярных J-агрегатов. Кроме того, рассматривается случай композита с диэлектрической жилой, покрытой металлическим слоем и не обладающей частотной дисперсией. Если частотная дисперсия кристаллоподобного материала связана с наличием в нем экситонных мод, то диэлектрическая проницаемость имеет вид  $\varepsilon_{ex}(\omega) = \varepsilon_0 - f^2 / [(\omega + i\Gamma)^2 - \omega_{ex}^2]$  [7]. Здесь,  $f^2$ - параметр, характеризующий связь фотонов с экситонами,  $\Gamma$ - параметр релаксации экситонных состояний,  $\omega_{ex}$ - частота экситонов,  $\varepsilon_0$ - ДП, обусловленная всеми другими электронными состояниями кроме экситонного, определяющего величину  $\omega_{ex}^2$ .

Характерные частоты локальных плазмонных колебаний зависят от структуры и формы частиц, и существенно изменяются при переходе от однородных к слоистым структурам, а также от сферической формы к цилиндрической. В постоянном магнитном поле отклик электронной плазмы металла на электромагнитное возмущение с частотой  $\omega$  становится анизотропным, а скалярная диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(\omega)$  плазмopodobной среды трансформируется в тензор второго ранга:  $\varepsilon(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}(\omega)$  [8]. В работе [9] методами электродинамики сплошных сред получены выражения для тензоров дипольной поляризуемости единицы длины слоистого композитного цилиндра ( $d=2$ ) с различными материалами жилы и внешнего слоя.

Тензор  $\vec{\mathbf{A}}$  дипольной поляризуемости единицы длины слоистого композитного цилиндра с проводящей жилой имеет вид [9]

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) = \\ = \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)\xi^2 \right] \times \quad , \quad (1) \\ \times \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

где  $\xi = \rho / R$ ,  $\varepsilon_3$  - диэлектрическая проницаемость окружающей среды. При выключении магнитного поля все тензорные величины редуцируются к своим скалярным прототипам и (1) трансформируется к известным выражениям [9] для поляризуемостей изотропных композитов.

Если проводящей в композите является оболочка, а корд – диэлектрический, поляризуемость слоистого цилиндрического композита с замагниченной проводящей оболочкой определяется выражением:

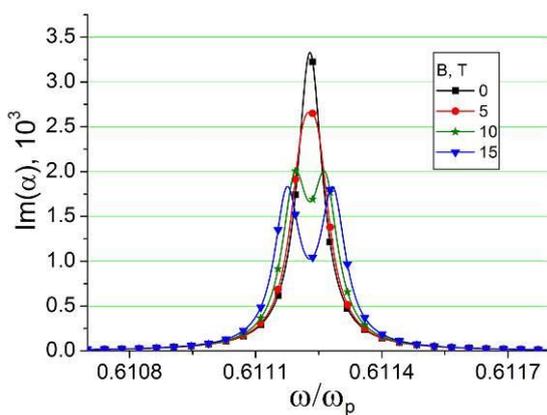
$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1, \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_3) = \\ = \left[ (\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_3) \xi^2 \right] \times \quad . (2) \\ \times \left[ (\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3) \xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

Тензор для цилиндрического композита металл - молекулярный кристалл выглядит так же, как (1), но теперь проницаемость диэлектрика является дисперсионной, то есть величиной, зависящей от частоты электромагнитного поля

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_{ex}(\omega), \varepsilon_3) = \\ = \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) + \varepsilon_3) \xi^2 \right] \times \quad . (3) \\ \times \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) + \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{ex}(\omega))(\varepsilon_{ex}(\omega) - \varepsilon_3) \xi^2 \right]^{-1} R^2 \end{aligned}$$

На основе выражений (1)-(3), нами были получены спектры дипольных поляризуемостей композитных наноцилиндров с оболочками для различных электрических и конфигурационных параметров этих систем. Все расчеты проведены для удельной дипольной динамической поляризуемости цилиндра  $\vec{\alpha} = \vec{\mathbf{A}} / R^2$ . Через  $\text{Im}(\alpha)$  обозначена мнимая часть компоненты  $\alpha_{11}$  тензора поляризуемости.

## 1 Металлический цилиндр с диэлектрическим бездисперсионным внешним слоем



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \varepsilon_2 = 2.2, \varepsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

Рис.1- Спектры поляризуемости цилиндра с металлической жилой в магнитном поле индукции  $B = 0 - 15$  Тл.  $\rho = 30$  нм

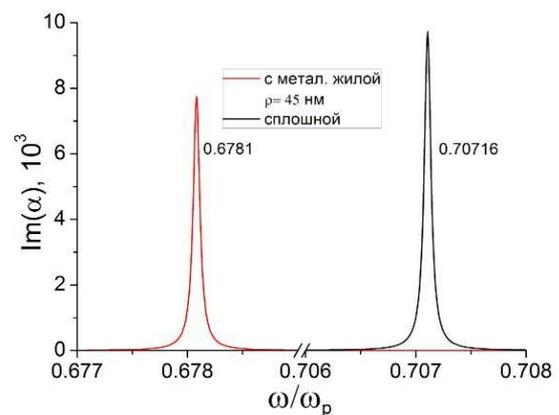


Рис.2- Спектры поляризуемости сплошного наноцилиндра (черная кривая) и слоистого с металлической жилой и диэлектрической оболочкой (красная кривая).

Из рисунка 1 видно, что спектр поляризуемости слоистого наноцилиндра имеет один плазмонный резонанс на относительной плазмонной частоте  $\omega/\omega_p = 0.6112$ , который деформируется в постоянном внешнем магнитном поле индукции  $\mathbf{B}$ . При других значениях расчетных параметров системы резонансная частота сдвигается. На рисунке 2, для сравнения, показаны спектры поляризуемости безоболочечного и слоистого цилиндров. Черная кривая отвечает поляризуемости сплошного металлического цилиндра (плазмонный резонанс на относительной частоте  $\omega/\omega_p = 0.7072$ ). По сдвигу спектральной полосы (красная кривая) можно видеть, что при добавлении внешнего диэлектрического слоя к металлической жиле частота плазмонного резонанса смещается в низкочастотную область. Формула (1) позволяет легко переходить от двухслойного цилиндра к однослойному - металлическому. Для этого достаточно устремить  $\rho \rightarrow R$ , т.е. принять  $\rho = R = 50$  нм.

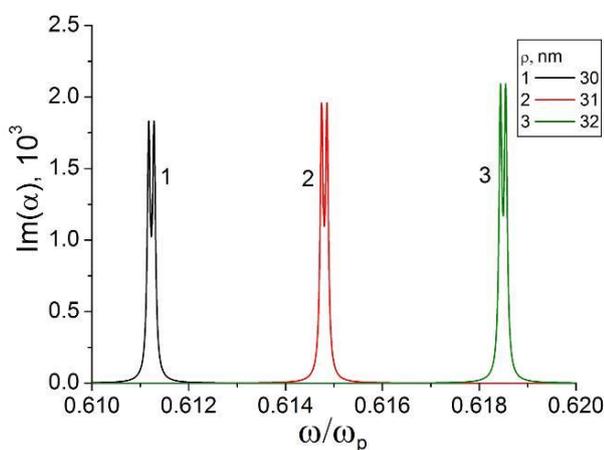


Рис. 3- Спектры поляризуемости композитного цилиндра для различного значения радиуса сердцевины.  $\epsilon_2 = 2.2$

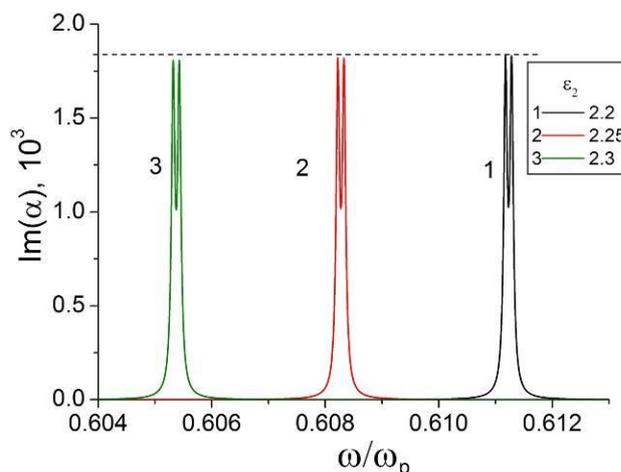


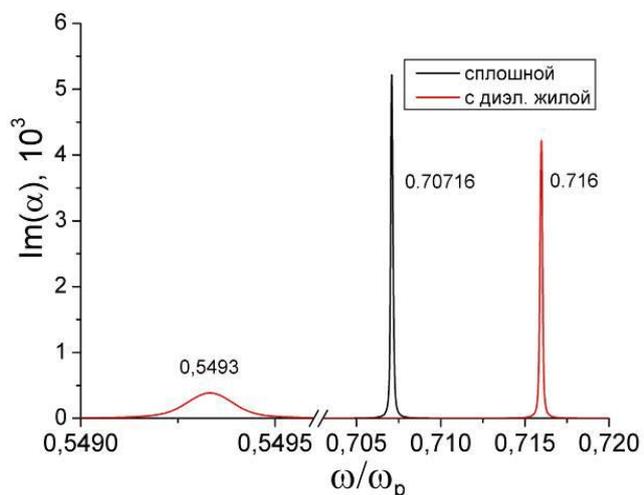
Рис. 4 - Влияние материала диэлектрического слоя на положение плазмонно-резонансного пика.  $\rho = 30$  нм

$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, B = 15 \text{ Тл}, \epsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

С увеличением толщины металлического слоя значение поляризуемости увеличивается со смещением резонансной частоты в высокочастотную область (рис. 3). С ростом величины диэлектрической проницаемости слоя, спектральная полоса мнимой части поляризуемости композита смещается в низкочастотную область, с небольшим уменьшением амплитуды  $\text{Im}(\alpha)$  (рис. 4).

## 2 Металлический цилиндр с диэлектрической бездисперсионной сердцевиной

Для такой конфигурации аксиально-симметричного композита расчеты проведены на основе выражения (2). Главное отличие от формулы (1) состоит в том, что здесь  $\epsilon_1$  является константой, а ДП  $\epsilon_2$  становится зависящим от частоты тензором второго ранга  $\epsilon_2 \rightarrow \vec{\epsilon}_2(\omega)$ .



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \epsilon_1 = 2.2, \epsilon_3 = 1$$

Рис. 5 - Сравнение спектров поляризуемости сплошного цилиндра радиусом 50 нм со слоистым цилиндром из диэлектрической жилы и металлической оболочки радиусом 5 нм.

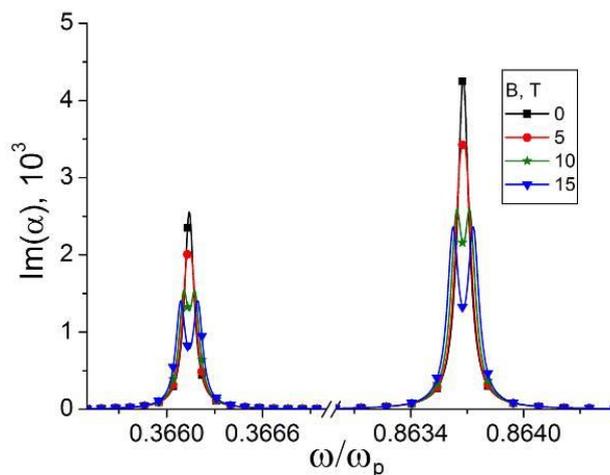
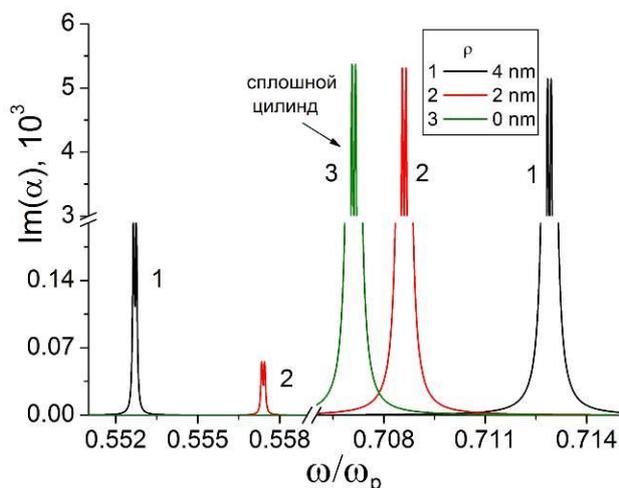


Рис. 6 - Спектры поляризуемости цилиндра с диэлектрической жилой и металлическим слоем в магнитном поле индукции  $B = 0 - 15$  Тл.  $R = 50, \rho = 30$  нм

При такой последовательности размещения слоев цилиндра в спектрах его поляризуемости наблюдаются две спектральные полосы, чувствительные к магнитному полю (рис. 6). Ширины полос одинаковы, отличаются лишь их амплитуды. Наличие двух резонансов обусловлено тем, что имеется две поверхности раздела фаз: металл - диэлектрическая сердцевина и металл - окружающая среда.



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, B = 15 \text{ Тл}, \varepsilon_3 = 1, R = 50 \text{ нм}$$

Рис. 7- Спектры поляризуемости композитного цилиндра с диэлектрической жилой и металлическим слоем для различных значений радиуса сердцевины.  $\varepsilon_1 = 2.2$

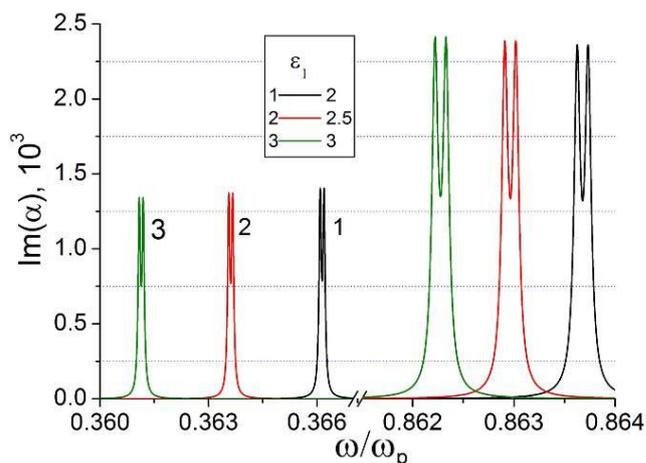


Рис. 8 - Влияние ДП  $\varepsilon_1$  диэлектрической жилы на положение плазмонно-резонансного пика.  $\rho = 30 \text{ нм}$

Из рисунка 7 видно, что с увеличением радиуса диэлектрической жилы обе резонансные частоты смещаются, причем в противоположные стороны. Низкочастотный пик постепенно уменьшается по величине, а высокочастотный, наоборот, возрастает (рис. 7). При  $\rho \rightarrow 0$ , цилиндр превращается из слоистого в сплошной, при этом один из двух резонансных пиков исчезает.

С ростом проницаемости  $\varepsilon_1$  амплитуда высокочастотного пика увеличивается, а низкочастотного – уменьшается, при этом обе резонансные спектральные полосы смещаются в низкочастотную область (рис. 8).

### 3 Металлический цилиндр с экситоногенным внешним слоем

В данном разделе рассматривается металлический наноцилиндр покрытый кристаллоподобным молекулярным слоем, в котором могут возникать экситоны Френкеля. На спектрах поляризуемости, в отличие от первых двух случаев, наблюдаются три спектральных полосы (рис. 9 а, б). Рисунки 9а и 9б являются фрагментами одного спектра, но для удобства график был разбит на две части. В высокочастотной области располагается плазмонный пик, который чувствителен к магнитному полю, а в низкочастотной находятся два экситонных резонанса.

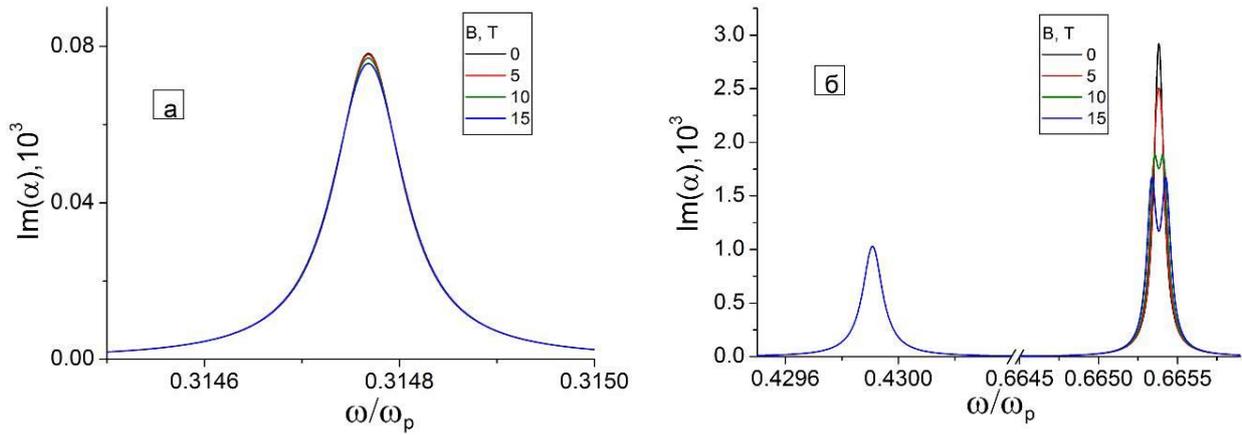


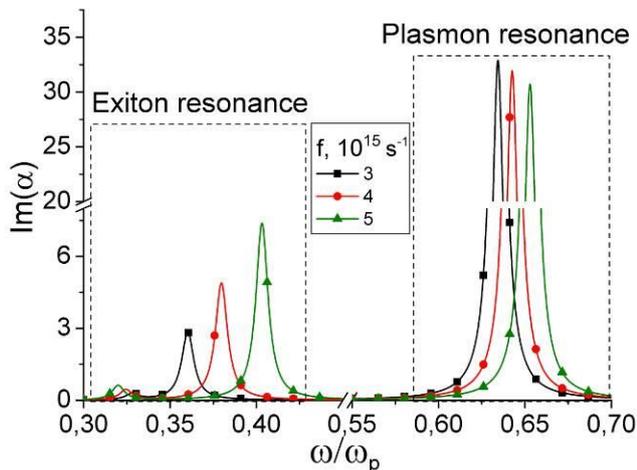
Рис. 9(а, б) - Спектры поляризуемости композитного цилиндра с металлической жилой и экситоногенным слоем в магнитном поле индукции  $B = 0 - 15$  Тл.

$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{12} \text{ c}^{-1}, \varepsilon_2 = 2.2, \varepsilon_3 = 1, \varepsilon_0 = 2, R = 50 \text{ нм}, \rho = 30 \text{ нм},$$

$$\omega_{\text{exc}} = 4.6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}, \Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{11} \text{ c}^{-1}, f = 6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}$$

Далее в расчетах принималось  $\gamma = 10^{14} \text{ c}^{-1}$ ,  $\Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{13} \text{ c}^{-1}$ , т.е. значения, характерные для «комнатной» температуры.

Увеличение силы осциллятора  $f$  приводит к увеличению амплитуды экситонного резонансного пика и уменьшению плазмонного, при этом экситонные пики расходятся относительно друг друга (рис. 10). С увеличением частоты, максимум экситонной полосы смещается в высокочастотную область, вместе с этим происходит незначительное смещение полосы плазмонного резонанса (рис. 11).



$$\omega_p = 1.38 \times 10^{16} \text{ c}^{-1}, \gamma = 10^{14} \text{ c}^{-1}, \varepsilon_0 = 2, \varepsilon_2 = 2.2, \varepsilon_3 = 1, R = 50, \rho = 30 \text{ нм}, \Gamma = 5.9 \text{ r } 10^{13} \text{ c}^{-1}$$

Рис. 10 - Поляризуемость цилиндра с экситон-плазмонным взаимодействием при разных значениях  $f$ .  $\omega_{\text{exc}} = 4.6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}$

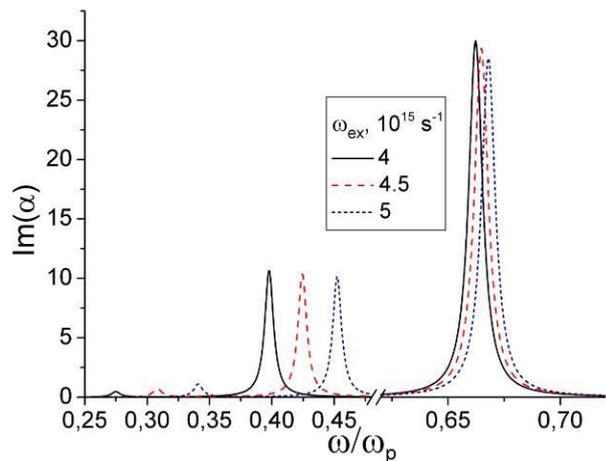


Рис. - 11 Изменение спектров поляризуемости при разных значениях частоты перехода, соответствующей центру экситонной полосы.  $f = 6 \text{ r } 10^{15} \text{ c}^{-1}$

Изменение радиуса металлической жилы в большую сторону, приводит к росту величины плазмонного пика и к уменьшению экситонного.

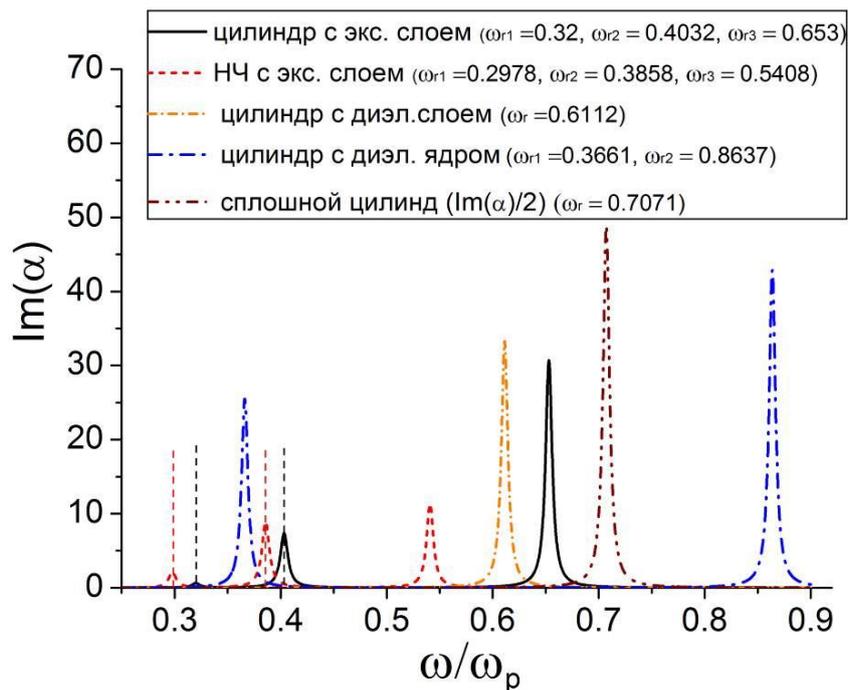


Рис. 12 - Спектры поляризуемостей сферической наночастицы и слоистых цилиндров различной структуры

Для сравнения, на рисунке 12 приведены спектры поляризуемостей всех видов рассмотренных цилиндров (величина поляризуемости сплошного цилиндра уменьшена в два раза). В легенде напротив каждой кривой приведены резонансные частоты соответствующих пиков для конкретных геометрических параметров (как было показано выше, при изменении некоторых параметров частоты плазмонно-резонансных пиков смещаются).

### Заключение

Таким образом, в работе подробно исследованы поляризационные характеристики цилиндрических однослойных и двуслойных наноструктур. Показано, что спектры дипольной поляризуемости цилиндров зависят от материала и толщины слоев. В зависимости от того, является ли металлической жила композита или его внешний слой, спектры плазмонного резонанса выглядят по-разному. Так, в случае композита «металлическая жила - бездисперсионный диэлектрический слой» в спектре наблюдается одна резонансная полоса, а в случае инвертированной системы – две. Если плазмонная металлическая жила покрыта экситоногенным слоем, в спектре наблюдается три резонансных полосы.

Обнаружено влияние внешнего магнитного поля на спектральные характеристики композитных наночилиндров. В спектрах поляризуемости слоистых систем возникают расщепления резонансных пиков на две либо три компоненты, в зависимости от взаимной ориентации векторов магнитной

индукции  $\mathbf{B}$  и напряженности  $\mathbf{E}$  электрического поля. Положения и амплитуды резонансов зависят от структурных характеристик композитов.

Работа выполнена при поддержке грантами РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 16-42-560671), а также по Госзаданию Министерства образования и науки РФ (проект № 233).

#### Список литературы

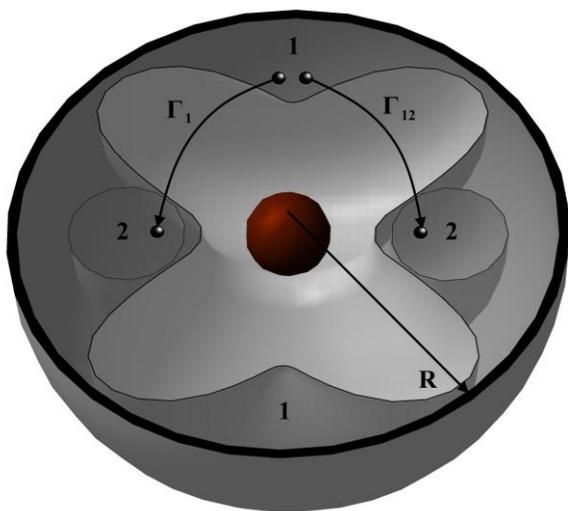
1. *Strickland, D. Dynamic polarizability tensor for circular cylinders / D. Strickland, A. Ayón, A. Alù // Phys. Rev. B. –2015. –V. 91. –Iss.8. –P. 085104.*
2. *Кучеренко, М. Г. Спектры поляризуемости нанокластеров из двух композитных частиц во внешнем магнитном поле / М. Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // Вестн. Оренбург. гос. ун-та. –2015. – № 13. –С. 156-161.*
3. *Кучеренко, М. Г. Дипольные поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров из проводящих однородных и слоистых частиц с вырожденным электронным газом / М. Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // Известия вузов. Физика. –2016. –Т. 59. –№ 9. –С. 87-93.*
4. *Завитаев, Э.В. Поглощение электромагнитного излучения металлической частицей цилиндрической формы / Э.В. Завитаев, А.А. Юшканов, Ю.И. Яламов // Журнал технической физики. –2001. –Т. 71. –№ 11. –С. 114-118.*
5. *Smogunov, A. N. Electronic Structure and Polarizability of Quantum Metallic Wires / A. N. Smogunov , L. I. Kurkina , O. V. Farberovich // Physics of the Solid State. –2000. –V. 42. –№. 10. - P. 1898-1907.*
6. *Kallos, E. Resonance properties of optical all-dielectric metamaterials using two-dimensional multipole expansion / E. Kallos, I. Chremmos, V. Yannopoulos // Physical Review B. –2012. –V.86. –P. 245108.*
7. *Давыдов, А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. //М.: Наука, 1976. –640 с.*
8. *Kucherenko, M.G. Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field / M.G. Kucherenko, V.M. Nalbandyan // Physics Procedia. –2015. –V.73. –P. 136–142.*
9. *Кучеренко, М.Г. Генерация экситонов и поглощение света молекулами в слое композитной наноструктуры с замагниченной проводящей частью / М. Г. Кучеренко // Универ. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 1-3 февр. 2017 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург , 2017. (Настоящий сборник).*

# АННИГИЛЯЦИЯ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В СФЕРИЧЕСКИХ ПОРАХ С ФЕРРОМАГНИТНЫМИ ЧАСТИЦАМИ

Кучеренко М.Г., Неясов П.П.

Центр лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Спин-селективная аннигиляция триплетных (Т) электронных возбуждений, локализованных на молекулах, протекает с различной скоростью в зависимости от того, как происходит взаимное сближение молекул-реактивов в когерентной Т-Т-паре [1-3]. В зависимости от особенностей строения наноструктурированных систем подвижность участвующих в реакции молекул может существенно изменяться. Так, в [4] исследована эволюция синглетного спинового состояния пары двух триплетных молекул, локализованных в области наноячейки с двоямным потенциалом, в условиях надбарьерных прыжков одной из молекул, при различных величинах индукции внешнего магнитного поля. Анализ кинетики был основан на решении уравнений для спиновых матриц плотности пары, отвечающих одно- и двоямному размещению молекул. В результате был установлен характер влияния параметров двоямного потенциала на скорость межъямных прыжков и результирующую населенность реакционноспособного состояния двух триплетов. Определены условия, при которых может быть осуществлено регулирование выходом триплет-триплетной аннигиляции посредством внешнего магнитного поля.



**Рис. 1.** Сферическая наноячейка с глобулярной ферромагнитной частицей. Показаны характерные области с различными значениями индукции  $\mathbf{B}$  магнитного поля, разделенные потенциальными барьерами.

В данной работе исследована возможность магнитного управления спин-селективной реакцией посредством внедрения в наноструктурированную систему ферромагнитных частиц, обладающих остаточной намагниченностью, или приобретающую таковую в результате внешнего магнитного воздействия.

Аналогичная задача решалась, например в [5], с той лишь разницей, что в работе [5] вместо ферромагнитной частицы фигурировал парамагнитный примесный центр атомарного (молекулярного) типа. Таким образом, авторы [5] исследовали трехспиновую молекулярную систему, с возможностью осуществления в ней спинового катализа реакций.

Далее рассмотрим отдельную сферическую наночастицу радиуса  $R$  пористой среды, в центре объема которой находится глобулярная ферромагнитная наночастица радиуса  $R_0 < R$ , а также две триплетные молекулы разного сорта. Будем считать, что частица однородно намагничена, так что в области полости вокруг нее создается неоднородное анизотропное магнитное поле дипольного источника. Предполагается, что Т-молекулы могут перемещаться в тонком сферическом слое, образованном стенками поры и поверхностью наночастицы, совершая прыжки через потенциальный барьер, разделяющий две характерные угловые зоны (Рис. 1). Одна из них, зона 1, образована двумя подзонами в области полюсов, а другая – «экваториальная» зона 2 – образует кольцевой пояс при угле  $\theta = \pi/2$ . Величина индукции  $B$  магнитного поля в этих зонах различна. Молекулы когерентной Т-Т-пары могут быть локализованы как в полюсных областях, так и в области кольцевого пояса. Кроме того, возможен случай их раздельного нахождения в качественно различных зонах (на полюсе и в экваториальной области).

Спин-гамильтониан Т-Т-пары может быть записан в виде [1-4,6]

$$H = g^{(1)} \mu_B B(\theta_1) S_Z^{(1)} + g^{(2)} \mu_B B(\theta_2) S_Z^{(2)} - 2J_{exc}(r_{12}) \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_1 \mathbf{D}(\Omega_1) \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \mathbf{D}(\Omega_2) \mathbf{S}_2. \quad (1)$$

Первые два слагаемых определяют зеемановское взаимодействие одиночных триплетов (с различными g-факторами) Т-Т-пары с локальным магнитным полем индукции  $B(\theta_{1(2)})$ , создаваемым ферромагнитной наночастицей, третье – межмолекулярное обменное взаимодействие с обменным интегралом  $J_{exc}(r_{12})$ , зависящим от расстояния  $r_{12}$  между триплетами пары, а два последних – внутритриплетное спин-спиновое взаимодействие. Операторы  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$  – векторные операторы электронных спинов молекул 1 и 2;  $\mathbf{D}(\Omega_{1(2)})$  – тензор магнитного диполь-дипольного взаимодействия. Гамильтониан спин-спинового взаимодействия учитывает только магнитодипольное внутримолекулярное взаимодействие  $H_{ss} = -\mathbf{S}_1 \mathbf{D}_1 \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \mathbf{D}_2 \mathbf{S}_2$ , межтриплетное взаимодействие этого типа полагается малым. Оператор обменного взаимодействия диагонален в парном базисе  $|JM\rangle$  суммарного электронного спина  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$  Т-Т-пары ( $J, M$  – суммарный спиновый момент и его z-проекция). На больших межмолекулярных расстояниях  $r$  величина обменного интеграла быстро падает, устремляясь к нулю в пределе:  $J_{exc}(r) \rightarrow 0$ .

Спиновая эволюция пары, т.е. регулярная ее динамика между квазивыврожденными состояниями, управляемая гамильтонианом (1), возможна лишь при размещении молекул пары в разных потенциальных ямах, или на достаточно удаленных друг от друга сегментах кольцевого пояса – когда межмолекулярное обменное взаимодействие «выключено». Наоборот, акт Т-Т-слияния возбуждений возможен лишь при нахождении молекул в одной и той же яме – полюсной, или кольцевой, причем в последнем случае аннигиляция

имеет место лишь при реализации малых расстояний между молекулами кольца, и при наличии ненулевого синглетного компонента в парном спиновом состоянии  $|JM\rangle$  [1-2].

Описание кинетики спин-селективной аннигиляции триплетных электронных возбуждений в аксиально-симметричном потенциальном поле  $V(\theta)$  (рис. 1) может быть произведено на основе оператора плотности  $\rho(\theta_1, \theta_2, t)$ , удовлетворяющего следующему уравнению со спин-гамильтонианом Т-Т-пары (1) и транспортным оператором Фоккера-Планка (оператором диффузии в угловом пространстве с коэффициентом  $D_\theta$  в потенциальном поле  $V(\theta)$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\theta_1, \theta_2, t) = & -\frac{i}{\hbar} [H(\theta_1, \theta_2), \rho(\theta_1, \theta_2, t)] + \\ & + \sum_{q=1}^2 D_q \operatorname{div} \left( \nabla_q + \frac{1}{k_B T} \frac{1}{R} \frac{dV}{d\theta_q} \right) \rho(\theta_1, \theta_2, t) - \frac{1}{2} U(r_{12}) \{ \rho(\theta_1, \theta_2, t) P_S + P_S \rho(\theta_1, \theta_2, t) \}. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь функция  $U(r)$  – дистанционно-зависящая скорость элементарного акта аннигиляции;  $P_S = |00\rangle\langle 00|$  проекционный оператор на синглетное состояние Т-Т-пары.

Однако описание квантовой эволюции на основе общего уравнения (2) в общем случае достаточно сложно, и ниже будут рассмотрены два упрощенных подхода: 1) описание межъямного транспорта реагентов на основе модели дискретных переходов (прыжков) подвижных Т-возбуждений и 2) адиабатическое приближение для медленного свободного перемещения молекул в безбарьерном шаровом слое ( $V(\theta) \equiv 0$ ).

#### *Дискретные угловые состояния в описании спиновой динамики Т-Т-пар*

В данном подходе, в зависимости от того в какой из потенциальных ям находится Т-Т-пара (в «полюсной» или «кольцевой» области) введем соответствующие операторы плотности  $\rho_1(t)$  и  $\rho_2(t)$ . Таким образом, нижний индекс будет обозначать принадлежность *обеих Т-молекул* пары к потенциальной яме 1 или 2. Кроме того, введем оператор плотности  $\rho_{12}(t)$  для описания состояний пары, в которых одна Т-молекула находится в яме 1, а другая – в яме 2. Скорости  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  прыжков одной из частиц между ямами будем полагать различными и постоянными. Очевидно, что они существенно превышают по величине скорости  $\Gamma_1''$  и  $\Gamma_2''$  синхронных прыжков двух молекул пары. По этой причине межъямные перемещения пар частиц не учитываются. Тогда вместо операторного уравнения (3) можем записать следующую систему уравнений

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \rho_1 = -\frac{i}{\hbar} [H(B_1, B_1), \rho_1] - \frac{1}{2} \{ \rho_1 \Lambda_1 + \Lambda_1 \rho_1 \} - K_{-1} \rho_1(t) - \Gamma_1 \rho_1(t) + \Gamma_{21} \rho_{12}(t) + Q_1 \\ \frac{d}{dt} \rho_2 = -\frac{i}{\hbar} [H_0(B_2, B_2), \rho_2] - \frac{1}{2} \{ \rho_2 \Lambda_2 + \Lambda_2 \rho_2 \} - K_{-2} \rho_2(t) - \Gamma_2 \rho_2(t) + \Gamma_{12} \rho_{12}(t) + Q_2 \\ \frac{d}{dt} \rho_{12} = -\frac{i}{\hbar} [H_0(B_1, B_2), \rho_{12}(t)] - K_{-3} \rho_{12}(t) - (\Gamma_{12} + \Gamma_{21}) \rho_{12}(t) + \Gamma_1 \rho_1(t) + \Gamma_2 \rho_2(t) \end{cases} \quad (4)$$

где спин-гамильтониан  $H_0$  «рыхлой» Т-Т-пары не содержит обменного взаимодействия

$$H_0(B_\alpha, B_\beta) = g^{(1)} \mu_B B_\alpha S_Z^{(1)} + g^{(2)} \mu_B B_\beta S_Z^{(2)} - \mathbf{S}_1 \mathbf{D}(\Omega_1) \mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2 \mathbf{D}(\Omega_2) \mathbf{S}_2. \quad (5)$$

Константы  $K_{-P}$  в (4) – скорости распада когерентных пар трех типов  $P=1,2,3$ . Аннигиляционные операторы  $\Lambda_{1,2} = U_{1,2} P_S$  в (4) определяются через проектор  $P_S = |00\rangle\langle 00|$  на синглетное состояние Т-Т-пары и не зависящие от спина скорости  $U_1 = K_S$  и  $U_2 = K_S \cdot \Delta\varphi / 2\pi$ . Множитель  $\Delta\varphi / 2\pi$  для скорости аннигиляции пары на кольце представляет собой вероятность одновременного нахождения двух молекул на дуге малой длины  $\Delta\varphi \cdot R$  окружности  $C_R$ . Таким образом учитывается резкое уменьшение скорости реагирования частиц при их удалении друг от друга на окружности  $C_R$ . При более детальном описании особенностей аннигиляции Т-молекул на кольце может быть введен коэффициент  $D_C$  их диффузии и дистанционно-зависящая скорость реакции  $U(r_{12}) = U(2R \sin(\varphi/2))$ . Источники  $Q_{1,2} = \Gamma_{2,1} n_1 n_2 I$  в двух первых уравнениях системы (4) учитывают некогерентное образование Т-Т-пар в каждой из двух зон, в результате прыжков  $1 \leftrightarrow 2$  отдельной молекулы и ее некоррелированной встрече в данной зоне с молекулой иного сорта. Через  $n_1, n_2$  здесь обозначены концентрации молекул в различных областях поры (для каждого из двух сортов);  $I$  – единичный оператор.

Общее решение системы (4) будет иметь громоздкий вид, поэтому для его упрощения и возможности проведения качественного анализа явления ограничимся рассмотрением случая сильной асимметрии потенциальных ям 1 и 2. Будем считать яму 1 мелкой по сравнению с ямой 2. В случае высокого барьера  $\Delta V_q \gg k_B T$  и режима сильного трения частоты переходов  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  между ямами определяются формулой Крамерса

$$\Gamma_q = \frac{\omega_q \omega_\eta m D_q}{2\pi k_B T} \exp \left[ -\frac{\Delta V_q}{k_B T} \right], \quad q=1,2 \quad (6)$$

где  $m$  – масса молекулы;  $D_q$  – коэффициент ее диффузии в  $q$ -й яме;  $\Delta V_q$  – высота потенциального барьера относительно дна  $q$ -й ямы;  $\omega_q$  – частота гармонических колебаний молекулы в  $q$ -й яме;  $\omega_\eta$  – частота гармонических колебаний молекулы «на дне перевернутого барьера». С учетом принятого допущения получаем  $\Gamma_{12} \gg \Gamma_{21}, \Gamma_2$  и  $\Gamma_1 = \Gamma_{12}$ . Тогда переходы  $2 \rightarrow 1$  между ямами не имеют места, поскольку скорости прыжков  $\Gamma_{21}$  и  $\Gamma_2 \rightarrow 0$ . В результате первое уравнение системы (4) становится автономным

$$\frac{d}{dt} \rho_1(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(B_1, B_1), \rho_1] - \frac{1}{2} \{ \rho_1 \Lambda_1 + \Lambda_1 \rho_1 \} - K_{-1} \rho_1(t) - \Gamma_1 \rho_1(t). \quad (7)$$

Его решение в операторном виде использовалось ранее в [2,4]

$$\rho_1(t) = \exp[-\alpha_1 t] \exp(\widehat{K}_1 t) \rho_1(0) \exp(\widehat{K}_1^* t), \quad \alpha_1 = K_{-1} + \Gamma_1 \quad (8)$$

где теперь

$$\widehat{K}_1(B_1) = -\frac{i}{\hbar} \left( H(B_1, B_1) - i \frac{\hbar}{2} \Lambda_1 \right), \quad \widehat{K}_1^*(B_1) = \frac{i}{\hbar} \left( H(B_1, B_1) + i \frac{\hbar}{2} \Lambda_1 \right). \quad (9)$$

– неэрмитовы «кинетические» операторы, определяющие спиновую динамику и аннигиляцию когерентных Т-Т-пар в области «полюсов».

Второе и третье уравнения системы (4) составляют друг с другом совместную систему неоднородных уравнений и содержат источники  $Q_2 = \Gamma_1 n_1 n_2 I$  и  $\Gamma_1 \rho_1(t)$ , заданный посредством (8), в качестве неоднородных членов

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \rho_2 = \widehat{K}_2(B_2) \rho_2(t) + \rho_2(t) \widehat{K}_2^*(B_2) - K_{-2} \rho_2(t) + \Gamma_1 \rho_{12}(t) + \Gamma_1 n_1 n_2 I \\ \frac{d}{dt} \rho_{12} = \widehat{K}_{12}(B_1, B_2) \rho_{12}(t) + \rho_{12}(t) \widehat{K}_{12}^*(B_1, B_2) - K_{-3} \rho_{12}(t) - \Gamma_1 \rho_{12}(t) + \Gamma_1 \rho_1(t) \end{cases} \quad (10)$$

Кинетические операторы  $\widehat{K}_2$  и  $\widehat{K}_{12}$  в (10) имеют вид

$$\widehat{K}_2(B_2) = -\frac{i}{\hbar} \left( H_0(B_2, B_2) - i \frac{\hbar}{2} \Lambda_2 \right), \quad \widehat{K}_{12}(B_1, B_2) = -\frac{i}{\hbar} H_0(B_1, B_2), \quad (11)$$

а  $\widehat{K}_2^*$  и  $\widehat{K}_{12}^*$  – их комплексные сопряжения.

Для построения решения системы уравнений (10) методом, предложенным в [4, 6], введем новые операторы  $\rho_{II}(t)$  и  $\rho_{III}(t)$  соотношениями

$$\rho_2(t) = \exp[-\alpha_2 t] \exp(\widehat{K}_2 t) \rho_{II}(t) \exp(\widehat{K}_2^* t), \quad \alpha_2 = K_{-2}, \quad (12)$$

$$\rho_{12}(t) = \exp(-\alpha_3 t) \exp(\widehat{K}_{12} t) \rho_{III}(t) \exp(\widehat{K}_{12}^* t), \quad \alpha_3 = K_{-3} + \Gamma_1. \quad (13)$$

Тогда, на основе (12)-(13), повторяя преобразования, аналогичные проведенным в [4, 6], и с учетом начальных условий  $\rho_2(0) = \rho_{II}(0)$ ,  $\rho_{12}(0) = \rho_{III}(0)$  приходим к выражениям

$$\rho_{II}(t) = \rho_2(0) + \Gamma_1 \int_0^t \exp(\alpha_2 t') U_2(-t') [\rho_{12}(t') + n_1 n_2 I] U_2^*(-t') dt' . \quad (14)$$

$$\rho_{III}(t) = \rho_{12}(0) + \Gamma_1 \int_0^t \exp(\alpha_3 t') U_3(-t') \rho_1(t') U_3^*(-t') dt' . \quad (15)$$

В (14)-(15)  $U_2(t)$ ,  $U_3(t)$  представляют собой экспоненциальные операторы  $U_2(t) = \exp(\widehat{K}_2 t)$  и  $U_3(t) = \exp(\widehat{K}_{12} t)$ .

Возвращаясь к исходным операторам плотности  $\rho_2(t)$  и  $\rho_{12}(t)$  на основе (12) и (13) из (14)-(15) получаем

$$\rho_2(t) = \exp(-\alpha_2 t) U_2(t) \left[ \rho_2(0) + \Gamma_1 \left( \int_0^t \exp(\alpha_2 t') U_2(-t') [\rho_{12}(t') + n_1 n_2 I] U_2^*(-t') dt' \right) \right] U_2^*(t) \quad (16)$$

$$\rho_{12}(t) = \exp(-\alpha_3 t) U_3(t) \left[ \rho_{12}(0) + \Gamma_1 \left( \int_0^t \exp(\alpha_3 t') U_3(-t') \rho_1(t') U_3^*(-t') dt' \right) \right] U_3^*(t) . \quad (17)$$

Заметим, что в отличие от аналогичных выражений, полученных в [4,6] и представляющих собой интегральные уравнения для операторов плотности, формулы (17) и (16) являются точными решениями системы (10), и вместе с (8) дают исчерпывающее решение поставленной задачи.

Операторные решения (8), (16)-(17) позволяют компактно записать информацию о временных зависимостях большого числа (243) матричных элементов  $\langle JM | \rho_1(t) | JM' \rangle$ ,  $\langle JM | \rho_2(t) | JM' \rangle$  и  $\langle JM | \rho_{12}(t) | JM' \rangle$ . Вычисления ключевых из них, главным образом таких, как  $\langle 00 | \rho_1(t) | 00 \rangle$  и  $\langle 00 | \rho_2(t) | 00 \rangle$ , сопряжены с определением *всех* матричных элементов  $\langle JM | \rho_q(t) | JM' \rangle$  ( $q=1, 2, 12$ ).

#### *Приближение сильного магнитного поля*

В сильном магнитном поле состояния  $|JM\rangle$ , отличающиеся по магнитному квантовому числу  $M$ , существенно разнесены по зеемановской энергии. В силу этого наиболее связанными друг с другом за счет разности g-факторов триплетов и спин-спинового взаимодействия будут состояния пары с нулевой проекцией  $M$ , то есть состояния  $|J0\rangle \equiv |J\rangle$ . Приближение сильного поля заключается в ограничении базиса состояний пары состояниями  $|J0\rangle$ . Тогда каждая из матриц плотности  $\langle JM | \rho_q(t) | JM' \rangle$  ( $q=1, 2, 12$ ) становится матрицей размерности  $3 \times 3$ . Это существенно упрощает выражения для элементов матриц плот-

ности и соответствующие расчеты на их основе, что и было использовано нами ранее в [4, 6-7].

Выражение для матричного элемента, определяющего динамику населенности парного синглетного состояния триплетов в области полюсов, используя (8) можно записать в виде

$$\langle 00 | \rho_1(t) | 00 \rangle = \exp(-\alpha_1 t) \sum_{J'} \langle 0 | \exp(K_1 t) | J \rangle \langle J | \rho_1(0) | J' \rangle \langle J' | \exp(K_1^* t) | 0 \rangle. \quad (18)$$

В схожей манере, но в гораздо более громоздком виде, на основе операторных равенств (16)-(17) может быть записан синглетный матричный элемент  $\langle 00 | \rho_2(t) | 00 \rangle$ . Матричные элементы  $\langle 00 | \rho_{1(2)}(t) | 00 \rangle$ , определяющие динамику населенности парного синглетного состояния в двух разных зонах, можно вычислить на основе (18) и (16)-(17) с помощью теоремы Сильвестра для матричных экспонент [2, 6-7]. Матричные элементы операторов  $K_q$ , заданных формулами (9) и (11) в базисе  $|J0\rangle = |J\rangle$ , вычислены нами ранее в [2-4], с учетом всех магнитных взаимодействий, определяющих тонкую структуру энергетического спектра триплетов. В качестве начальных условий для операторов плотности  $\rho_q(0)$  могут быть приняты следующие

$$\rho_1(0) = \frac{1}{9} [ |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| ], \quad \rho_2(0) = \frac{1}{9} \left[ \left( 1 - \frac{\Delta\varphi}{2\pi} \right) |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| \right].$$

Отказ от приближения сильного магнитного поля требует включения в базис всех состояний  $|JM\rangle$ . В задаче для триплет-дублетной пары это было выполнено, например, в [8].

#### *Однородное размещение молекул в слое*

Пусть, теперь, T-центры сорта А локализованы в приосевых областях магнитного диполя наночастицы (зона полюсов), а триплетные молекулы сорта В статистически однородно размещены по сферическому слою. Такая ситуация возможна в случае свободной диффузии ( $V(\theta) \equiv 0$ ) молекул В, быстрой, по сравнению с характерными частотами  $\omega$  спиновой динамики системы:  $D_B / R^2 \gg \omega$ . Разбивая сферический слой на полосы одинаковой ширины (углового размера  $d\theta$ ), получаем, что наибольшую площадь  $dS = R^2 \sin\theta d\theta$  будет иметь пояс, расположенный на экваторе (т.е. при  $\theta = \pi/2$ ). Тогда аддитивная добавка к константе скорости T-T-аннигиляции может быть записана в виде

$$\Delta K(B(0)) = 2\pi \int_0^{\infty} dt \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta U(r_\theta) \langle 00 | \rho(t | B(\theta)) | 00 \rangle,$$

где  $r_\theta = 2R \sin \theta / 2$  – расстояние между молекулами-партнерами по аннигиляции. Заметим, что в отсутствие границ зон, очерченных барьерами функции  $V(\theta)$ , нижний индекс у оператора плотности  $\rho_q(t)$  исчезает – его роль выполняет теперь непрерывно изменяющийся угловой аргумент  $\theta$ .

#### *Медленная диффузия подвижных молекул в слое*

При локализации центров сорта А и малых коэффициентах диффузии  $D_B / R^2 \ll \omega$  уравнение (2) можно решать используя адиабатическое приближение. Так, на нулевом этапе полагаем  $D_B = 0$ , и уравнение для оператора плотности  $\rho^{(0)}(\theta, t)$  сводится к (7), решение которого представлено формулой (8). Уравнение для оператора плотности  $\rho^{(1)}(\theta, t)$  первого приближения получаем из (2) заменой диффузионного слагаемого уже определенным на предыдущем итерационном шаге неоднородным членом-источником

$$\frac{D_B}{R^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \rho^{(0)}(\theta, t).$$

После этого решение первого приближения может легко быть получено, и будет напоминать по структуре (8). При необходимости данная итерационная процедура может быть продолжена.

#### *Список литературы*

1. Кучеренко, М.Г. Влияние магнитного поля на аннигиляцию триплетных электронных возбуждений, мигрирующих в сферических нанопорах. Объемные и поверхностные блуждания / М.Г. Кучеренко, Р.Н. Дюсембаев, С.В. Измоденова // Вестник ОГУ. 2009. - №9. С. 125-131.
2. Kucherenko, M.G. Spin dynamics and kinematics peculiarities of triplet excitations annihilation in solid adsorbent nanopores and soft nanostructures / M.G. Kucherenko, R.N. Dusembaev // Proc. IV Russian-Japanese Seminar "Molecular and Biophysical Magnetoscience". Orenburg: OSU. 2009. P. 89-91.
3. Кучеренко, М.Г. Зависимость скорости спин-селективной аннигиляции электронных возбуждений от внешнего магнитного поля в наноструктурированных системах / М.Г. Кучеренко, Р.Н. Дюсембаев // Хим. физика и мезоскопия. 2010. Том 12. - №1. – С. 112-119.
4. Кучеренко, М.Г. Магнитное поле изменяет скорость триплет-триплет-ной аннигиляции электронных возбуждений в наноструктурах с бистабильными пространственными состояниями // Матер. Всеросс. научно-

метод. конфер. «Универ. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2014. - 4014 с. Секция 6 «Вопросы фундамент., приклад. физики и физ. образования». - С. 1403 -1411.

5. Кубарев, С.И. Влияние магнитного поля на элементарные процессы в конденсированной фазе / С.И. Кубарев, А.С. Шустов // Теор. проблемы в хим. физике. Под ред. Кузнецова Н.М., Никитина Е. Е. и др. М.: «Наука», 1982. - С. 198-220.

6. Кучеренко, М.Г. Влияние внешнего магнитного поля на скорость взаимной аннигиляции триплетных электронных возбуждений в наноструктурах с бистабильными пространственными состояниями / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Химическая физика и мезоскопия. 2014. -Том 16. - №4. – С. 574-587.

7. Kucherenko, M.G. Positive magnetic field effect on mutual triplet triplet annihilation of mixed molecular pairs: Magnetosens. geterofusion induced by difference of g-factors / M.G. Kucherenko, R.N. Dusembaev // Chem. Phys. Lett. 2010. –V. 487. P. 58-61.

8. Кучеренко, М.Г. Спиновая динамика когерентных триплет-дублетных пар селективно реагирующих молекул во внешнем магнитном поле / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Химическая физика и мезоскопия. - 2015.- Т. 17.- №3.- С. 437-448.

# СПЕКТРЫ RYDMR ТУШЕНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ СПИН-ДУБЛЕТНЫМИ АКЦЕПТОРАМИ В НАНОСТРУКТУРАХ

Кучеренко М.Г., Пеньков С.А.

Центр лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Со времен первых теоретических [1-3] и экспериментальных работ [4-6], посвященных детектированию магнитного резонанса по выходу реакции (RYDMR), было проведено большое количество исследований, посвященных развитию данного направления. Параллельно совершенствовались оптические методы регистрации магнитного резонанса (ODMR) – такие как FDMR (детектирование магнитного резонанса по флуоресценции), PhDMR (детектирование магнитного резонанса по фосфоресценции) и другие.

С развитием спинтроники, нанофотоники и смежных с ними направлений стали особенно востребованными методы оптически детектируемого магнитного резонанса, которые позволяют не только изучать промежуточные состояния частиц-реагентов, но и дают информацию о характере их взаимодействия, движения спиновых центров и временах жизни этих промежуточных состояний.

В работе [7] было исследована эволюция синглетного спинового состояния пары двух триплетных (Т) молекул, локализованных в области наночастицы с двоячным потенциалом, в условиях надбарьерных прыжков одной из молекул, при различных величинах индукции внешнего магнитного поля. Установлен характер влияния параметров двоячного потенциала на скорость межъямных прыжков и результирующую населенность реакционноспособного состояния двух триплетов. Определены условия, при которых может быть осуществлено регулирование выходом триплет-триплетной аннигиляции посредством внешнего магнитного поля.

В работе [8] проведено исследование влияние внешнего магнитного поля на спин-селективное тушение триплетного (Т) возбужденного состояния молекулы невозбужденной молекулой с электронным спином  $S=1/2$  (спиновым дублетом D). Анализ магниточувствительной кинетики населенности Т-состояния проведен на основе решения уравнения для спиновой матрицы плотности Т-D-пары, учитывающего обменное взаимодействие между молекулами, внутритриплетное спин-спиновое взаимодействие и зеемановское взаимодействие, а также в предположении об отсутствии процессов спиновой релаксации. Исследованы зависимости величины магнитного эффекта спин-селективного Т-D- тушения фосфоресценции от характерных частотных параметров системы и константы скорости реакции. При больших значениях величины индукции внешнего магнитного поля (больше 0,1 Т) наблюдался положительный эффект в интенсивности свечения (4-6 %), то есть скорость Т-D-тушения фосфоресценции в магнитном поле уменьшалась, тогда как в

слабых полях (до 0,1 Т) эффективность тушения незначительно возростала (1-2%).

В данной работе, помимо решения задачи спиновой динамики когерентных пар реагентов, большое внимание уделено учету характера движения входящих в эти пары триплетных (Т) электронно-возбужденных молекул, относительно спин-дублетных (D) молекул-тушителей, в структурированной, на нанометровом масштабе, среде. Рассмотрены различные вариации пространственно-неоднородной среды с двуконфигурацией, формирующие специфические функции распределения встреч реагентов. Построение этих функций осуществлялось методом накопления статистических данных о времени первого достижения возбужденного центра молекулой-тушителем. Для решения этой задачи использовалось уравнение Ланжевена для броуновской частицы в потенциале с двуконфигурацией. Предполагалось, что иммобилизованный возбужденный триплетный центр локализован в одной из потенциальных ям, тогда как дублетный тушитель является мобильным. При этом было использовано ранее найденное точное аналитическое решение задачи о спиновой динамике когерентных Т-D-пар в условиях магнитного резонанса [8].

Спин-гамильтониан Т-D-пары во внешнем постоянном магнитном поле  $\mathbf{B}_0$ , и переменном поле амплитуды  $\mathbf{B}_1$ , с учетом внутритриплетного спин-спинового взаимодействия записывается в виде:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & g_T \mu_B \mathbf{B}_0 \hat{\mathbf{S}}_{Tz} + g_D \mu_B \mathbf{B}_0 \hat{\mathbf{S}}_{Dz} - \hat{\mathbf{S}}_T \hat{\mathbf{D}} \hat{\mathbf{S}}_T + \\ & + 2g_T \mu_B B_1 \cos(\omega t) \hat{S}_{Tx} + 2g_D \mu_B B_1 \cos(\omega t) \hat{S}_{Dx} \end{aligned} \quad (1)$$

Два первых слагаемых правой части (1) определяют энергию зеемановского взаимодействия триплетной и дублетной молекул с внешним магнитным полем индукции  $\mathbf{B}_0$ , соответственно; третье слагаемое учитывает внутритриплетное спин-спиновое взаимодействие, а два последних определяют энергию взаимодействия молекул с переменным магнитным полем.

Для удобства расчета спектров ODMR использовался спин-гамильтониан Т-D-пары в системе координат, вращающейся с частотой  $\omega$ :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{rot} = & (g_T \mu_B B_0 - \omega) \hat{S}_{Tz} + (g_D \mu_B B_0 - \omega) \hat{S}_{Dz} - \\ & - \hat{\mathbf{S}}_T \hat{\mathbf{D}} \hat{\mathbf{S}}_T + g_T \mu_B B_1 \hat{S}_{Tx} + g_D \mu_B B_1 \hat{S}_{Dx} \end{aligned}, \quad (2)$$

Матрица плотности Т-D-пары во вращающейся системе координат будет эволюционировать согласно уравнению, аналогичному уравнению, предложенному авторами [9] для описания эффекта магнитного поля в аннигиляции Т-экситонов:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{rot}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_{rot}, \hat{\rho}_{rot}(t)] - \frac{k_D}{2} (P_D \hat{\rho}_{rot}(t) + \hat{\rho}_{rot}(t) P_D). \quad (3)$$

Правая часть уравнения (3) состоит из двух слагаемых, первое из которых отвечает за спиновую эволюцию системы, а второе – учитывает процесс спин-селективного тушения в T-D-паре, который протекает, согласно правилу спинового отбора, только из дублетного состояния пары молекул.

Формальное решение уравнения для матрицы плотности (3) может быть записано в операторном виде [7-8]:

$$\hat{\rho}_{rot}(t) = \hat{U}_{rot}(t) \hat{\rho}_{rot}(0) \hat{U}_{rot}^*(t), \quad (4)$$

где,  $\hat{U}_{rot}(t) = \exp(K_{rot} t)$  - оператор эволюции во вращающейся системе координат,  $\hat{U}_{rot}^*(t)$  – оператор, комплексно сопряженный  $\hat{U}_{rot}(t)$ ,

$$K_{rot} = -\frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}_{rot} - i \frac{\hbar}{2} \Lambda \right),$$

– кинетический оператор или новый «гамильтониан» пары,  $\Lambda$  представляет собой реакционный оператор, и определяется через проектор  $P_D = \sum_{M=\pm 1/2} |D_M\rangle \langle D_M|$  на дублетное состояние T-D-пары и фиксированную скорость  $k_D$  на радиусе реакции  $r_D$ . Тогда  $\Lambda = k_D \sum_{M=\pm 1/2} |1/2, M\rangle \langle 1/2, M|$ .

Оператор эволюции  $\hat{U}_{rot}(t)$  может быть представлен в виде матричной экспоненты. Разложение данного оператора можно произвести, используя теорему Сильвестра, например, как это было сделано в [10].

Спектры RYDMR (ODMR) определяются выражением [3]:

$$\gamma(B) = \frac{W(B,0) - W(B,B_1)}{W(B,0)} \quad (5)$$

Здесь

$$W(B,0) = \int_0^\infty Tr\{P_D, \hat{\rho}_{rot}(t|0)\} f(t) dt, \quad W(B,B_1) = \int_0^\infty Tr\{P_D, \hat{\rho}_{rot}(t|B_1)\} f(t) dt$$

– вероятности тушения,  $f(t)$  - плотность вероятности или функция распределения первых встреч для T- и D-частиц.

Функция  $f(t)$  характеризует относительное движение спиновых центров в среде. Для различных, с точки зрения влияния на движение молекул (парамагнитных центров), сред зависимость распределения по времени первых встреч реагентов будет различной. Таким образом, каждая среда характеризуется своей функцией распределения. Это означает, что спектры

RYDMR и ODMR, как и эффекты магнитного поля будут давать информацию о структурных особенностях строения среды. Иначе говоря, и форма спектров RYDMR и выходные параметры магнитополевых эффектов зависят от характера относительного движения спиновых центров в среде [3].

Нахождение вида функции распределения первых встреч  $f(t)$  является важной задачей молекулярной динамики жидкого состояния. Традиционным способом нахождения данной функции является решение уравнения Фоккера-Планка. Однако не всегда удается получить аналитический вид распределения для нетривиальных сред, таких как наноструктурированные среды.

Другой метод решения данной задачи состоит в накоплении статистических данных времени достижения подвижной частицей неподвижного центра. Преимущество этого метода состоит в том, что в этом случае могут быть учтены повторные и последующие контакты без существенного изменения алгоритма вычисления. Для решения данной задачи мы использовали уравнение Ланжевена (6) для броуновской частицы в потенциале двоямного вида (рис. 1):

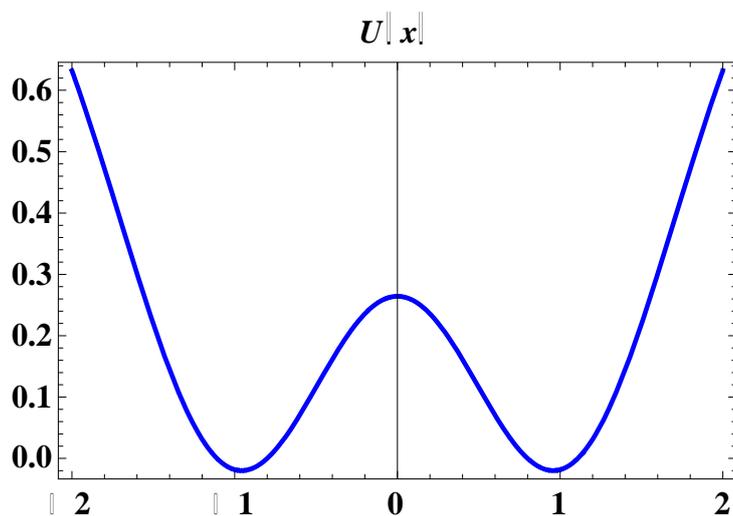


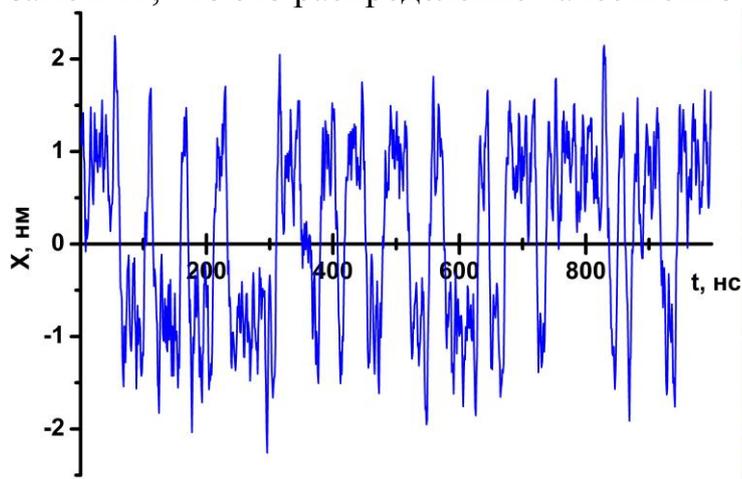
Рис. 1. Модельный двоямный потенциал, локализирующий броуновскую частицу.

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + F_0 \cdot \xi(t) - \frac{dU(x)}{dx}, \quad (6)$$

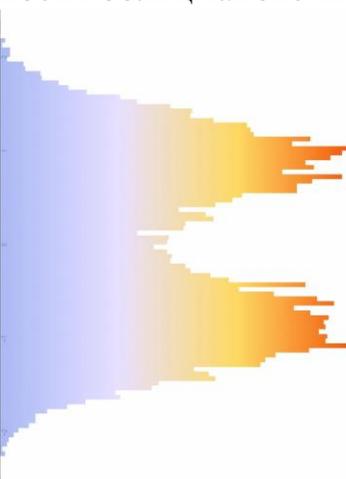
где  $\gamma$  - удельный коэффициент трения, имеющий также смысл частоты столкновений броуновской частицы,  $F_0 \xi(t)$  - случайная сила, равная произведению амплитуды  $F_0$  на белый шум  $\xi(t)$ ,  $-\frac{dU(x)}{dx}$  - потенциальная сила.

На рис. 2 в качестве примера представлена типичная реализация случайного процесса в виде  $x$ -координаты броуновской частицы в двоямном потенциале. На рис. 3 отражено распределение линейной плотности

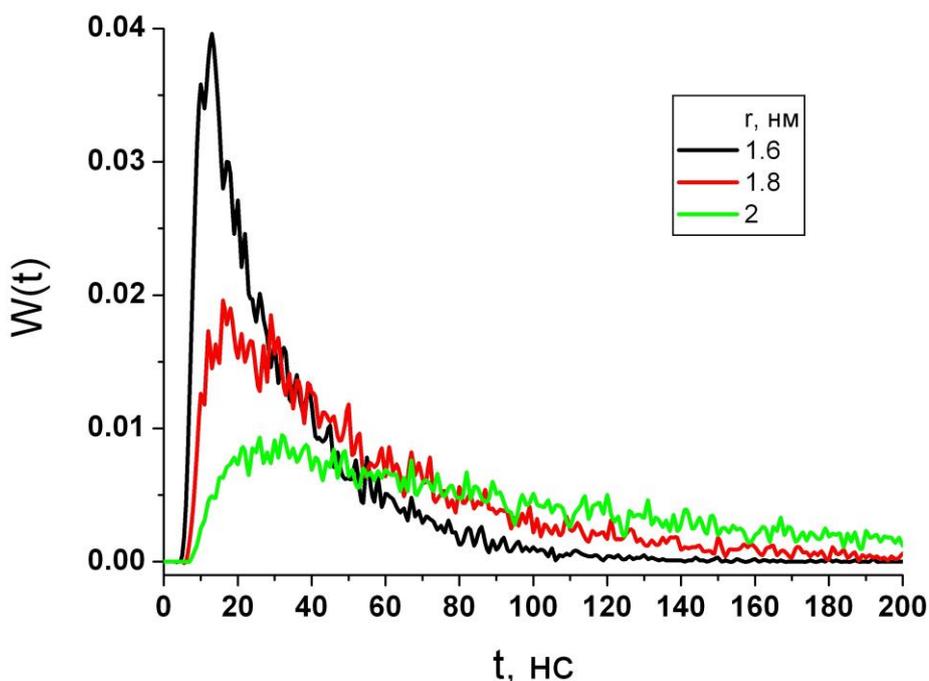
вероятности для броуновской частицы в двумном потенциале. Можно заметить, что это распределение качественно носит больцмановский характер.



**Рис. 2.** Реализация одномерной траектории броуновской частицы в двумном потенциале.



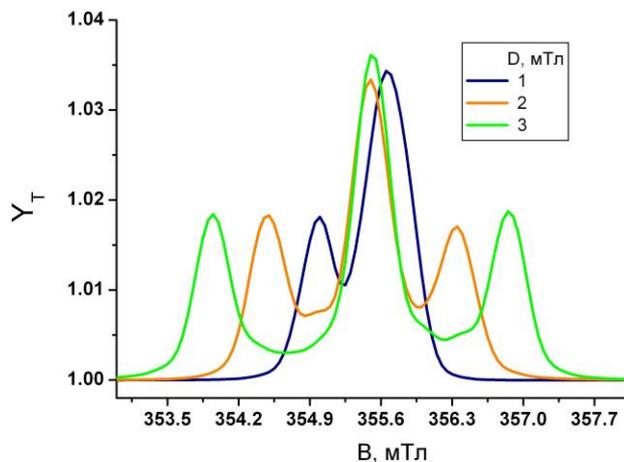
**Рис. 3.** Пространственная плотность распределения для броуновской частицы в двумном потенциале.



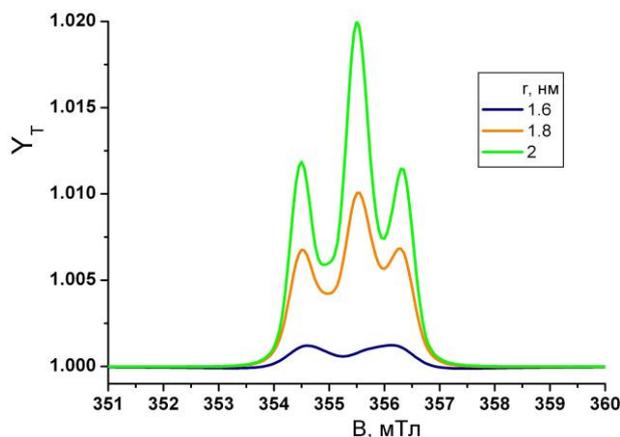
**Рис. 4.** Временные распределения первых встреч для броуновской частицы в двумном потенциале при различных значениях расстояния между точками минимумов ям.

На рис.4 представлены функции распределения первых встреч реагентов для различных значений расстояния между ямами при условии, что движение молекулы начинается не в реакционной яме (яме, где расположен неподвижный тушитель). Из рисунка видно, что при увеличении расстояния между ямами, максимум функции распределения сдвигается в сторону больших времен. Точка максимума является тем минимальным временем, которое требуется для достижения броуновской частицей противоположенной ямы. При увеличении

расстояния между ямами от 1.6 нм до 2 нм, наиболее вероятное время достижения возрастает соответственно от 10 нс до 30 нс, а значение плотности вероятности уменьшается примерно в 4 раза.



**Рис. 5.** Спектры ODMR триплет-дублетных пар молекул в наноячейках с бистабильными состояниями при варьировании параметра тензора тонкой структуры.



**Рис. 6.** Спектры ODMR триплет-дублетных пар молекул в наноячейках с бистабильными состояниями при варьировании расстояния между ямами.

На рисунках 5 и 6 представлены результаты моделирования спектров ODMR триплет-дублетных пар молекул в наноячейках с бистабильными состояниями, полученные на основе спин-гамильтониана (2) и решения (4), выраженные в форме (5):  $Y_T \equiv \gamma(B)$ . На рис. 5 отражены изменения в спектрах ODMR T-D-пар, вызванные вариациями параметра тонкого расщепления, связанного с внутритриплетным электронным спин-спиновым взаимодействием. С ростом величины расщепления наблюдаются сдвиги боковых спектральных полос в противоположные стороны («разбегание» линий).

На рис. 6 можно видеть, что с увеличением расстояния между потенциальными ямами происходит сужение линий ODMR спектров. Детали структуры спектра становятся более отчетливыми, а амплитудные значения сигналов возрастают. Данный эффект напрямую связан с изменением функции распределения первых встреч при изменении расстояния между потенциальными ямами. Если собственные средние времена жизни T и D центров достаточно велики (больше характерных времен для функции распределения), то распределения вероятности первых встреч подвижной спин-дублетной молекулы и триплетного центра будут определять времена жизни T-D-пары. Таким образом T-D-комплекс будет «жить» в различных средах разное время. Из рис. 4 можно видеть, что «время жизни» для конфигурации потенциального поля с расстоянием между ямами равным 1.6 нм меньше чем для конфигурации потенциального поля с расстоянием между ямами 2 нм. На наш взгляд, именно этим обстоятельством и объясняется сужение спектральных линий для случая, показанного на рис.6.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 16-42-560671), а также благодаря гранту Оренбургской области для поддержки научных работ аспирантов (С.А.П.).

#### Список литературы

1. Kubarev, S.I. *The effect of high frequency magnetic fields on the recombination of radicals* / S.I. Kubarev, E.A. Pschenichnov // *Chem. Phys. Lett.*, 1974.- V. 2. - № 1. - P. 66 – 67.
2. Kubarev, S.I. *Behavior of correlated radical pairs in constant and oscillating magnetic fields* / S.I. Kubarev, E.A. Pschenichno., A.S. Shustov // *Theoretical and experimental chemistry*, 1977.-V. 12.- № 4.-P. 329 – 335.
3. Kubarev, S.I. *Resonance effect of a high-frequency magnetic field on the recombination probability of radical pairs in a liquid* / S.I. Kubarev, S.V. Sheberstov and A.S. Shustov // *Chem. Phys. Lett.*, 1980.- V. 73. - № 2. - P. 370-374.
4. Франкевич, Е.Л. *Магнитный резонанс возбужденных комплексов с переносом заряда, регистрируемый по флуоресценции при комнатной температуре* / Е.Л. Франкевич, А.И. Приступа // *Письма в ЖЭТФ*, 1976.-Т.24.- № 7.- С. 397 – 400.
5. Lesin, V.I. *Reaction yield detected magnetic resonance spectra of intermediate pairs of triplet excitons evolution of spectra during degeneracy of energy levels* / V.I. Lesin, V.P. Sakun, A.J. Pristupa, E.L. Frankevich // *Phys. Status solidi (b)*, 1977.- V. 84.-P. 513 – 520.
6. Frankevich, E.L. *Magnetic resonance of short-lived intermediate complexes in the reaction of quenching of triplet excitons by radicals* / E.L. Frankevich, V.I. Lesin, A.I. Pristupa // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1978.- V. 75.- № 2.-P. 415 – 426.
7. Кучеренко, М.Г. *Влияние внешнего магнитного поля на скорость взаимной аннигиляции триплетных электронных возбуждений в наноструктурах с бистабильными пространственными состояниями* / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // *Химическая физика и мезоскопия*. 2014. -Том 16. - №4. – С. 574-587.
8. Кучеренко, М.Г. *Спиновая динамика когерентных триплет-дублетных пар селективно реагирующих молекул во внешнем магнитном поле* / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // *Химическая физика и мезоскопия*. - 2015.- Т. 17.- №3.- С. 437-448.
9. Johnson, R.C. *Effects of magnetic fields on the mutual annihilation of triplet excitons in anthracene crystals*/ R.C. Johnson, R.E. Merrifield // *Phys. Rev. B*. 1970. -V.1. -N2. -P. 896-902.
10. Kucherenko, M.G. *Positive magnetic field effect on mutual triplet triplet annihilation of mixed molecular pairs: Magnetosensitive heterofusion induced by difference of g-factors* / M.G. Kucherenko, R.N. Dusembaev // *Chem. Phys. Lett.* 2010. –V. 487. P. 58-61.

# ИНДУЦИРОВАННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МОЛЕКУЛАХ ВБЛИЗИ НАНОАНТЕНН ИЗ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ЦИЛИНДРОВ

Кучеренко М.Г., Русинов А.П.

Центр лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Управление скоростью молекулярных излучательных и безызлучательных процессов посредством использования плазмонных наноантенн-ретрансляторов вызывает значительный интерес [1-3] в связи с активным развитием молекулярной электроники и наноплазмоники. Характеристики электромагнитного поля в ближней зоне наноантенны существенно изменяются за счет возбуждения в проводнике плазмонных колебаний плотности электронного газа, определение этих характеристик является важной научной задачей.

В данной работе исследована структура поля и рассчитаны вероятности индуцированных переходов молекул, расположенных в окрестности наноантенн-ретрансляторов, в виде нескольких параллельных стержней нанометрового радиуса.

В случае протяженных вдоль оси  $z$  цилиндрических проводников описание однородного по  $z$  поля в ближней зоне наноантенны сводится к картине в плоскости  $(x,y)$ . Результирующее поле представляет собой сумму внешнего электрического поля  $\mathbf{E}_0$  и поля поляризованных стержней [4]. При этом локальные плазмонные колебания в стержнях возбуждаются только компонентой вектора электрического поля, поляризованной в плоскости  $(x,y)$ :  $\mathbf{E}_0^\perp$ . Далее полагаем  $\mathbf{E}_0 \equiv \mathbf{E}_0^\perp$ .

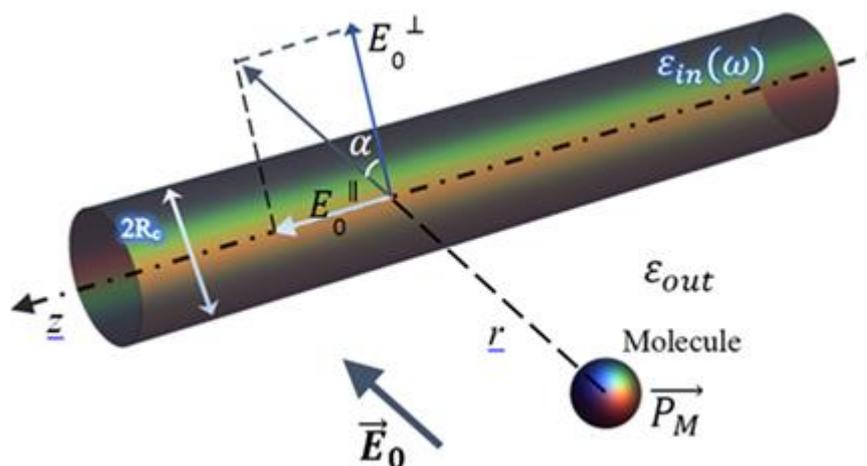


Рис.1 – К расчету локального поля металлического наностержня радиусом  $R$  в среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_{out} = \epsilon_m$

Введем вектор  $\mathbf{P}(\omega)$  дипольного момента единицы длины отдельного нанопровода радиусом  $R$  соотношением

$$\mathbf{P}(\omega) = \alpha_0(\omega)\mathbf{E}_0,$$

где

$$\alpha_0(\omega) = \frac{R^2 \varepsilon(\omega) - \varepsilon_m}{2 \varepsilon(\omega) + \varepsilon_m}$$

– поляризуемость единицы длины нанопровода,

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}$$

– диэлектрическая проницаемость металла,  $\varepsilon_m$  – диэлектрическая проницаемость внешней среды,  $\omega_p$  и  $\gamma$  – плазменная частота и коэффициент затухания в металле соответственно.

Тогда потенциал поля нанопровода вне его объема находится как

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + 2 \frac{\mathbf{P}(\omega) \mathbf{r}}{r^2},$$

и результирующее поле есть

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\text{grad } \varphi(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 - \vec{\nabla} \left( 2 \frac{\mathbf{P}(\omega) \mathbf{r}}{r^2} \right).$$

Для нахождения характеристик ближнего поля систем из нескольких наностержней необходим учет их взаимного влияния друг на друга [5].

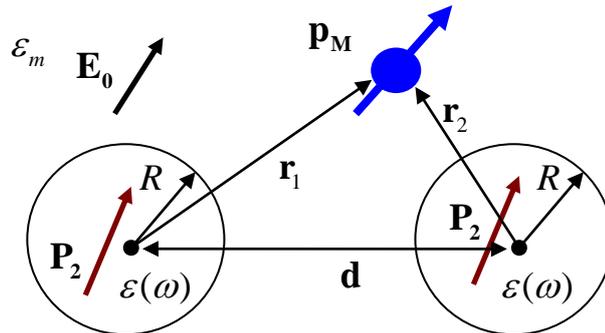


Рис.2 – К расчету локального поля двух параллельных металлических наностержней радиусом  $R$  в среде с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_m$

Так как система из двух нанопроводов симметрична, наведенная поляризация в первом и втором проводе одинакова. Тогда

$$\mathbf{P}_2(\omega) = \alpha_0 \left( \mathbf{E}_0 + \vec{G}(d) \mathbf{P}_2(\omega) \right).$$

Отсюда

$$\mathbf{P}_2(\omega) = \left[ \vec{\mathbf{I}} - \alpha_0 \left( \vec{G}(d) \right) \right]^{-1} \alpha_0 \mathbf{E}_0 = \vec{\alpha}_{2eff} \mathbf{E}_0,$$

где

$$\vec{G}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2} \left[ 2\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} - \vec{\mathbf{I}} \right]$$

–диадическая квазистатическая функция Грина (функция влияния точечного дипольного источника на плоскости), представляющая собой тензор второго

ранга. Через  $\vec{\alpha}_{2eff}$  обозначена эффективная поляризуемость кластера из двух параллельных наностержней

$$\vec{\alpha}_{2eff} = \left[ \vec{\mathbf{I}} - \alpha_0 \left( \vec{G}(d) \right) \right]^{-1} \alpha_0,$$

которая, также, является тензорной величиной.

Потенциал поля системы равен сумме потенциалов внешнего поля и полей от двух наностержней с наведенными дипольными моментами  $\mathbf{P}_2(\omega)$

$$\varphi_2(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + 2 \left[ \frac{\mathbf{P}_2(\omega) \mathbf{r}_1}{r_1^2} + \frac{\mathbf{P}_2(\omega) \mathbf{r}_2}{r_2^2} \right].$$

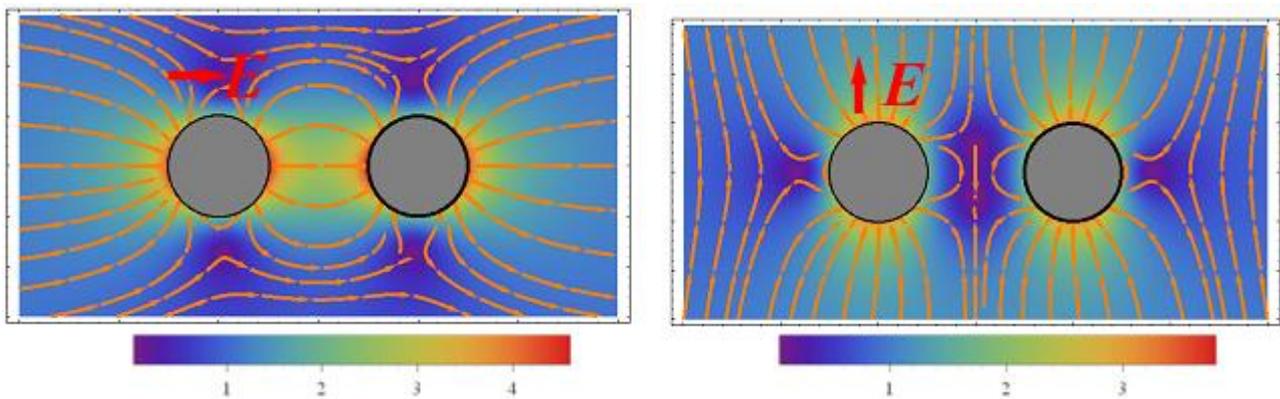


Рис. 3 – Структура поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  вблизи двух нанопроводов и его относительная амплитуда  $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|/E_0$  при различной ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$  относительно оси системы

Рассматриваемая система стержней обладает выраженной анизотропией по отношению к ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$ . Как видно из рис. 3, при продольной ориентации вектора внешнего поля в промежутке между наностержнями результирующее поле усиливается, а при поперечной – ослабляется.

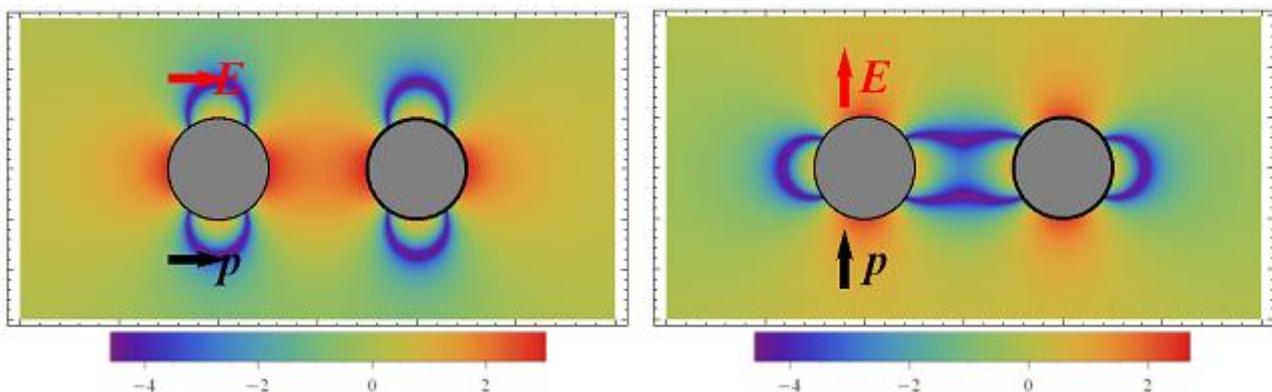


Рис. 4 – Логарифм относительной вероятности перехода  $(\mathbf{p}_M \mathbf{E}(\mathbf{r}))^2 / (\mathbf{p}_M \mathbf{E}_0)^2$  в молекуле, расположенной вблизи двух нанопроводов при различных ориентациях векторов  $\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{p}_M$

Для расчета вероятностей индуцированных переходов в молекуле находящейся в ближней зоне антенны необходимо учитывать ориентацию ее дипольного момента перехода как относительно ориентации внешнего поля, так и относительно оси антенной пары. Наиболее показателен случай совпадающей ориентации векторов  $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{p}_M$ , так как при их угловом рассогласовании вероятность индуцированного перехода существенно уменьшается. Как показано на рис. 4 при  $\mathbf{E}_0 \parallel \mathbf{d}$  вдоль оси нанокластера вероятность индуцированных переходов увеличивается, а при  $\mathbf{E}_0 \perp \mathbf{d}$  – уменьшается.

Аналогично определяются характеристики ближнего поля для наноантенны из большого числа бесконечно длинных параллельных проводников, при условии их регулярного расположения: для трех стержней в форме правильного треугольника, для четырех – квадрата, для шести – правильного шестиугольника и т.д.

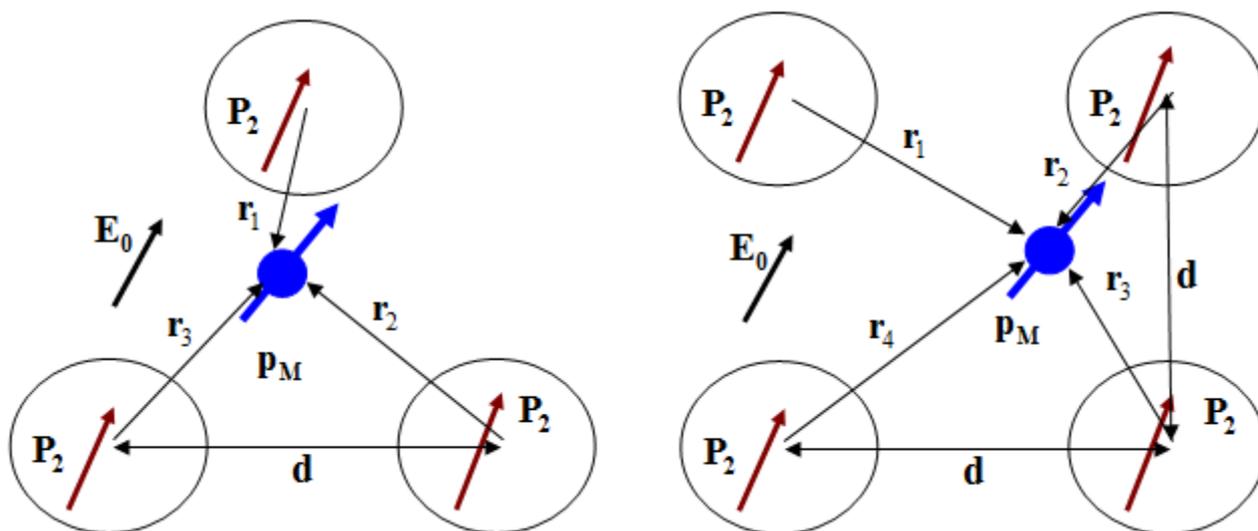


Рис. 5 – К расчету локального поля кластера из трех и четырех металлических наностержней радиусом  $R$  в среде с диэлектрической проницаемостью  $\epsilon_m$

В силу симметрии рассматриваемых систем наведенная поляризация каждого стержня одинакова, и определяется суммарным действием внешнего поля и всех остальных стержней. Таким образом

$$\mathbf{P}_N(\omega) = \alpha_0 \left( \mathbf{E}_0 + \sum_{i=2}^N \vec{G}(\mathbf{d}_{i1}) \mathbf{P}_N(\omega) \right),$$

где  $\mathbf{d}_{i1}$  - расстояние между выделенным и  $i$  стержнем,  $N$  - общее число стержней.

Тогда эффективная поляризуемость кластера из  $N$  параллельных наностержней и двумерный дипольный момент каждого поляризованного стержня запишется в виде

$$\tilde{\alpha}_{Neff} = \left[ \tilde{\mathbf{I}} - \alpha_0 \sum_{i=2}^N \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{d}_{1i}) \right]^{-1} \alpha_0, \quad \mathbf{P}_N(\omega) = \tilde{\alpha}_{Neff} \mathbf{E}_0.$$

Потенциал создаваемого поля

$$\varphi_N(\mathbf{r}) = -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + 2 \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_N(\omega) \mathbf{r}_i}{r_i^2},$$

а напряженность результирующего поля находится стандартным образом  $\mathbf{E}_N(\mathbf{r}) = -\text{grad} \varphi_N(\mathbf{r})$ .

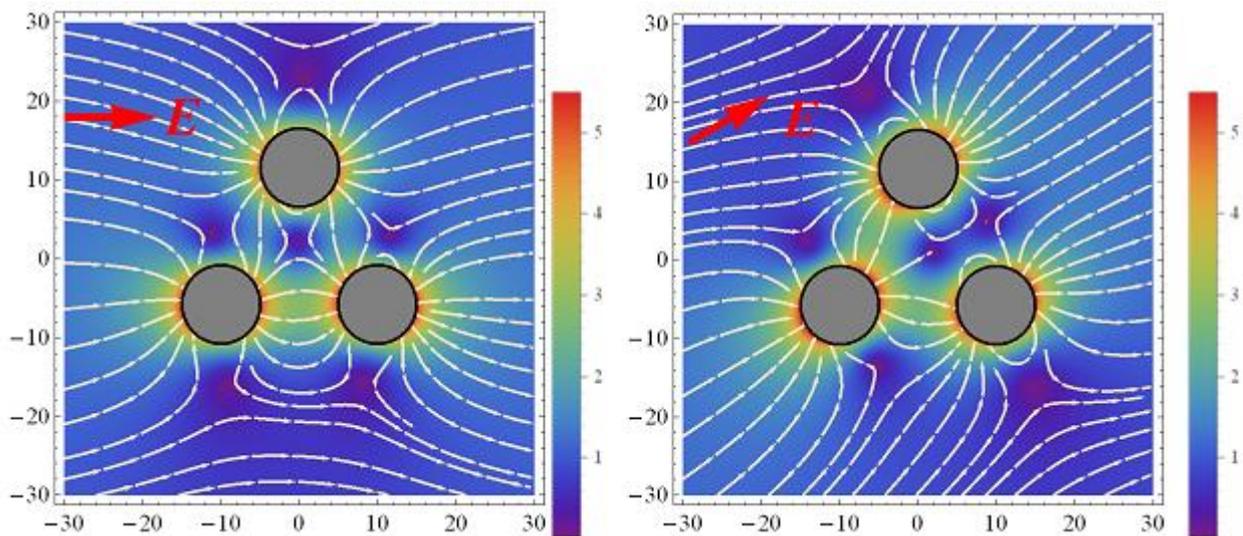


Рис. 6 – Структура поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  вблизи кластера из трех наностержней и его относительная амплитуда  $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|/E_0$  при различной ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$

Из симметрии рассматриваемых систем следует, что при изменении ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$  относительно наноантенны на угол  $\pi/N$ , где  $N$  – число элементов антенны, структура поля повторяется. Более того, структура поля при ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$  в диапазоне углов от 0 до  $\pi/2N$  и от  $\pi/2N$  до  $\pi/N$  является зеркально-симметричной.

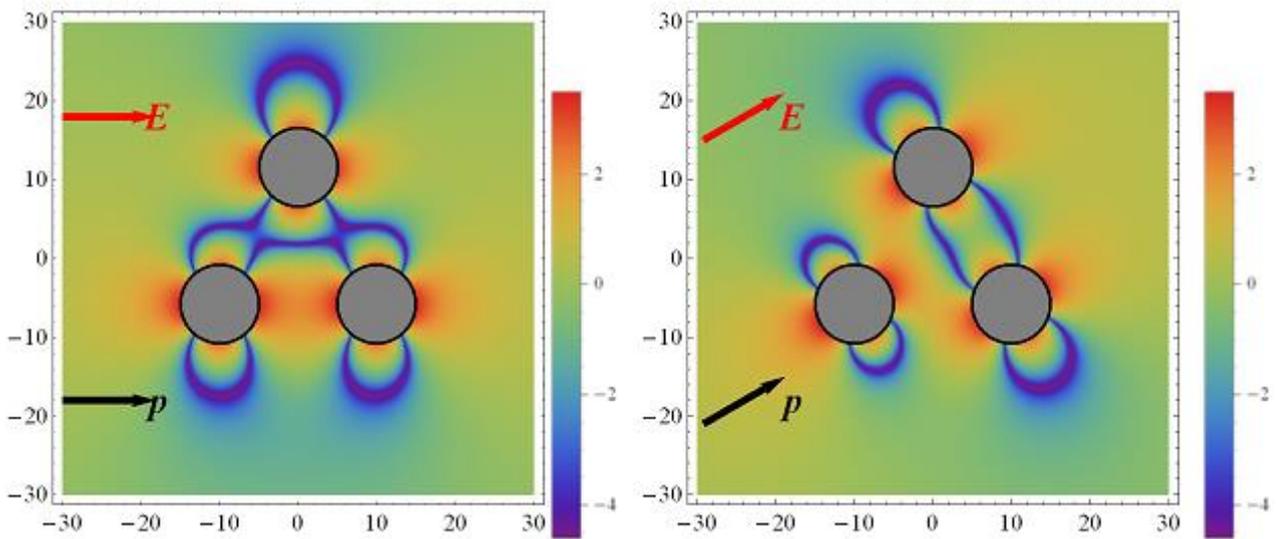


Рис. 7 – Логарифм относительной вероятности перехода  $(\mathbf{p}_M \mathbf{E}(\mathbf{r}))^2 / (\mathbf{p}_M \mathbf{E}_0)^2$  в молекуле, расположенной вблизи трех нанопроводов при различных ориентациях векторов  $\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{p}_M$

Как видно из рис. 6-7 уменьшение амплитуды поля и вероятности перехода в молекуле в большей степени проявляют себя во внутренней области кластера и имеют место при любых ориентациях вектора  $\mathbf{E}_0$ . При этом можно отметить, что взаимное влияние наностержней существенно для достаточно тесных кластеров  $d / R \approx 1 \div 4$ . Так, например, при  $d \sim 10R$  поле вблизи каждого стержня уже практически не отличается от поля уединенного нанопровода.

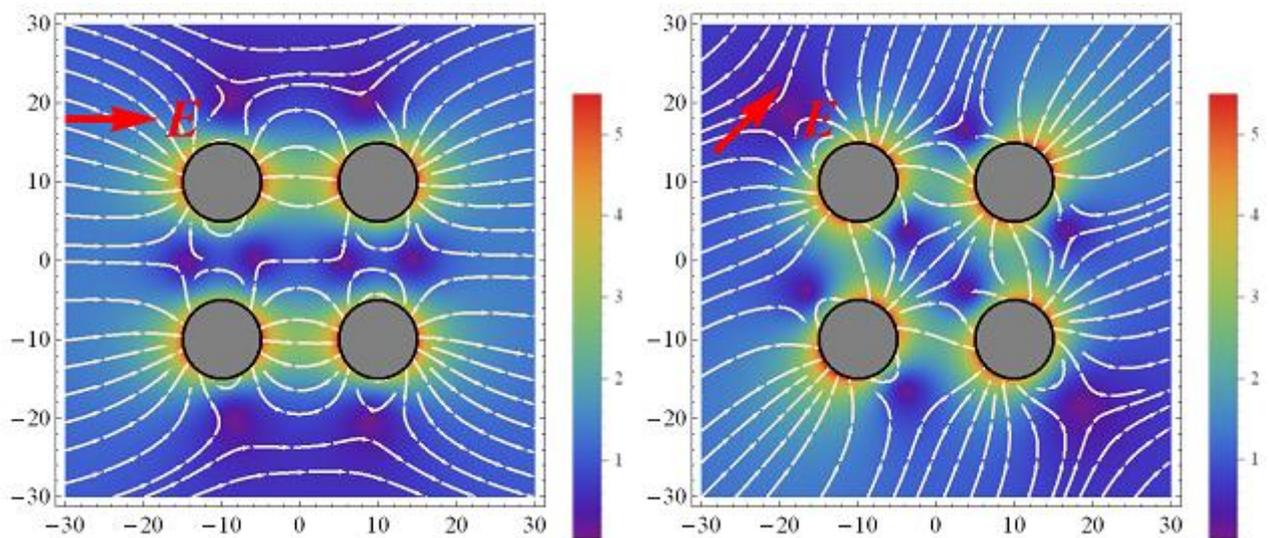


Рис. 8 – Структура поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  вблизи кластера из четырех наностержней и его относительная амплитуда  $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|/E_0$  при различной ориентации вектора  $\mathbf{E}_0$

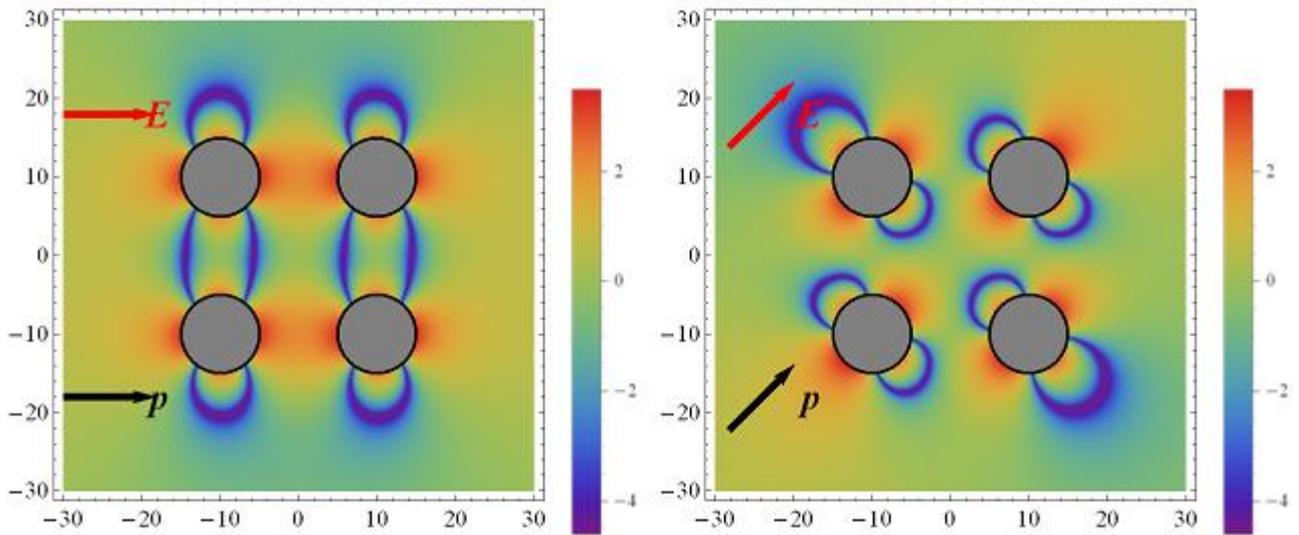


Рис. 9 – Логарифм относительной вероятности перехода  $(\mathbf{p}_M \mathbf{E}(\mathbf{r}))^2 / (\mathbf{p}_M \mathbf{E}_0)^2$  в молекуле, находящейся в ближнем поле четырех нанопроводов при различных ориентациях векторов  $\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{p}_M$

С увеличением числа нанопроводов в системе  $N=4$  (рис. 8-9) и  $N=6$  (рис. 10-11) отмеченный выше эффект ослабления поля внутри кластера становится еще более выраженным, представляя собой своеобразную экранировку проводниками внешнего поля. При этом степень экранировки растет с увеличением числа элементов  $N$ . Так, для шестиэлементной системы внутреннее распределение поля практически не чувствительно к ориентации  $\mathbf{E}_0$ . В тесных кластерах с большим  $N$ , помимо наиболее выраженного эффекта ослабления внутреннего поля, можно также заметить, что структура результирующего поля вне кластера становится аналогичной структуре поля одиночного нанопровода с диаметром порядка поперечных размеров пучка наностержней.

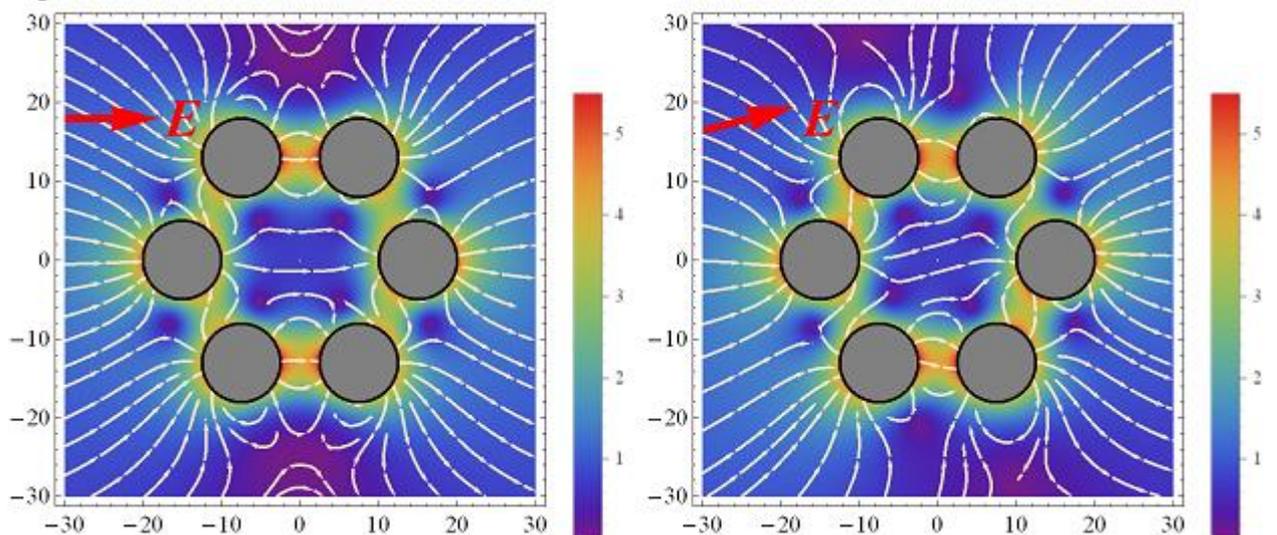


Рис. 10 – Структура поля  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  вблизи кластера из шести наностержней и его относительная амплитуда  $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|/E_0$  при различной ориентации поля  $\mathbf{E}_0$

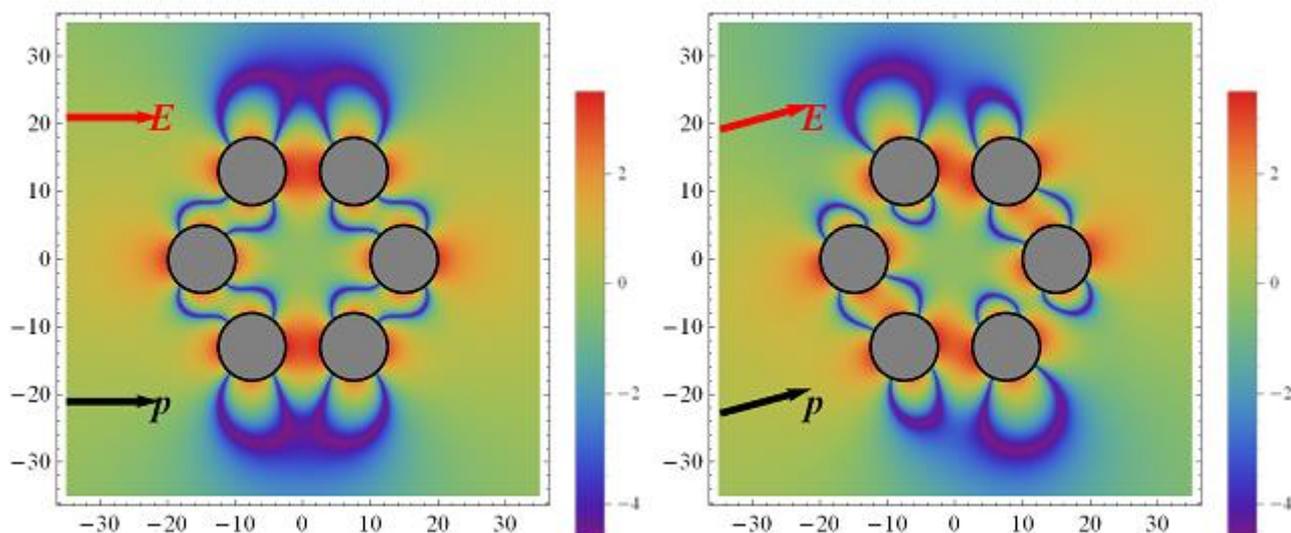


Рис. 11 – Логарифм относительной вероятности перехода  $(\mathbf{p}_M \mathbf{E}(\mathbf{r}))^2 / (\mathbf{p}_M \mathbf{E}_0)^2$  в молекуле, находящейся в ближнем поле системы из шести наностержней при различных ориентациях векторов  $\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{p}_M$

Данный подход также можно применить и при расчете поляризационных характеристик для регулярных бесконечно протяженных систем их параллельных наностержней, например, для бесконечной цепочки или решетки с различной упаковкой наностержней.

Проведенные расчеты структуры поля и вероятностей индуцированных переходов молекул вблизи составных наноантенн-ретрансляторов могут быть использованы в дальнейшем при проектировании устройств молекулярной электроники и наноплазмоники.

Работа выполнена при поддержке РФФИ и Правительства Оренбургской области (гранты № 16-42-560671p\_a и № 15-08-04132 А)

#### Список литературы

1. Rechberger, W. *Optical properties of two interacting gold nanoparticle* / W. Rechberger, A. Hohenau, A. Leitner, J.R. Krenn, B. Lamprecht, F.R. Aussenegg // *Optics Communications*. -2003. –V.220. –P. 137–141.
2. Климов, В.В. *Наноплазмоника* / В.В. Климов // Москва, изд. Физматлит .- 2009. С. 62-64.
3. 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 // *Российские нанотехнологии*. – 2012. - Т. 7. - № 3-4 С. 111-117.
4. Ландау, Л.Д. *Электродинамика сплошных сред. Т. 8* / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц // Москва, изд. Физматлит . 2003. – 656 с.

5. Кучеренко, М.Г. Тензорное представление динамической поляризуемости двухчастичного нанокластера в приближении точечных диполей / М.Г. Кучеренко // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2014. - 4014 с. Секция 6 «Вопросы фундаментальной, прикладной физики и физического образования». - С. 1412-1421.

# ГЕНЕРАЦИЯ ЭКСИТОНОВ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА МОЛЕКУЛАМИ В ОБОЛОЧКЕ СЛОИСТОЙ КОМПОЗИТНОЙ НАНОСТРУКТУРЫ С ЗАМАГНИЧЕННОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ЧАСТЬЮ

Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М.

Центр лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

При использовании слоистых композитных наноструктур в фотонике важным фактором управления их свойствами служит внешнее магнитное поле [1]. Наличие проводящих компонентов в структуре обуславливает магниточувствительность системы даже в отсутствие у нее ферро- или парамагнитных свойств. Это связано с зависимостью диэлектрической проницаемости электронной плазмы проводника от вектора индукции  $\mathbf{B}$  внешнего магнитного поля [2]. В приближении холодной замагниченной плазмы тензор  $\vec{\epsilon}^{(i)}(\omega|\mathbf{B})$  диэлектрической проницаемости в декартовой системе координат ( $\mathbf{B} = B_z \mathbf{n}_z$ ) записывается в виде

$$\vec{\epsilon}^{(i)}(\omega|\mathbf{B}) = \begin{pmatrix} \epsilon_{\perp} & ig & 0 \\ -ig & \epsilon_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{\parallel} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где компоненты тензора

$$\epsilon_{\perp}(\omega|\mathbf{B}) = 1 - \frac{\omega_p^2(\omega + i\gamma)}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]}, \quad \epsilon_{\parallel} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}, \quad g(\omega|\mathbf{B}) = \frac{\omega_p^2 \Omega_L}{\omega[(\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2]} \quad (2)$$

а параметры

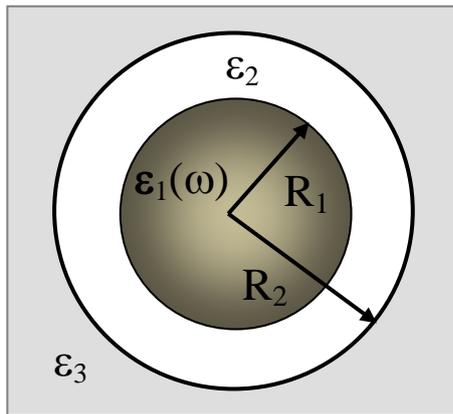
$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m}} \quad - \quad \text{ленгмюровская (плазменная) частота}, \quad \Omega_L = \frac{e|\mathbf{B}|}{mc} \quad - \quad \text{ларморовская (циклотронная) частота электрона в магнитном поле индукции } \mathbf{B}.$$

*Тензоры, определяющие конфигурацию поля цилиндрического слоистого композита*

Рассмотрим композитную слоистую систему с цилиндрической симметрией. Неполный анализ случая сферического композита проводился нами ранее в [3], но и он может быть полностью завершен по аналогии с решением задачи для цилиндрической системы, приведенным ниже.

Как и в случае слоистого шара, большой интерес для ряда приложений представляет тензор поляризуемости  $\vec{A}(\omega|\mathbf{B})$  композита (в расчете на единицу его длины) в однородном поле  $\mathbf{E}_0$ , посредством которого удобно производить

расчет характеристик ближнего поля снаружи цилиндра – у поверхности его внешнего слоя. Определим в цилиндрической системе координат (выбираем в качестве оси Z ось цилиндра) потенциалы  $\Phi_j(r, \theta, z)$ ,  $j=1,2,3$  поля во всех областях, отображенных на рис. 1. Выражения для этих потенциалов записываем по аналогии с ранее рассмотренным сферическим случаем и известной изотропной слоистой аксиальной системой, заменяя все скалярные коэффициенты изотропного случая их тензорными аналогами. Таким образом, подобно выражениям, приведенным в [3], можем записать



**Рис. 1.** Структура коаксиального слоистого нанокompозита с проводящей жилой и диэлектрической оболочкой, помещенного в диэлектрическую среду с проницаемостью  $\varepsilon_3$ .

$$\Phi_1(r, \theta, z) = -\vec{\mathbf{B}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0 \mathbf{r}, \quad (3)$$

$$\Phi_2(r, \theta, z) = -\vec{\mathbf{C}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0 \mathbf{r} + \vec{\mathbf{D}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0 \mathbf{r} / r^2, \quad (4)$$

$$\Phi_3(r, \theta, z) = -\vec{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{E}_0 \mathbf{r} + \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0 \mathbf{r} / r^2. \quad (5)$$

Соотношения между неизвестными тензорами  $\vec{\mathbf{A}}, \vec{\mathbf{B}}, \vec{\mathbf{C}}, \vec{\mathbf{D}}$  находим из условий на граничных поверхностях (окружностях)  $C(R_1)$  и  $C(R_2)$ :

$$\Phi_1(R_1, \theta) = \Phi_2(R_1, \theta), \quad \Phi_2(R_2, \theta) = \Phi_3(R_2, \theta), \quad (6)$$

$$\vec{\varepsilon}_1(\omega) \left( \frac{\partial \Phi_1}{\partial r} \right)_{R_1} = \varepsilon_2 \left( \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \right)_{R_1}, \quad \varepsilon_2 \left( \frac{\partial \Phi_2}{\partial r} \right)_{R_2} = \varepsilon_3 \left( \frac{\partial \Phi_3}{\partial r} \right)_{R_2}. \quad (7)$$

Тогда на основе (3)-(5) и (6)-(7) можем получить

$$\vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{C}} - \vec{\mathbf{D}} / R_1^2, \quad -\vec{\mathbf{C}} + \vec{\mathbf{D}} / R_2^2 = -\vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{A}} / R_2^2, \quad (8)$$

$$\vec{\varepsilon}_1(\omega) \vec{\mathbf{B}} = \varepsilon_2 \vec{\mathbf{C}} + \varepsilon_2 \vec{\mathbf{D}} / R_1^2, \quad \varepsilon_2 \vec{\mathbf{C}} + \varepsilon_2 \vec{\mathbf{D}} / R_2^2 = \varepsilon_3 \vec{\mathbf{I}} + \varepsilon_3 \vec{\mathbf{A}} / R_2^2. \quad (9)$$

Последовательно исключая из (8) и (9) посредством линейных преобразований тензоры  $\vec{\mathbf{D}}, \vec{\mathbf{C}}, \vec{\mathbf{B}}$ , получаем для тензора  $\vec{\mathbf{A}}$  дипольной поляризуемости единицы длины слоистого композитного цилиндра с анизотропной жилой следующее выражение

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) = & \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)\xi^2 \right] \times \\ & \times \left[ (\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\xi^2 \right]^{-1} R_2^2, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\xi = R_1 / R_2$ . Тензор  $\vec{\mathbf{B}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)$ , определяющий на основе (3) однородное поле в приосевой области может быть найден на основе следующего равенства

$$\left[ \vec{\varepsilon}_1(\omega) + \varepsilon_2 \vec{\mathbf{I}} \right] \vec{\mathbf{B}}(\omega) = -(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) \vec{\mathbf{A}}(\omega) / R_2^2 + (\varepsilon_2 + \varepsilon_3) \vec{\mathbf{I}}. \quad (11)$$

Вектор  $\mathbf{E}_1$  напряженности однородного поля в приосевой области (в корде) композита, вообще говоря, не коллинеарен вектору  $\mathbf{E}_1 = \vec{\mathbf{B}}(\vec{\varepsilon}_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0$ .

Если проводящей в композите является оболочка, а корд – диэлектрический, действуя аналогичным образом для тензора  $\vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1, \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}), \varepsilon_3)$  поляризуемости слоистого цилиндрического композита с замагниченной проводящей оболочкой получаем

$$\begin{aligned} \vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1, \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}), \varepsilon_3) = & \\ = & \left[ (\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}) + \varepsilon_3)\xi^2 \right] \times \\ & \times \left[ (\varepsilon_1 + \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}) + \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}))(\vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_3)\xi^2 \right]^{-1} R_2^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Потенциал  $\Phi_3(r, \theta)$  и напряженность  $\mathbf{E}_3(r, \theta)$  поля вблизи слоистого цилиндрического композита с замагниченной оболочкой определяются выражениями

$$\Phi_3(r, \theta) = -\vec{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{n}_0 \mathbf{n}_\theta E_0 r + \vec{\mathbf{A}}(\omega|\mathbf{B}) \mathbf{E}_0 \mathbf{n}_\theta / r. \quad (13)$$

$$\mathbf{n}_0 = \mathbf{E}_0 / |\mathbf{E}_0|, \quad \mathbf{n}_\theta = \mathbf{r} / |\mathbf{r}|,$$

$$\mathbf{E}_3(r, \theta) = \mathbf{E}_0 - \vec{\nabla} \vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1, \vec{\varepsilon}_2(\omega|\mathbf{B}), \varepsilon_3) \mathbf{E}_0 \mathbf{r} / r^2. \quad (14)$$

Картина распределения напряженности поля  $\mathbf{E}_3(r, \theta)$  для этого случая представлена на рис. 2 для двух различных частот  $\omega$  и постоянном магнитном поле индукции  $\mathbf{B}=10$  Тл.

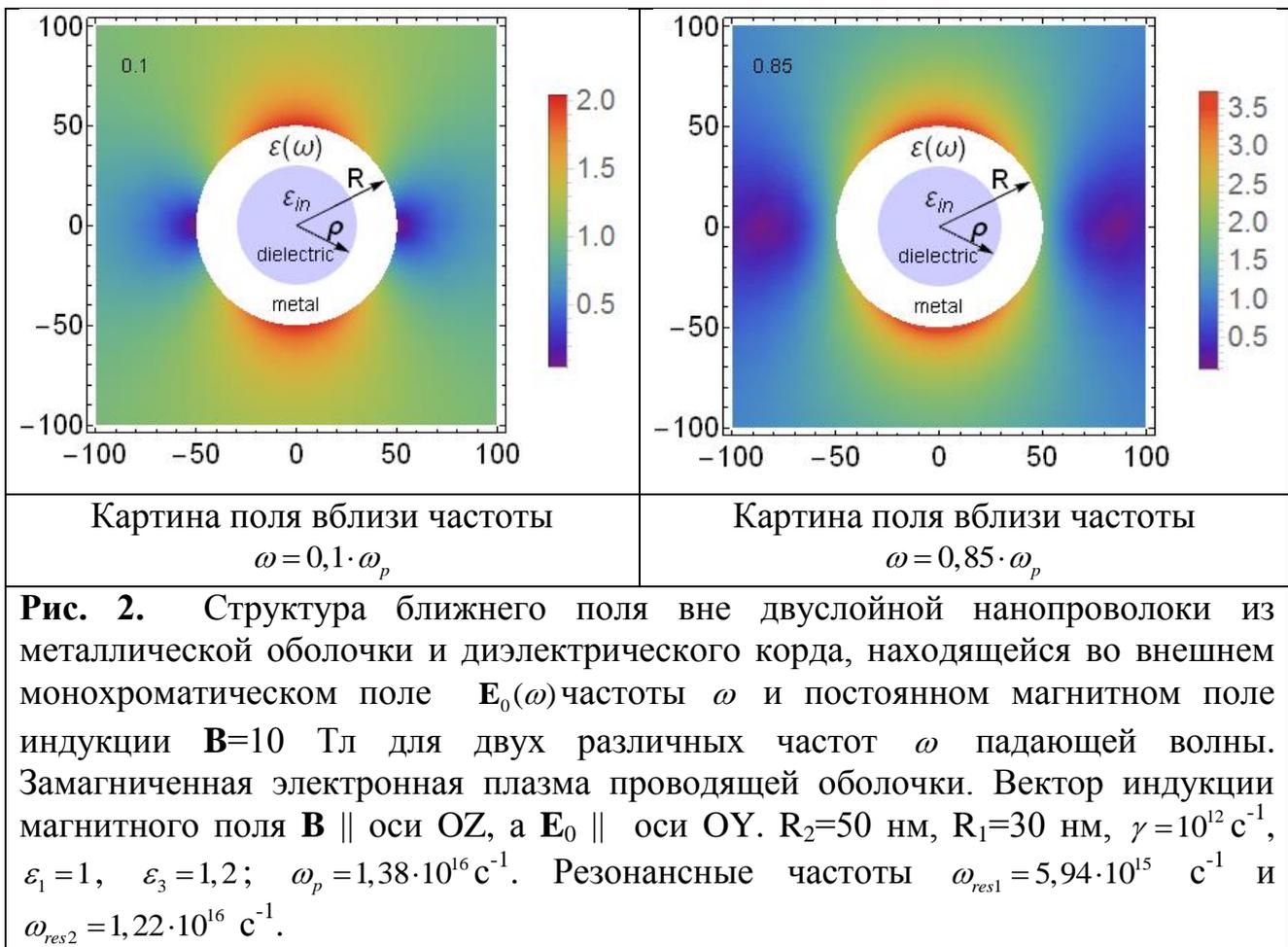
При выключении магнитного поля все тензорные величины редуцируются к своим скалярным прототипам и (10)-(12) трансформируются к выражениям для поляризуемостей изотропного слоистого композита [4]. Тогда скалярный фактор Лоренца  $B(\omega)$  усиления поля в корде принимает вид

$$B(\omega) = \frac{\varepsilon_3 + \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega)} + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega)} \frac{\left[ (\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega))(\varepsilon_2(\omega) - \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2(\omega))(\varepsilon_2(\omega) + \varepsilon_3) \xi^2 \right]}{\left[ (\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega))(\varepsilon_2(\omega) + \varepsilon_3) + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2(\omega))(\varepsilon_2(\omega) - \varepsilon_3) \xi^2 \right]}. \quad (15)$$

Если  $\varepsilon_1 = \varepsilon_3 = 1$  (проводящая цилиндрическая оболочка в вакууме) из (15) получаем

$$B(\omega) = \frac{4\varepsilon_2(\omega)}{[\varepsilon_2(\omega) + 1]^2 - [\varepsilon_2(\omega) - 1]^2 \xi^2}, \quad (16)$$

как и в задаче 3 главы 1 известного курса теоретической физики Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица [5].



### Поглощение света молекулой вблизи поверхности слоистого наноцилиндра

Поглощение света молекулой в ближнем поле нанокомпозита, помещенного в однородное монохроматическое поле  $\mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$  будет определяться, в том числе, и той составляющей общего поля, которая

формируется в результате поляризации цилиндрического нанокompозита. Как и в предыдущем разделе выделим три характерные пространственные области

$$\begin{aligned} 1: & 0 < r < R_1, \quad \varepsilon_1(\omega), \quad \mathbf{E}_1 \\ 2: & R_1 < r < R_2, \quad \varepsilon_2, \quad \mathbf{E}_2(r, \theta) \\ 3: & R_2 < r, \quad \varepsilon_3, \quad \mathbf{E}_3(r, \theta) \end{aligned}$$

в каждой из которых, диэлектрические проницаемости  $\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2, \varepsilon_3$  не зависят от координат, а в материалах, заполняющих области 2 и 3, к тому же, отсутствует частотная дисперсия. Поле в центральной жиле композита однородно  $\mathbf{E}_1 = \text{const}$ , тогда как поля в оболочке и вне композита зависят от полярных координат  $(r, \theta)$  точек областей 2 и 3.

Если молекула находится вблизи поверхности нанокompозита (в его ближнем поле), а ее электронный дипольный момент перехода  $\mathbf{p}_{if} = \langle i | \hat{\mathbf{p}} | f \rangle$  между основным  $i$  и возбужденным  $f$  состояниями известен, скорость  $w(\omega | r, \theta)$  поглощения фотонов молекулярной системой будет определяться выражением [6]

$$w(\omega | r, \theta) = \frac{2\gamma}{\hbar^2} \frac{|\mathbf{p}_{if} \mathbf{E}_3(r, \theta)|^2}{[(\omega - \omega_{if})^2 + \gamma^2]}, \quad (17)$$

где  $\mathbf{E}_3(r, \theta)$  – напряженность результирующего (локального) поля в точке расположения молекулы вне цилиндра с оболочкой ( $R_2 < r$ ), определенная формулой, эквивалентной (14)

$$\mathbf{E}_3(r, \theta) = \mathbf{E}_0 + \vec{\mathbf{G}}_2(r, \theta) \vec{\mathbf{A}}(\varepsilon_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mathbf{E}_0, \quad (18)$$

где  $\vec{\mathbf{G}}_2(r, \theta) = r^{-2} [2\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \vec{\mathbf{I}}]$  – двумерный тензор Грина квазистатического поля поляризованного цилиндра;  $\omega_{if}$  – резонансная частота внутримолекулярного радиационного перехода  $i \rightarrow f$ ;  $\gamma$  – ширина Лоренцева контура полосы поглощения молекулы. Другие максимумы в спектре поглощения (16) будут обусловлены плазмонными резонансами тензора  $\vec{\mathbf{A}}(\omega | \varepsilon_1(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_2, \varepsilon_3)$  удельной поляризуемости композитного цилиндра. Второе слагаемое в правой части (18) определяет вклад поля двумерного диполя в напряженность  $\mathbf{E}_3(r, \theta)$  суммарного поля вне цилиндра. Подчеркнем, что скорость поглощения фотонов (17), вслед за локальным полем (18), является магнитозависимой величиной. В отсутствие магнитного поля дипольная поляризуемость единицы длины слоистого композитного цилиндра с осевой проводящей жилой из металла со

скалярной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_1(\omega)$  может быть записана в виде:

$$\alpha(\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2, \varepsilon_3) = \frac{\left[ (\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3) + (\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)\xi^2 \right]}{\left[ (\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3) + (\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2)(\varepsilon_2 - \varepsilon_3)\xi^2 \right]} R_2^2. \quad (19)$$

Даже в простейшем случае бездисперсионной диэлектрической оболочки ее наличие в композите приводит к смещению частоты плазмонного резонанса для поляризуемости (19), что дает возможность плавной настройки поглощения энергии электромагнитного поля молекулой, размещенной на внешней поверхности слоистой наноструктуры.

*Поглощение света молекулой, внедренной в оболочку композитного наноцилиндра. Трансформационные тензоры слоистого наноцилиндра*

Если фотоактивная молекула инкорпорирована в оболочку композита, скорость поглощения ею энергии электромагнитного поля будет определяться не только эффективной поляризуемостью  $\vec{\mathbf{A}}(\omega | \varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3)$  системы, а другими, более сложными трансформационными тензорами  $\vec{\mathbf{D}}, \vec{\mathbf{C}}, \vec{\mathbf{B}}$ , связанными с тензором  $\vec{\mathbf{A}}$ .

Тензор  $\mathbf{V}$  уже был определен ранее равенством (11). Тензор  $\mathbf{D}$  находим складывая равенства (8)

$$\vec{\mathbf{D}} = \left[ \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{A}} / R_2^2 \right] \left[ 1 / R_2^2 - 1 / R_1^2 \right]^{-1}. \quad (20)$$

Наконец для тензора  $\mathbf{C}$  получаем

$$\vec{\mathbf{C}} = \vec{\mathbf{B}} + \vec{\mathbf{D}} / R_1^2. \quad (21)$$

Локальное поле  $\mathbf{E}_2(r, \theta)$  внутри оболочечного слоя неоднородно и определяется выражением

$$\mathbf{E}_2(r, \theta) = \vec{\nabla} \left[ \vec{\mathbf{C}}(\varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) - \vec{\mathbf{D}}(\varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3) / r^2 \right] \mathbf{E}_0 \mathbf{r}, \quad (22)$$

где тензоры  $\vec{\mathbf{C}}(\varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3)$  и  $\vec{\mathbf{D}}(\varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3)$  связаны друг с другом соотношением (21), а тензор  $\mathbf{V}$  определен равенством (11).

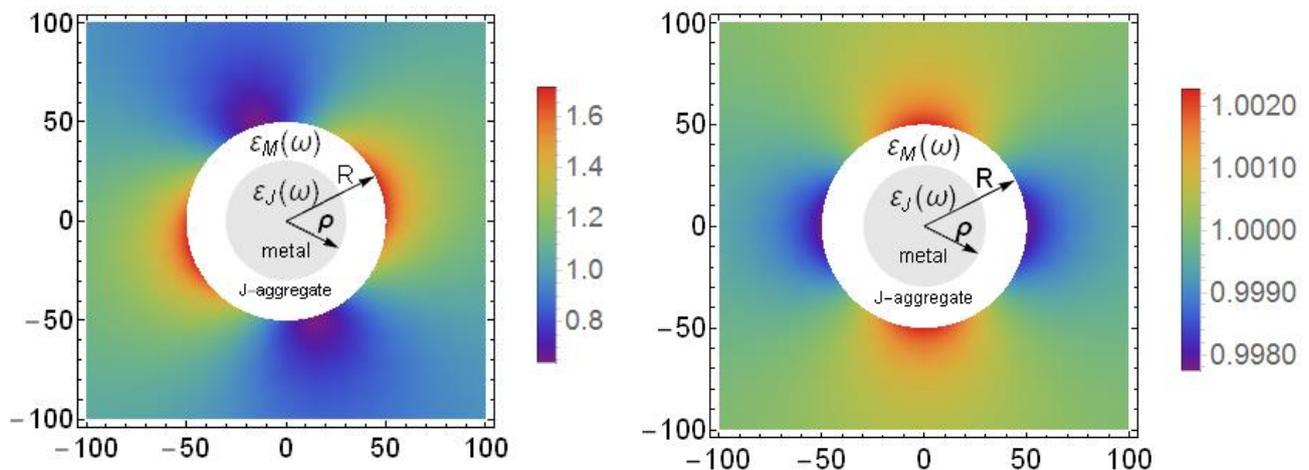
Заметим, что все трансформационные тензоры  $\vec{\mathbf{B}}, \vec{\mathbf{C}}, \vec{\mathbf{D}}$  (как и тензор поляризуемости  $\vec{\mathbf{A}}(\omega | \varepsilon_1(\omega | \mathbf{V}), \varepsilon_2, \varepsilon_3)$ ) зависят от индукции внешнего

магнитного поля. Скорость  $w(\omega | R_2 > r > R_1, \theta)$  поглощения фотонов молекулами, внедренными в диэлектрическую оболочку цилиндрического нанокомпозита будет по-прежнему определяться выражением (17), однако вместо поля  $\mathbf{E}_3(r, \theta | \mathbf{V})$  в нем теперь должна фигурировать величина  $\mathbf{E}_2(r, \theta | \mathbf{V})$  – напряженность локального электрического поля в точке расположения молекулы внутри оболочечного слоя  $R_2 > r > R_1$ .

*Поглощение света молекулами и скорость генерация экситонов Френкеля в оболочечном слое молекулярных J – агрегатов композитного наночилиндра*

В случае, когда проводящий наночилиндр окружен оболочкой из органических молекул (например, цианиновых красителей), сгруппированных в J-агрегаты, образуется квазикристаллический слой, представляющий собой однородно поглощающую свет систему, с генерацией в этом слое экситонов Френкеля. В этом случае, скорость  $w(\omega | R_1, R_2)$  поглощения фотонов оболочкой цилиндрического нанокомпозита будет определяться интегралом от квадрата напряженности  $\mathbf{E}_2(r, \theta)$  локального поля в слое толщиной  $\Delta R = R_2 - R_1$  [4]

$$w(\omega | R_1, R_2) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{R_1}^{R_2} \text{Im } \varepsilon_2(\omega) |\mathbf{E}_2(r, \theta | \omega)|^2 \pi d\theta r dr. \quad (23)$$



Картина поля вблизи резонансной частоты  $\omega_{res1} = 0,721 \cdot \omega_p$

Картина поля вблизи резонансной частоты  $\omega_{res2} = 0,6 \cdot \omega_p$

**Рис. 3.** Картина распределения напряженности ближнего поля вне слоистого поляризованного наночилиндра с оболочкой из молекулярных J-агрегатов и замагниченной электронной плазмой проводящего корда. Индукция магнитного поля  $B=10$  Тл,  $\mathbf{B} \parallel$  оси  $OZ$ ,  $\mathbf{E}_0 \parallel$  оси  $OY$ .  $R_2=50$  нм,  $R_1=30$  нм,  $\gamma=10^{12} \text{ c}^{-1}$ ,  $\Omega^2 F = 3 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ,  $\omega_{res}(0) = 4,61 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ ,  $\Gamma = 10^{11} \text{ c}^{-1}$

Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_2$  покрывающего слоя в этом случае имеет сильную частотную зависимость, обусловленную наличием экситонных мод в кристаллоподобном материале оболочки [7]

$$\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_0 - \frac{\Omega^2 F}{[\omega + i\Gamma(\omega)]^2 - \omega_{res}^2(0)}, \quad (24)$$

где  $\varepsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость, обусловленная всеми другими состояниями электронов, кроме экситонных состояний;  $\Gamma(\omega)$  – скорость релаксации, обусловленная взаимодействием экситонов с фононами;  $\Omega^2$  – квадрат «плазменной частоты» электронов оболочечного слоя;  $F$  – сила осциллятора экситонного перехода;  $\omega_{res}(0)$  – частота середины экситонной зоны – с нулевым волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Далее в расчетах использовались значения частотных параметров экситонов, характерные для органических молекулярных кристаллов:  $\Omega^2 F = 3 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ,  $\Gamma = 10^{11} - 10^{14} \text{ с}^{-1}$ ,  $\omega_{res}(0) = 10^{15} \text{ с}^{-1}$  [7]. Заметим, что использование для расчетов скорости поглощения композитом энергии иницирующего поля  $\mathbf{E}_0$  мнимой части удельной поляризуемости  $\text{Im}\alpha(\omega | \varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2(\omega), \varepsilon_3)$  дает величину *полной* скорости поглощения, с учетом и той части энергии, которая диссипирует в металле композита при затухании его плазмонных мод. С другой стороны, выражение (23) учитывает лишь поглощение энергии иницирующего поля оболочкой композита и непосредственно дает скорость генерации экситонов в ней. В качестве примера на рис. 3 представлены карты распределения напряженности *ближнего поля вне слоистого поляризованного наноцилиндра* с оболочкой из молекулярных J-агрегатов и замагниченной электронной плазмой ( $B=10$  Тл) проводящего корда для двух различных частот  $\omega$ , близких к резонансным. Высокочастотный резонанс может считаться условно плазмонным, и именно для него влияние магнитного поля является наиболее отчетливо выраженным [8].

В спектре поляризуемости  $\text{Im}(\alpha)$  проводящего цилиндра с диэлектрической оболочкой, на плазмонной частоте возникает резонанс, обусловленный воздействием электрического поля волны на металлическую сердцевину композита. В том случае, когда металлическая жила покрыта слоем молекулярных J-агрегатов, кроме плазмонного пика в диапазоне частот  $0.6 \div 0.65\omega_p$ , в низкочастотной области спектра возникают два экситонных резонанса [8]. С увеличением радиуса проводящей жилы, плазмонный резонансный пик увеличивается по амплитуде и смещается с высокочастотную область. Кроме того, с увеличением силы осциллятора экситонного перехода спектральная амплитуда удельной поляризуемости композита в области экситонной полосы увеличивается, а в области плазмонной полосы – уменьшается, при этом экситонные резонансы расходятся по частоте относительно друг друга с большим размахом, нежели плазмонные [8]. С увеличением частоты перехода, отвечающей центру экситонной зоны,

экситонная полоса удельной поляризуемости, в свою очередь, смещается в высокочастотную область, при этом происходит и незначительное смещение максимума плазменной полосы в том же направлении.

Таким образом, в работе получено точное решение задачи о поглощении энергии электромагнитного поля молекулами и кристаллоподобными молекулярными агрегатами, образующими внешнюю оболочку протяженного проводящего наноцилиндра при наличии внешнего магнитного поля. Приведены аналитические выражения для дипольной поляризуемости композитного наноцилиндра с замагниченной электронной плазмой металлического компонента в прозрачной стеклообразной среде. Учитывалось, что в кристаллоподобных молекулярных оболочках слоистых цилиндров возникают экситоны Френкеля, обуславливающие появление новых резонансов в функции отклика. Дальнейшая безызлучательная трансформация экситонов в аксиально-симметричной системе может быть рассмотрена с помощью методов, изложенных в [9], где проведен анализ релаксации экситонов Ванье-Мотта в полупроводниковых квантовых нитях.

Авторы благодарны Г.С. Коловертнову за помощь в проведении расчетов полей нанокompозитов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области (проект № 16-42-560671), а также Министерства образования и науки РФ (Госзадание № 233).

#### Список литературы

1. *Kucherenko, M.G. Dynamics and relaxation of excited molecular states in local field of composited nanoparticles and external magnetic field / M.G. Kucherenko // Russian-Japanese Conference «Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials»: Proceedings. OSU. Orenburg. IPK «Universitet». 2014. – P.13-15.*
2. *Гинзбург, В.Л. Волны в магнитоактивной плазме / В.Л. Гинзбург, А.А. Рухадзе // М.: Наука. 1975. -256 с.*
3. *Кучеренко, М.Г. Локализованные плазмоны в замагниченном наноцилиндре и сферическом слоистом композите с анизотропной сердцевиной или оболочкой / М.Г. Кучеренко // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции. Оренбургский гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург: ОГУ, 2016. – С. 1220-1227.*
4. *Кучеренко, М.Г. Трансформация энергии в цилиндрической наноструктуре из металлической жилы и коаксиальной оболочки с молекулами люминофора / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева // Журнал приклад. спектр.2017.*
5. *Ландау, Л. Д. Электродинамика сплошных сред. Теоретическая физика. Т.8. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц // М.: Физматлит. 2010. – 656 с.*
6. *Kucherenko, M.G. Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field / M.G. Kucherenko, V.M. Nalbandyan // Physics Procedia 73 ( 2015) 136 – 142. doi: 10.1016/j.phpro.2015.09.134 © 2015 The Authors. Published by Elsevier B.V.*

7. Давыдов, А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. // М.: Наука, 1976. –640 с.

8. Кучеренко, М.Г. Трансформация спектров удельной поляризуемости слоистых нанопроволок в магнитном поле / М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // Универ. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 1-3 февр. 2017 г., Оренбург / Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург , 2017. (Настоящий сборник).

9. Кучеренко, М.Г. Экситон-плазмонное взаимодействие в системе «полупроводниковая квантовая нить - сферическая металлокомпозитная наночастица» / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева // В сб.: Универ. комплекс как рег. центр образования, науки и культуры. Матер. Всерос. научно-метод. конфер. Оренбург. 2015. С. 1097-1106.

# ГИДРАТАЦИЯ БИОПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК, СОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИЕ КРАСИТЕЛИ

Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Алиджанов Э.К., Чайченко К.В.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

## 1. Введение

Материалы на основе комплексов краситель-полимер активно используются в настоящее время в качестве активных элементов лазеров, преобразователей солнечной энергии, регистрирующих сред для оптической записи информации [1].

Свойства таких материалов существенно зависят не только от применяемого красителя, но и от типа используемой полимерной матрицы, которая может влиять на положение в спектре полос электронного поглощения и люминесценции активатора, а также на распределение вероятностей дезактивации энергии электронного возбуждения в молекуле красителя. Выбор полимерной матрицы важен с учетом таких характеристик устройств как светостойкость, технологичность изготовления и, на что также обращается внимание в последнее время, простота последующей утилизации.

Настоящая работа посвящена изучению спектральных характеристик пленочных образцов органических красителей в ряде полимерных матриц (желатин, ДНК) при их увлажнении парами воды.

Изучение процессов, связанных с проникновением влаги через биополимерные пленки и мембраны, важно для понимания закономерностей гидратации – взаимодействия веществ с водой, при котором молекулы воды не разрушаются, т.е. процессов присоединения молекул воды к молекулам или ионам вещества. В свою очередь изучение гидратации макромолекул биополимеров – белков и нуклеиновых кислот – необходимо для понимания механизмов функционирования этих молекул [2].

Влагопроницаемость (паропроницаемость) полимеров и биополимеров материалов является важной характеристикой, которая влияет на возможности практического применения тех или иных материалов в различных областях науки и техники (изоляционные материалы, текстильная промышленность, медицина).

Содержание влаги в окружающей среде оказывает влияние на характер и интенсивность происходящих в живых объектах биохимических и физико-химических процессов. От влажности зависят физические, химические, механические и технологические свойства значительной части используемых человеком материалов. Для её регистрации используются различные датчики влажности, однако потребность в безынерционных чувствительных сенсорных методиках в настоящее время актуальна.

Цель настоящей работы состояла в установлении влияния увлажнения биополимерных пленок с внедренными молекулами органических красителей

(акридиновый оранжевый, метиленовый голубой) параами воды на спектрально-люминесцентные свойства таких систем.

## 2. Материалы и методы исследования

Для приготовления пленок использовались водные растворы красителей акридиновый оранжевый (АО) и метиленовый голубой (МГ) (концентрация растворов  $10^{-3}$  моль/л), водный раствор ДНК (MP Biomedicals Inc., Ohio, USA) с концентрацией  $10^{-1}$  моль/л, водный раствор фотографической желатины (10% по массе).

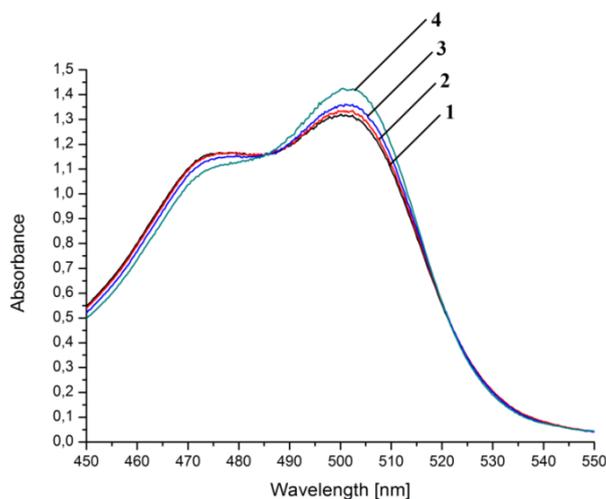
Растворы красителей готовились путём растворения навески сухого красителя в рассчитанном объёме бидистиллированной воды.

Плётки получали путём полива водного раствора полимера и красителя на стеклянные подложки.

Спектры поглощения и люминесценции образцов регистрировали на оптоволоконном спектрометре AvaSpec 2048 (Avantes). Спектры флуоресценции красителя в полимерных матрицах возбуждали излучением непрерывного DPSS-лазера (KLM-473) с длиной волны генерации 473 нм и He-Ne лазером (ЛГН-222),  $\lambda=633$  нм.

## 3. Результаты и обсуждение

На рисунке 1 приведены спектры поглощения акридинового оранжевого в плёнке ДНК при изменении относительной влажности окружающей среды от 50% (комнатная влажность) до 95%. При увеличении влажности оптическая плотность димерной составляющей спектра понижается, а мономерной – возрастает.



1 – 50%; 2 – 65%; 3 – 80%; 4 – 95%

Рисунок 1 – Спектры поглощения акридинового оранжевого в плёнке ДНК при увеличении уровня относительной влажности воздуха.

Данный результат свидетельствует о том, что пленка ДНК обладает заметной проницаемостью для паров воды. Наблюдаемый эффект может быть положен в основу методики анализа влагопроницаемости пленочных

материалов, а также метода определения влажности среды, в которой находится пленочный образец.

Процессы, лежащие в основе наблюдаемых спектральных изменений, связаны с обратимыми переходами между различными комплексами связывания АО и ДНК [3]. Так, при увлажнении сухой пленки [4] происходит диссоциация димеров красителя с последующей интеркаляцией мономерных молекул между парами оснований. По мере понижения относительной влажности происходит перераспределение красителя: часть молекул высвобождается из двойной спирали, образуя димерные агрегаты, связанные с ДНК по внешнему типу.

С целью увеличения чувствительности образцов к влиянию гидратации на спектральные свойства было предложено использовать люминесцентный канал дезактивации энергии возбуждения красителя.

На рисунке 2 представлены спектры флуоресценции акридинового оранжевого в пленке ДНК в зависимости от относительной влажности воздуха при росте о.в. от комнатных значений до 95%. Концентрация красителя в образце АО-ДНК подобрана так, что существенную долю в нем составляют димеры люминофора.

Флуоресценцию возбуждали излучением с  $\lambda=473$  нм, мощностью 250 мкВт.

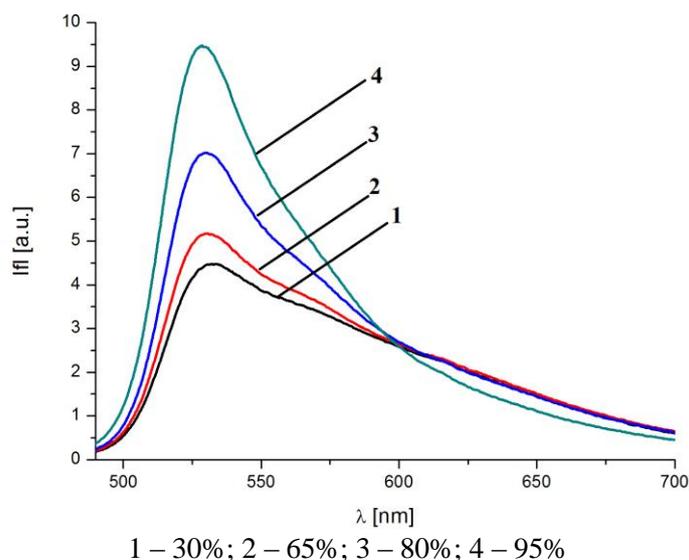


Рисунок 2 – Спектры флуоресценции акридинового оранжевого в плёнке ДНК при увеличении уровня относительной влажности воздуха

Из рисунка видно, что при увеличении влажности воздуха от комнатной (30% о.в.) до 95% происходит постепенное увеличение («разгорание») флуоресценции (более чем на 100%) красителя в пределах всего спектра. Но заметны и структурные изменения. Наиболее существенно возрастает интенсивность флуоресценции мономеров АО ( $\lambda = 530$  нм). В области же флуоресценции димеров красителя на рисунке 2 наблюдается «кажущийся» рост интенсивности свечения димеров при 580 нм, который в действительности

обусловлен увеличением вклада флуоресценции мономеров АО (спектры флуоресценции мономеров и димеров АО перекрываются).

Данный результат свидетельствует о существенном увеличении чувствительности метода регистрации влияния увлажнения на спектральные свойства образцов АО-ДНК.

С целью проверки предложенного механизма для объяснения эффекта гидратации на электронные спектры АО в матрице ДНК были проведены контрольные эксперименты.

На рисунке 3 представлены спектры флуоресценции акридинового оранжевого в плёнке желатина,  $\lambda$  возбуждения 473 нм.

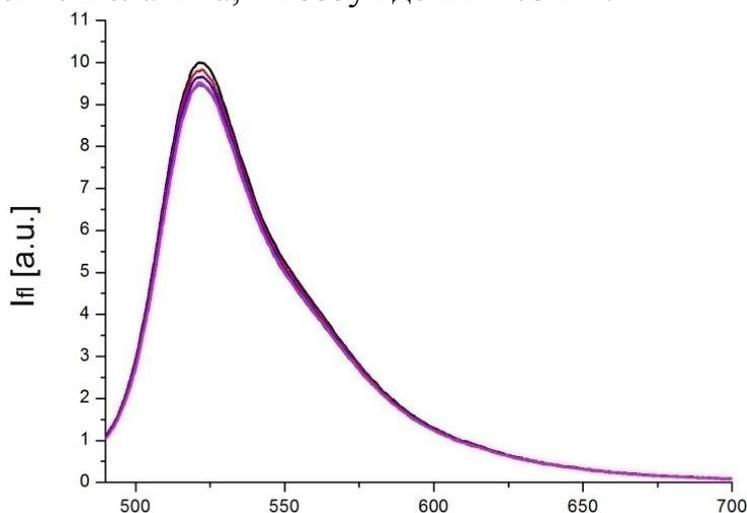


Рисунок 3 – Спектры флуоресценции акридинового оранжевого в матрице желатина при увеличении уровня относительной влажности воздуха от 40 до 90%. Концентрация красителя в пленке желатина  $0,75 \cdot 10^{-1}$  моль/л

Как видно из рисунка 3, практически никаких видимых изменений в спектрах при гидратации пленок не происходит. Это, по нашему мнению, свидетельствует о том, что увлажнение пленок желатина не приводит к изменению типа связывания красителя с биополимером в этой матрице.

На рисунке 4 представлены спектры флуоресценции пленки МГ-ДНК при различных уровнях влажности окружающего воздуха. Возбуждение люминесценции красителя производилось He-Ne лазером, длина волны 633 нм, мощность возбуждения 500 мкВт.

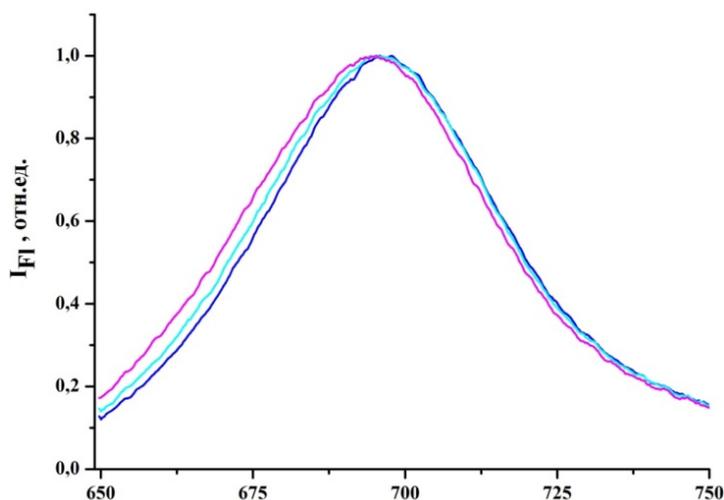


Рисунок 4 – Спектры флуоресценции красителя метиленового голубого в гидратированной пленке ДНК. Концентрация красителя в плёнке ДНК  $1,25 \cdot 10^{-2}$  моль/л. Относительная влажность воздуха изменялась от 50 до 92%.

Из рисунка видно, что спектр флуоресценции МГ, представляющий свечение мономеров красителя, практически не изменяется при гидратации пленки. Это, по нашему мнению, свидетельствует о том, что увлажнение пленок МГ-ДНК также не приводит к изменению характера связывания красителя с биополимером в этой системе.

Известно [5], что МГ образует при связывании с ДНК комплексы более сложного типа, чем АО. МГ при связывании с ДНК интеркалирует в двойную спираль в виде мономеров, как и АО, но при внешнем связывании образует димеры, состоящие из пары молекул, одна из которых закреплена в малой бороздке ДНК, а другая частично интеркалирована.

Полученные результаты могут служить основой для разработки метода предварительного контроля за состоянием и структурой комплексов связывания органических красителей с ДНК.

#### 4. Заключение

Методом спектрофотометрии исследованы превращения электронных спектров органического красителя акридинового оранжевого, внедренного в биополимерные пленки ДНК, происходящие вследствие изменения влагосодержания пленок при изменении относительной влажности в окружающей среде.

Следствием процесса конформационных перестроек макромолекулы ДНК является обратимое изменение типа связывания с ней молекул лиганда – красителя акридинового оранжевого: часть молекул АО, связанных с ДНК по внешнему типу преимущественно в виде димеров, при увлажнении ДНК переходит к связыванию интеркаляционного типа. Отмеченный процесс доступен для мониторинга спектрофотометрически в видимой области

(поглощение димеров красителя уменьшается, а мономеров – растёт), что может быть положено в основу создания оптического датчика влажности.

В пленочных системах АО-желатин и МГ-ДНК трансформация спектров флуоресценции красителя в видимой области при гидратации практически отсутствует. Это, по нашему мнению, свидетельствует о том, что увлажнение указанных пленок не приводит к изменению типа связывания красителя с биополимером в этих матрицах.

#### *Список литературы*

1. *Steckl, A.J., Spaeth H., et al. DNA as an Optical Material // OPN Optics & Photonics News. – 2011 – P.35-39.*

2. *Лантух, Ю.Д. Спектроскопические свойства биополимерных плёнок ДНК-акридиновый оранжевый / Ю.Д. Лантух, С.Н. Пашкевич, С.Н. Летута, Э.К. Алиджанов, А.А. Кульсарин // Оптика и спектроскопия, 2011. – №6. – С. 932–937.*

3. *Лантух, Ю.Д. Фотофизика оптических функциональных материалов на основе комплексов биополимеров с органическими красителями / Ю.Д. Лантух, С.Н. Пашкевич, С.Н. Летута, Э.К. Алиджанов – Оренбург, Вестник ОГУ, 2015. №13. С. 162–167.*

4. *Falk, M. Hydration of deoxyribonucleic acid / M. Falk, K.A. Hartman, // Am. Chem. – 1962, – Vol. 84, – P. 3843-3846*

5. *Nordén, B., Tjerneld F . Structure of methylene blue – DNA complexes studied by linear and circular dichroism spectroscopy. / Biopolymers 1982, – V 21, pp.1713–1734.*

# ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЗАМЕДЛЕННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ЭРИТРОЗИНА В ТКАНЯХ МЫШЕЙ IN VITRO

Легута С.Н., Пашкевич С.Н., Чакак А.А.,  
Муханова А.Ф., Сокабаева С.С., Ишемгулов А.Т.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Одной из основных реакций фотодинамической терапии (ФДТ) опухолей является перенос энергии от триплет-возбужденных зондов (сенситизаторов синглетного кислорода, СК), внедряемых в биологические ткани, на молекулярный кислород. В ряде случаев взаимодействие образуемого СК с другим триплетным возбуждением (так называемая синглет-триплетная аннигиляция, СТА) сопровождается замедленной флуоресценцией (ЗФ) зонда. Регистрация этого излучения позволяет получить ценную информацию о динамике и эффективности ФДТ [1–5]. Для количественной оценки содержания подвижного кислорода в облучаемой ткани данный подход может стать альтернативой существующим методикам, которые в целом можно разделить на две группы. К первой группе относятся методики, предлагающие измерение свечения СК [6, 7]. К сожалению, детектирование фосфоресценции СК на 1270 нм в биологических системах затруднено из-за выраженного тушения и низкой эффективности приёмников в инфракрасной области. Вторую группу образуют методы, основанные на регистрации свечения собственно сенситизатора [6, 8]. Обычно считается, что чем больше концентрация кислорода, тем сильнее тушение люминесценции зонда. Однако, помимо кислорода, часто приходится учитывать множество других факторов, оказывающих влияние на параметры свечения зонда, поэтому методы второй группы позволяют судить о динамике концентрации СК лишь опосредованно. При использовании СТА объединяются преимущества обоих подходов: свечение, обусловленное реакцией с участием СК, можно наблюдать в видимом диапазоне. Таким образом, предоставляется возможность мониторинга содержания кислорода в ткани и оценки эффективности ФДТ в режиме реального времени.

Исследованы ткани мышей линии BYRB, у самок которых на 8 – 10 месяце с высокой вероятностью образуются специфические однотипные злокачественные опухоли молочных желёз [9]. Лабораторные животные разводились в обычных условиях содержания. Окрашивание производилось путём погружения биологического материала в водный раствор эритрозина исходной концентрации  $10^{-3}$  моль/л. Эритрозин известен в гистологии как краситель, подсвечивающий внеядерные структуры клеток и тканей [10]. Его замедленная люминесценция представлена двумя яркими полосами: ЗФ с максимумом на 565 нм и фосфоресценция на 690 нм.

В наших экспериментах источником возбуждения служил импульсный твердотельный YAG:Nd<sup>3+</sup> лазер. Кинетика длительной люминесценции регистрировалась с помощью ФЭУ-84 с управляющим электродом. Возбуждение осуществлялось второй гармоникой лазера (532 нм) в режиме

серии лазерных импульсов мощностью накачки 10–15 МВт и длительностью 15 нс, следующих с заданной частотой. Все измерения производились при комнатной температуре и нормальном атмосферном давлении. Продолжительность времени между операцией на животном и завершением эксперимента не превышала 1,5 часа.

Изучение замедленной люминесценции зондов в биологических тканях мышей показало, что основной вклад в ЗФ на первых 10 мкс после короткого импульсного возбуждения дают процессы СТА [1, 2, 4]. Данное обстоятельство позволяет выделить СТА-зависимую составляющую на фоне общего сигнала.

При исследовании затухания ЗФ эритрозина в биологических тканях при возбуждении с периодом в несколько секунд наблюдается вполне ожидаемое совпадение всех кинетических кривых, регистрируемых после каждого возбуждения. Однако при облучении тканей с большей частотой (5 – 10 Гц) картина меняется. В ходе первых 4 – 5 импульсов СТА-составляющая ЗФ испытывает заметное тушение (рисунок 1). «Потушенные» кривые сохраняют свой вид, пока действует заданный режим возбуждения. При прекращении лазерного облучения первоначальный вид затухания ЗФ восстанавливается за 3 – 5 секунд. Отсюда следует, что описанное тушение ЗФ не является результатом фотообесцвечивания эритрозина.

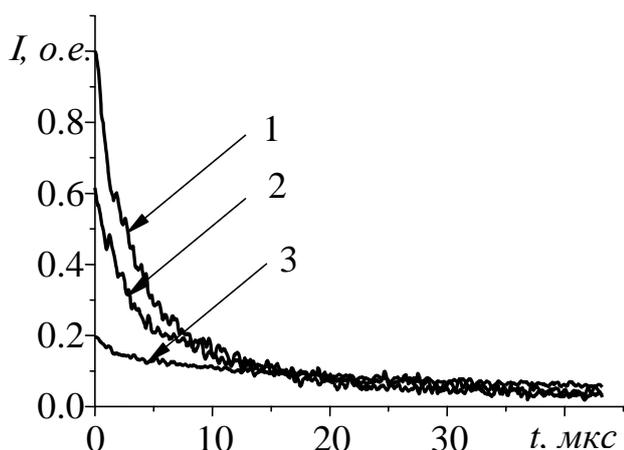


Рисунок 1 – Кинетика ЗФ эритрозина в опухоли молочной железы мыши после первого (1) и седьмого (2) возбуждающих импульсов, следующих с частотой 5 Гц. Для сравнения показана кинетика ЗФ эритрозина в той же ткани в атмосфере азота (3)

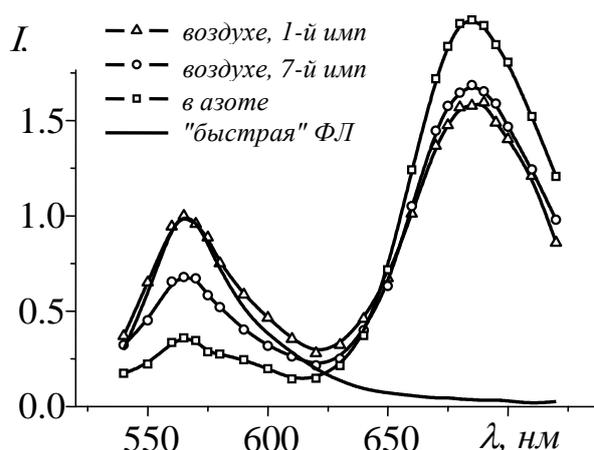


Рисунок 2 – Замедленная люминесценция эритрозина в опухоли молочной железы мыши: на воздухе (после первого и седьмого возбуждающих импульсов), а также при инкубации в азоте (ЗЛ в азоте). Сплошная линия - спектр "быстрой" флуоресценции

Эффективность тушения увеличивается с ростом частоты возбуждения или энергии накачки лазера. Характер тушения ЗФ эритрозина во многом соответствует картине, наблюдаемой при принудительном обескислороживании ткани [1–2] (пропускании газообразного азота через камеру с образцом), когда регистрируется постепенное исчезновение СТА-составляющей сигнала, – эффект заметен на начальном участке примерно до

10 мкс, длительность свечения постепенно увеличивается, тушение полностью обратимо. Отсюда можно заключить, что при лазерном возбуждении окрашенных тканей происходит расход содержащегося в ткани свободного молекулярного кислорода, убыль концентрации которого достаточно медленно компенсируется. В отсутствие кровотока в исследуемых тканях единственным источником такого рода компенсации является атмосфера над образцом.

Мы полагаем, что расход молекулярного кислорода в ткани при наличии большого количества триплетных возбуждений объясняется образованием СК, вступающего в необратимые химические реакции с компонентами тканей. Диффузия кислорода из атмосферы, судя по данным эксперимента, способна поддерживать его концентрацию при сравнительно редком возбуждении – раз в 3 – 5 секунд. При более частом возбуждении количество кислорода и генерируемого СК в ткани постепенно снижается, что отражается в изменении кинетики затухания ЗФ.

Рассмотренное тушение СТА-составляющей ЗФ при частоте возбуждения 5 – 10 Гц наблюдается преимущественно в опухолях и практически не регистрируется в контрольных образцах молочной железы. Возможным объяснением может быть то, что в одинаковых условиях опухолевые ткани накапливают больше сенсibilизатора, чем здоровые [5]. В результате интенсивность фотодинамического образования и расходования СК будет выше в малигнанных образцах. Данный факт позволяет по наличию тушения ЗФ в определённых условиях судить о злокачественном характере ткани. Если тушение ЗФ при периодическом возбуждении будет обнаружено *in vivo*, это позволит разработать новый метод диагностики новообразований.

Уменьшение концентрации кислорода и тушение ЗФ сопровождаются незначительным увеличением выхода фосфоресценции (рисунок 2). Сравнивая амплитуды изменения ЗФ и фосфоресценции, можно сделать вывод, что некоторое уменьшение или увеличение концентрации СК удобнее оценивать с помощью ЗФ: изменения в этой полосе наиболее выражены. Таким образом, регистрация СТА-зависимой ЗФ имеет преимущество перед методами, предполагающими измерение фосфоресценции зонда [5, 6, 8].

Обнаруженный эффект позволяет оценивать количество расходуемого СК в облучаемых биологических тканях [1]. Использование кислородозависимой ЗФ, обусловленной СТА, является перспективным в медицинской диагностике и фотодинамической терапии.

#### Список литературы

1. Letuta S.N. Delayed luminescence of erythrosine in biological tissue and photodynamic therapy dosimetry / S.N. Letuta, S.N. Pashkevich, A.T. Ishemgulov, Yu.D. Lantukh, E.K. Alidzhanov, S.S. Sokabaeva, V.V. Bryukhanov // *Photochem. Photobiol. B: Biology.* – 2016. – Vol. 163. – P. 232–236.
2. Letuta S. N. Features of the delayed fluorescence kinetics of exogenous fluorophores in biological tissues / S. N. Letuta, A. F. Kuvandykova, S. N.

*Pashkevich, A.M. Saletskii // Russ. J. of Phys. Chem. A. – 2013. – Vol. 87. – P. 1582–1587.*

3. *Кучеренко, М.Г. Кинетика нелинейных фотопроцессов в конденсированных молекулярных системах / М.Г. Кучеренко. – Оренбург: Изд. ОГУ, 1997. – 386 с. – ISBN 5-7410-0308-7.*

4. *Летута, С.Н. Флуоресцентная дозиметрия в фотодинамической терапии / С.Н. Летута, А.Т. Ишемгулов, С.Н. Пашкевич, Ю.Д. Лантух, Э.К. Алиджанов, С.С. Сокабаева // Вестник ОГУ. – 2015. – № 13 (188). – С. 175–180.*

5. *Узденский, А.Б. Клеточно-молекулярные механизмы фотодинамической терапии / А.Б. Узденский. – СПб.: Наука, 2010. – 192 с. – ISBN 978-5-02-025418-3.*

6. *Swartz H.M. Measuring real levels of oxygen in vivo: opportunities and challenges / H.M. Swartz // Biochem. Soc. Trans. – 2002. – Vol.30. – P. 248–252.*

7. *Li B. Singlet oxygen detection during photosensitization / B. Li, H. Lin, D. Chen, B.C. Wilson, Y. Gu // J. Innov. Opt. Health Sci. – 2013. – Vol. 6. – P. 1330–1332.*

8. *Losev A. P. Laser detection of the interaction of a sensitizer in the triplet state with oxygen in biosystems / A. P. Losev, V. N. Knyuksho, I. N. Zhuravkin // J. Appl. Spectrosc. – 1994. – Vol. 60. – P. 87–93.*

9. *Moiseeva E.V. Original approaches to test antibreast cancer drugs in a novel set of mouse models / E.V. Moiseeva. – Utrecht: Proefschrift Universiteit Utrecht, 2005. – 191 p. – ISBN 90-393-4102-8.*

10. *Veuthey T. Dyes and stains: from molecular structure to histological application // T. Veuthey, G. Herrera, V.I.Dodero. – Front. Bioscienc. – 2014. – Vol. 19. – P. 91–112.*

## **СТАБИЛИЗАЦИЯ МАГНИТНОЙ ЗАПИСИ НА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦАХ СИСТЕМОЙ МАГНИТОЖЁСТКИХ ЧАСТИЦ**

**Манакон Н.А., Толстобров Ю.В., Монтэн М., Чакак А.А.**

**Оренбургский государственный университет, г. Оренбург  
Алтайский государственный гуманитарный педагогический  
университет им. В. М. Шукшина, г. Бийск,  
Компания SEMIKRON Elektronik GmbH & Co. KG  
(СЕМИКРОН Электроник), г. Нюрнберг, Германия**

Методом микромагнитного моделирования исследуется совместное влияние поверхностной анизотропии типа «легкая ось» и системы магнитожёстких частиц на устойчивость магнитной записи на монокристаллической плёнке, при которой информационными битами являются границы полосовой доменной структуры. Установлено, что при подходящих геометрических и магнитных параметрах системы уровень устойчивости магнитной записи к воздействию внешних полей достигает уровня поля формирования записи. Размер информационного бита составляет  $18 \times 6 \text{ nm}$ , что соответствует плотности записи в монокристаллической дорожке  $6 \text{ Tbit/inch}^2$ .

PACS: 75.40.Mg, 75.60.Ch, 75.75.+a

В работах [1-3] уже рассматривались вопросы магнитной записи информации на доменных границах. Настоящая работа является продолжением этих исследований и посвящена теоретическому анализу возможностей стабилизации магнитной записи на доменных границах с помощью системы однодоменных магнитожёстких частиц. Анализ проводился в рамках теории микромагнетизма путём численного моделирования (см. [4-7]).

При магнитной записи на доменных границах, близких по структуре к блоховским, значение информационного бита определяется ориентацией поля намагниченности в границе по оси  $z$  в том или ином направлении (рисунки 1,2).

В работе [1] рассматривались методы стабилизации магнитной записи путём формирования на поверхности дорожки записи поверхностной анизотропии различных типов и расположением под дорожкой слоя намагниченных до насыщения магнитожёстких частиц, фиксирующих своим полем положение доменов в дорожке. Показано, что поверхностная анизотропия понижает устойчивость записи к внешним полям, а подслои частиц повышает устойчивость от 53 до 95 кА/м. Однако полученный таким способом уровень устойчивости остаётся значительно ниже поля формирования записи (240 кА/м [2]).

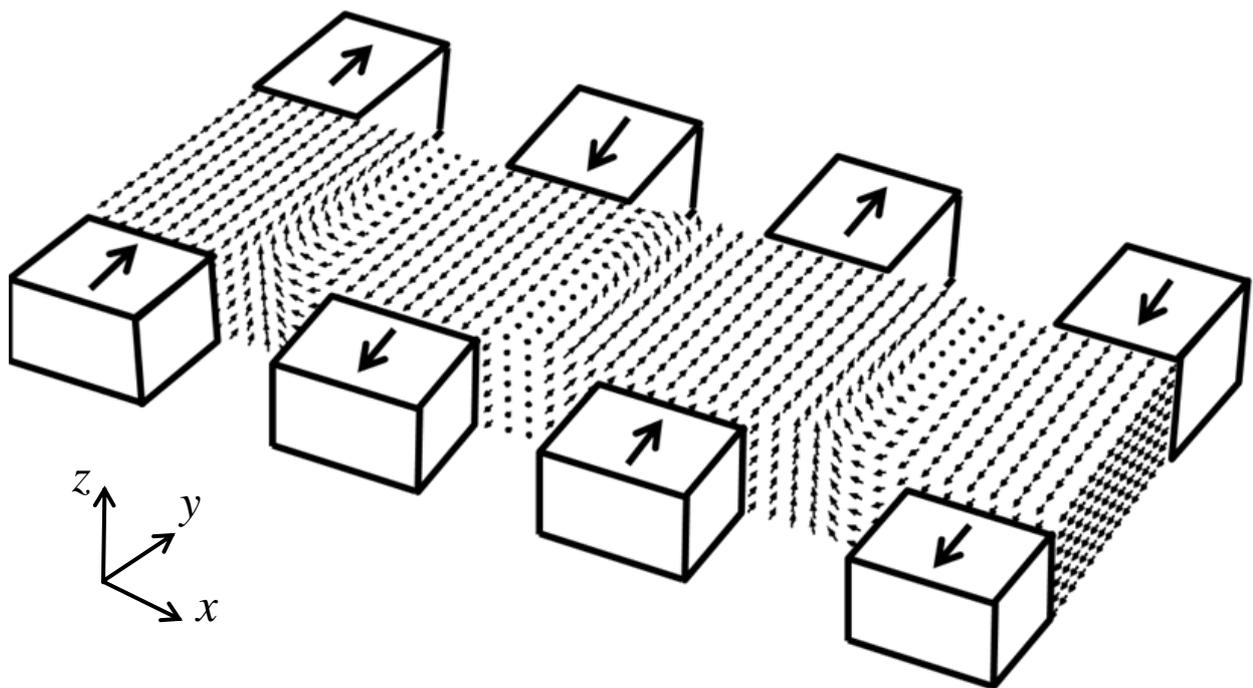
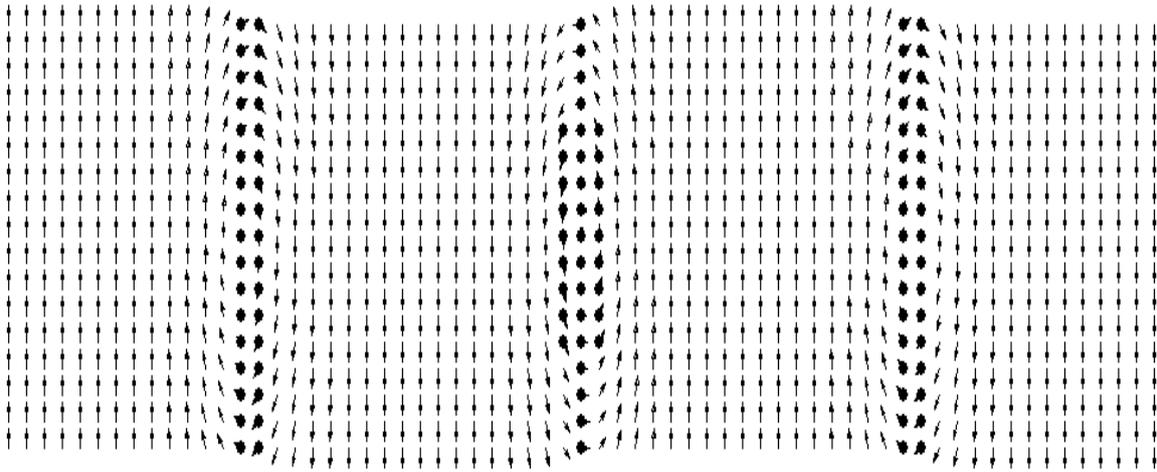
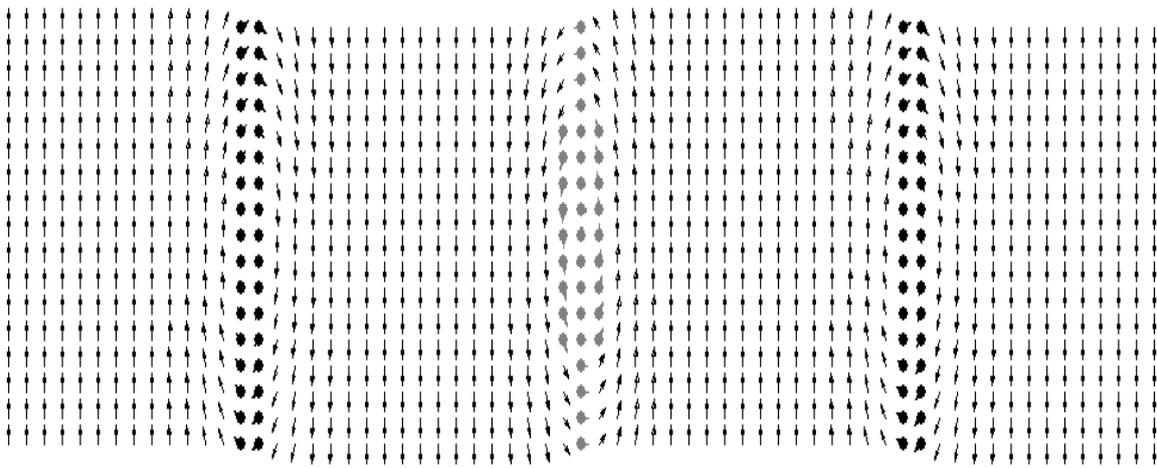


Рисунок 1. Монокристаллическая пластинка с четырьмя доменами в границах, в которых намагниченность ориентирована преимущественно по оси  $z$ . Большими стрелками показано направление поля намагниченности в фиксирующих частицах.

В настоящей работе предлагается модель магнитной записи на доменных границах в монокристаллических дорожках, расположенных между рядами однодоменных частиц с чередующимся направлением намагниченности. Первоначально отрезок одной из дорожек моделируется пластинкой с поперечным сечением, которое рассматривалось в работах [1,2] и составляет  $20 \times 10$  nm по координатным осям  $y$  и  $z$  соответственно. На рисунке 1 показана пластинка длиной 80 nm с окружающими ее частицами размером  $11 \times 10 \times 10$  nm и расстояниями между ними 12 nm. Предполагается, что пластинка и частицы состоят из одноосного ферромагнетика  $Nd_2Fe_{14}B$ , магнитные параметры которого приведены в [2]. Оси лёгкого намагничивания в пластинке и в частицах ориентированы по координатной оси  $y$ . Из-за высокой анизотропии частицы однородно намагничены вдоль лёгких осей и на их состояние не оказывает заметного влияния суммарное поле, создаваемое пластинкой, самими частицами, а также внешнее поле в пределах рассматриваемой величины. Частицы отделены от пластинки тонкой немагнитной прослойкой, исключаяющей обменное взаимодействие, и влияют на пластинку только собственным (магнитоэстатическим) полем, метод учёта которого описан в [1].



(a)



(b)

Рисунок 2. Изменение ориентации доменной границы в центре пластинки под действием внешнего поля: *a* – ориентация всех границ по оси *z*; *b* – конфигурация с ориентацией средней границы противоположно оси *z*. Темными кружками отмечены векторы, ориентированные преимущественно по оси *z*, светлыми – в противоположном направлении. Показана проекция поля **m** на плоскость *xu* в среднем сечении пластинки.

Трёхмерное поле намагниченности  $\mathbf{M} = \mathbf{M}(x, y, z)$  в монокристаллической пластинке рассчитывается путем нахождения стационарных решений уравнения Ландау-Лифшица с граничным условием, учитывающем поверхностную анизотропию [1]:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial (-\mathbf{n})} = \frac{LK_s}{2A} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) [\mathbf{n} - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{m}].$$

Здесь  $\mathbf{m} = \mathbf{M} / M_S = (m^x, m^y, m^z)$  – единичный вектор;  $M_S = |\mathbf{M}|$ ;  $\mathbf{n}$  – внешняя нормаль к поверхности пластинки;  $\partial \mathbf{m} / \partial(-\mathbf{n})$  – производная вектора  $\mathbf{m}$  по направлению вектора  $-\mathbf{n}$ ;  $A$  – константа обмена;  $L$  – характерный линейный размер (одна из сторон пластинки);  $K_S$  – коэффициент поверхностной анизотропии. В расчётах использовались значения  $K_S = 0$  и  $K_S = -5.11 \times 10^{-3} \text{ J/m}^2$  [1], соответствующие отсутствию поверхностной анизотропии и поверхностной анизотропии типа «лёгкая ось». Расчёты проводились на равномерной сетке с шагом равным 0.25 nm. На рисунках показана проекция поля  $\mathbf{m}$  на крупную сетку.

В работе [1] показано, что в пластинке без фиксирующих частиц и  $K_S \leq 0$  разрушение магнитной записи внешним полем происходит путём взаимного поглощения доменов или их вытеснением за пределы пластинки. Предполагалось, что расположенные по обе стороны от пластинки частицы своим полем будут лучше фиксировать домены по сравнению с их расположением под пластинкой, что должно повысить устойчивость записи. Действительно, устойчивость доменной структуры повысилась втрое (с 95 до 290 kA/m), однако устойчивость записи неожиданно понизилась до 90 kA/m. Такой эффект обусловлен изменением механизма разрушения записи. В случае ориентации всех границ в одном направлении (рисунок 2a), при действии внешнего поля по оси  $y$  средняя граница перемагничивается в противоположное направление (рисунок 2b), что означает потерю информации, которая задается ориентацией намагниченности в границе. Это объясняется энергетически более выгодным состоянием системы с чередующимся направлением ориентации границ по сравнению с ориентацией в одном направлении. Можно ожидать, что в рассматриваемой системе сохранению ориентации границ должна способствовать поверхностная анизотропия типа «лёгкая ось». Действительно, в системе с фиксирующими частицами и  $K_S < 0$  устойчивость ориентации доменных границ и, соответственно, устойчивость записи возросла почти вдвое (от 90 до 170 kA/m) при сохранении уровня устойчивости доменной структуры (290 kA/m). Негативным фактором влияния поверхностной анизотропии оказался значительный рост поля формирования записи [2] (от 240 до 390 kA/m). Для понижения этого поля размер поперечного сечения пластинки уменьшался с  $20 \times 10$  до  $6 \times 6$  nm. Размер фиксирующих частиц выбирался равным  $12 \times 10 \times 6$  nm с расстоянием между ними 6 nm. Формирование записи (перемагничивание границы) проводилось внешним полем, действующим над центром границы в полосе шириной 24 nm по оси  $x$  и наклонённом от оси  $z$  к оси  $x$  на  $45^\circ$ . В этом случае для перемагничивания центральной границы из ориентации на рисунке 2b в ориентацию на рисунке 2a, соответствующую росту свободной энергии системы, оказалось достаточно поля 310 kA/m. Перемагничивание границы в обратном направлении происходит в поле 290 kA/m. Устойчивость записи проверялась воздействием однородного внешнего поля на весь образец в направлениях координатных осей, а также по направлению поля записи. Оказалось, что одновременно с

понижением поля формирования записи повысилась ее устойчивость. Поле, разрушающее магнитную запись в наименее устойчивом состоянии (рисунок 2a), совпало по величине и направлению с полем записи, т.е. составило 290 кА/м. Разрушение записи происходит путём перехода системы в состояние, показанное на рисунке 2b.

Таким образом, совместное действие поверхностной анизотропии и системы магнитожёстких частиц при подходящих геометрических и магнитных параметрах системы позволяет поднять уровень устойчивости магнитной записи до максимально возможного значения – уровня поля формирования записи. В описанной выше системе размер информационного бита составляет  $18 \times 6$  нм, что соответствует плотности записи в монокристаллической дорожке 6 Tbit/inch<sup>2</sup>.

#### Список литературы

1. Толстобров, Ю. В. Устойчивость магнитной записи на доменных границах [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, Г. С. Шиллинг, Д. Ю. Коротких // Письма в ЖТФ. - 2012. - Т.38. - вып. 23. – с. 64–68.
2. Толстобров, Ю. В. Магнитная запись на доменных границах монокристаллической плёнки [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, А. С. Заиграев // Письма в ЖТФ. - 2009. - Т.35. - вып. 19. – с. 1–5.
3. Толстобров, Ю. В. Влияние поверхностной анизотропии типа "лёгкая плоскость" на магнитную запись на доменных границах [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, Г. С. Шиллинг // Письма в ЖТФ, 2011, Т. 37, вып. 5. – с. 38-42.
4. Манаков, Н. А. Микромагнитное моделирование доменных структур в монокристалле Co. [Текст] / Н. А. Манаков, М. Д. Старостенков, Ю. В. Толстобров, А. А. Черемисин // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – Барнаул, 2004, №2. - с. 47-53.
5. Толстобров, Ю. В. Влияние метода минимизации функционала свободной энергии на результаты микромагнитного моделирования [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, А. А. Черемисин // ФММ. – 2004. - Т. 98, №3. - с. 16-22.
6. Толстобров, Ю. В. Микромагнитное моделирование распределения намагниченности в полубесконечных монокристаллах [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков // ФММ, 2006, Т. 102, № 6. – с. 597-601.
7. Манаков, Н. А. Микромагнитное моделирование влияния поверхностной анизотропии на доменные структуры в нанопластинке [Текст] / Н. А. Манаков, Ю. В. Толстобров, Г. С. Шиллинг // Вестник Оренбургского государственного университета. – 2009. - № 10. – с. 130-133.

# МЕСТО ФИЗИКИ В СИСТЕМЕ ОБРАЗОВАНИЯ И ВОСПИТАНИЯ

Манаков Н.А., Чакак А.А.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Величайшим достижением человеческого гения является то, что человек может понять вещи, которые уже не может вообразить. Л. Ландау

**Введение.** Школьный курс физики – основной компонент естественнонаучного образования. Изучение физики в школе имеет важное значение в подготовке учащихся к жизни в современном мире техники, а также в становлении их общего мировоззрения. До недавнего времени основной целью школьного физического образования считалось формирование у школьников глубоких и прочных знаний основ физики. Но сейчас на первое место выдвигаются задачи развития и воспитания учащихся в процессе обучения физике [1, 7, 10]. Поэтому перед физическим образованием в настоящее время стоят следующие основные задачи: формирование основ научного мировоззрения учащихся, развитие их интеллектуальных способностей и познавательных интересов, политехническое образование и подготовка учащихся в процессе обучения физике к выбору профессии.

"Без хорошего знания физики нельзя подготовить квалифицированных специалистов – ни инженеров, ни айтишников, ни технологов, ни нефтяников. А без таких специалистов вывести экономику страны на мировой уровень невозможно" (ректор Казанского федерального университета Ильшат Гафуров).

Физика очень непростая дисциплина. В этом мнении сходятся и ученики, и их родители, и администрация, и преподаватели, ведущие другие предметы. При изучении физики школьник впервые сталкивается с объектами, явлениями и процессами, которые не может вообразить. Поэтому возникают психологические трудности, препятствующие пониманию и усвоению материала. Преодоление этих трудностей развивает абстрактное мышление учащегося, а необходимость последовательного усвоения физических знаний на языке математики – логическое мышление.

Физика тесно связана со всеми науками о природе и служит теоретическим фундаментом современной техники. Ее теории и методы широко применяются в химии, астрономии, биологии, геологии и во многих областях техники. Она является основой многих направлений научно-технического прогресса. Гуманитарное значение физики как составной части общего образования состоит в том, что она вооружает школьника научными методами познания и является важнейшим фактором воспитания и развития полноценной личности.

Современные реалии требуют коренного пересмотра содержания школьных курсов и создания курса, в котором единство, системность и самоорганизация будут основными идеями, вокруг которых будут формироваться все изучаемые в школе дисциплины [5]. Вероятнее всего, физика будет занимать центральное место в структуре системы школьного построения дисциплин нового типа, так как физика является фундаментом современного естествознания. Именно в рамках курса физики на простейших моделях можно в доступной для школьников форме показать понятия единства, системности и самоорганизации.

Изучение физики предполагает овладение модельным подходом к анализу явлений, процессов и систем; освоение экспериментальных методов исследования природы; приобретение навыков решения не только идеализированных, но и реальных физических задач.

**Модельный подход.** Основа изучения физики и одновременно главная трудность для ученика - построение моделей и познание с их помощью процессов и явлений окружающего мира. С помощью физических моделей физика получает информацию об изучаемом предмете, анализирует и обрабатывает полученные данные, включает их в систему известных научных знаний.

Сущность модельного подхода заключается в выделении главного в изучаемом объекте и отказе от несущественного. Отказ от несущественного для выделения главного – это большая личностная проблема для подростка и в учебе, и в повседневной жизни. Строго говоря, все природные процессы, явления физика рассматривает не в их натуральном виде, а сводя процесс или явление к некоей упрощенной версии, отбрасывая несущественные, второстепенные черты. Таким образом, научная (в данном случае физическая) модель – это мысленно представленная или материально реализованная система, которая адекватно отображает предмет исследования и способна замещать его так, что изучение модели позволяет получить новую информацию об этом объекте [7].

Наиболее сложно школьникам усвоить тот факт, что моделирование – это метод создания и исследования моделей (главное преимущество такого метода – целостность представления информации), который основывается на синтетическом подходе – вычленяет целостные системы и исследует их функционирование [7]. Затрудняет понимание модельного подхода и необходимость вводить очень много допущений и упрощений, прибегать к условным схемам. Именно модельному подходу может и должна учить физика школьников, так как это является одним из основных методов современного научного изучения действительности. Наглядным свидетельством эффективности модельного подхода могут служить виртуальные компьютерные модели. При работе с ними повышается интерес учащихся к физике, максимально используются психофизические и интеллектуальные ресурсы личности учащегося, развивается творческий потенциал, расширяется кругозор, устанавливается связь теории и практики [2].

Учащимся трудно привыкнуть и осознать относительность истин в физике. Им хочется усваивать абсолютные истины, им хочется наглядных представлений о физических процессах и явлениях. Например, каков «на самом деле» электрический ток или свет, что представляет собой электрон или атом, что такое спин электрона и т.д. Необходимость признания, что ответить однозначно на эти вопросы невозможно, вызывает у них невольный внутренний протест. Но именно эта особенность даёт возможность учителю развивать у учащихся диалектический подход к явлениям окружающего мира, включение которого в систему взглядов ученика является для него значительной проблемой [9].

Учитель должен отметить для себя, что диалектический путь познания истины состоит в установлении закономерностей и законов, максимально "уплотняющих" информацию, которой владеет наука, и сокращающих её объем [11]. Это сокращение достигается не сокращением "ненужной" информации, а путем сведения единичных зависимостей к существенным отношениям. Исходя из этого, закономерности и законы одновременно как бы проясняют знания, упрощают их, придают им более рациональную форму, удобную для хранения и передачи.

Благодаря закономерностям и законам человек может оперировать несравненно меньшим количеством информации, но информация эта будет более высокого качества. Именно в воспитании человека, с легкостью оперирующего подобной информацией, и заключается главная цель преподавания любой науки и физики, в частности.

Учащийся также должен осознать существование абсолютных законов (например, закона сохранения импульса или энергии) – всеобщих и универсальных законов материального мира, действие которых проявляется во всех областях действительности, и законов - запретов (например, запрета на существование вечного двигателя) [10]. Осознание существования подобных законов для учащегося представляет определённую трудность, так как требует отказа от многих сложившихся ранее обыденных представлений. Поэтому учителю необходимо обратить на это особое внимание, поскольку подобный подход к видению окружающего мира является мощным психологическим фактором формирования личности учащегося, критически настроенного к современным псевдонаучным суевериям.

**Физический эксперимент.** В исследовательском аппарате физики существует мощный метод познания природы – физический эксперимент. Физика в основе своей экспериментальная наука, поэтому наблюдения и опыты являются основным (а чаще всего единственным) источником знаний о природе физических явлений. Учащиеся в процессе изучения физики должны четко осознать, что опыт является средством проверки любой физической теории, основным критерием истины. Они должны понять, что вне опыта никакое высказывание нельзя считать верным и что справедливость любого закона проверяет эксперимент.

Для ученика это не простая задача, так как он привык многое принимать на веру (в частности, безоговорочно принимать и не подвергать сомнению слова учителя или воспитателя). Выработка подобных взглядов приучает к экспериментальной доказательности любых утверждений, что является одной из важнейших целей изучения физики в современной школе. Этому служат различного рода эксперименты, демонстрации и лабораторные работы в рамках физического практикума. Они сопровождаются изучением различных приборов и устройств, что обычно нравится школьникам. Но их очень удивляет подход с рассмотрением достоинств и недостатков каждого устройства. В воображении подростков наличие достоинств исключает наличие недостатков. Такой подход обычно сильно меняет самооценку школьников. Они начинают понимать, что и каждый человек, и всякая вещь обладают как достоинствами, так и недостатками, что не бывает идеальных во всех отношениях людей и вещей.

Физика – первый для школьников учебный предмет, главным инструментом которого является опыт [11]. Умения наблюдения и анализа в процессе проведения эксперимента для них – дело крайне непростое. Несомненными преимуществами физического практикума являются высокая степень активности и самостоятельности учащихся при выполнении эксперимента, выработка умений работы с приборами и навыков обработки результатов наблюдений и измерений. Важно также, что при этом устраняется промежуточное звено между учеником и изучаемым им явлением природы. При выполнении физического практикума весьма полезно использовать метод проектов [3, 12]. Он даёт учащимся возможность приобрести опыт самостоятельной конструктивной работы. При выполнении коллективных проектов развиваются коммуникативные навыки практической деятельности в команде. Очень важно организовывать самостоятельную исследовательскую и проектировочную деятельность школьников во внеурочное время на основе ТРИЗ – педагогики [3, 4].

Все вышеперечисленное способствует формированию естественнонаучного мировоззрения учащегося, а также обучает его умению планировать и проводить эксперимент, что является краеугольным камнем в здании любой современной науки (будь то биология, химия или педагогика). Причём для ученика очень важно научиться делать выводы из полученных в ходе эксперимента данных, соответствующие цели проводимого эксперимента. Конкретное мышление подростков мешает выходить на уровень обобщения, но если этот шаг удастся сделать, то они начинают совсем иначе рассуждать и делают гораздо более зрелые выводы. При этом у них развивается разумная самокритика, взвешенный подход к окружающей действительности.

В сочетании с физическим экспериментом следует активно использовать в учебном процессе и мысленный эксперимент. Предположения и допущения в ходе мысленного эксперимента не только позволяют наметить новый подход к проблеме, но и приводят к новым, зачастую весьма неожиданным и революционным, теориям и практическим решениям. Но школьникам бывает очень трудно что-либо «допустить». Допущения лишают их привычного

подхода, толкают их к неопределенности и непредсказуемости. Мысленный эксперимент - самый сложный для учащегося, но овладение способностью мысленного проектирования и "прокручивания" той или иной ситуации является немаловажным для учащегося не только для изучения какой - либо науки, но и для повседневной жизни, например при решении конфликтных ситуаций или планировании своих действий.

**Решение физических задач.** Одной из самых сложных проблем для ученика и учителя в процессе изучения физики является научение умению решать задачи. В процессе решения учащемуся приходится рассматривать различные варианты решения, не зная, правильный ли путь выбран (в отличие, например, от уроков математики, где учебная задача требует от ученика узнавания и применения стандартных теорем и формул) [6]. Движение на ощупь – не самый любимый для многих учащихся путь, им хочется уверенности в правильности своего решения. Навык осмысленного риска – вот что дает решение задач по физике душам детей.

Физическая же задача представляет некий системный объект, включающий содержание и средство решения. Физические объекты, физические явления и процессы в задачах рассматриваются не во всей полноте, а применимо к определённым условиям, то есть идеализируются.

При обучении умению решать задачи чаще всего, в качестве примера, рассматриваются решения типовых задач средней трудности. Это наиболее примитивный и малоэффективный метод, часто приводящий к формализму. Для достижения высоких результатов необходимо использовать методы, способствующие развитию самостоятельного мышления, исследовательских умений и творческого подхода к делу (например, проблемно – поисковый метод, метод правдоподобных рассуждений, графический метод, метод подобия, метод векторных диаграмм, методы симметрии и размерности).

Очень важным является научение школьников самостоятельной проверке правильности решения задачи и анализу проведенного решения [8]. Сюда включается, например, решение новой задачи, сформулированной на базе данной; поиск нового способа решения; проверка итоговой формулы методом размерности и т.д. Обучение методам анализа решенной задачи представляет для ученика значительную трудность. Преодолев ее, он сумеет в будущем не только с легкостью анализировать полученную информацию, но и делать на ее основе выводы. Именно таким образом в процессе изучения физики и закладываются основы научного мышления.

**Заключение.** Подводя итоги всему вышесказанному, отметим, что успешное решение школьниками всех проблем, возникающих перед ними в процессе изучения физики, вооружает их системой знаний основ физики, способствует развитию научного мышления (исследовательского и теоретического). В ходе и в результате усвоения физических знаний закладываются основы научного мировоззрения – могучего орудия в творческой деятельности человека. Оно предполагает глубокое понимание явлений природы и общественной жизни, формирование умения сознательно

объяснять эти явления и определять свое отношение к ним, умение сознательно строить свою жизнь, ставить цели и планировать их достижение.

Сознательное усвоение системы физических знаний содействует развитию абстрактного и логического мышления, памяти, внимания, воображения, умственных способностей, развитию склонностей и дарований. Успешное изучение физики, как правило, сопровождается успешным изучением и других естественных, гуманитарных и общественных дисциплин. Не случайно многие физики внесли большой вклад в развитие философии, химии, экологии, синергетики, педагогики и других наук.

Для обновления школьного физического образования, для создания оптимальных условий развития каждого ученика, для воспитания человека с новым уровнем сознания, способного к самооценке и критическому мышлению, основанному на естественнонаучном мировоззрении, прежде всего, необходимы систематизация и анализ методологических и организационных проблем преподавания физики в современной средней школе.

В настоящее время рассматривается несколько концепций современного школьного физического образования, каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки. Но в любом случае не следует забывать, что учащиеся будут вовлечены в процесс изучения физики и смогут преодолеть все возникающие перед ними проблемы только тогда, когда этот предмет сможет раскрыть их собственный потенциал. "Погружение в физику" состоится только в том случае, если будут развиваться умственные способности учащихся по мере совершенствования их способностей к восприятию природы с научной, не предвзятой точки зрения, не отягченной идеологическими и религиозными догмами и предрассудками.

По мере постепенного обучения у каждого из учащихся должна развиваться способность визуально представлять себе те или иные процессы, и тогда физика станет стимулом для тех, кто в будущем собирается активно включиться в процесс объяснения существующего и созидания нового мира.

Таким образом, цель преподавания физики в современной школе – это развитие у учащихся способности наблюдать и размышлять, а также зарождение интереса к проблемам окружающего мира и к их решению. Физика должна научить их вести наблюдения, классифицировать, связывать между собой явления и давать им объяснения. Особый акцент в преподавании физики в современной школе должен быть сделан не только на формировании и развитии мышления, предметных знаний и умений, а на воспитании информированного и думающего гражданина, способного осмыслить научные вопросы в контексте социальных и личностно значимых задач. Формированию такого видения мира способствуют интегрированные курсы. В таких курсах должны рассматриваться история физики как науки, вопросы охраны окружающей среды, социальные и этические проблемы, возникающие в обществе в связи с использованием физических знаний.

### Список литературы

1. Манаков, Н. А. Место физики в системе общего и специального образования / Н. А. Манаков, А. С. Вдовин и др. // Педагог. – 2001. – № 2 (11). – с. 48-51.
2. Манаков, Н. А. Проблемы внедрения компьютерных технологий в образовательный процесс / Н. А. Манаков, Р. С. Вдовин и др. // Технологическое образование (проблемы и перспективы развития): Сб. трудов региональной научно-практической конференции. – Новосибирск: Изд. НГПУ, 2002. – с. 89-95.
3. Манаков, Н. А. Ваш первый научный проект: методические рекомендации / Н. А. Манаков, О. Ю. Наумова. – Оренбург: ОЦДНТТ, 2006. – 35 с.
4. Манаков, Н. А., Ваша первая научная работа: методические указания / Н. А. Манаков, Г. Г. Москальчук. – Оренбург: ОЦДНТТ, 2006. – 33 с.
5. Ольховая, Т. А. Ценностно-синергетический подход к исследованию проблемы становления субъектности студентов университета / Т. А. Ольховая // Вестник ОГУ. – 2011. – № 2 (121). – с. 268-273.
6. Оноприенко, О. В. Проверка знаний, умений и навыков учащихся по физике / О. В. Оноприенко. – М.: Просвещение, 1998. – 128 с.
7. Подласый, И. П. Педагогика: учебник для бакалавров / И. П. Подласый. – М.: Издательство Юрайт: ИД Юрайт, 2015. – 696 с.
8. Разумовский, В. Г. Развитие творческих способностей учащихся в процессе обучения физике / В. Г. Разумовский. – М.: Просвещение, 1975. – 272 с.
9. Старовиков, М. И. Формирование диалектического мышления как необходимое условие развития и саморазвития личности школьника / М. И. Старовиков, Н. А. Манаков // Материалы региональной научно-практической конференции «Новые технологии обучения. Их роль в развитии и саморазвитии личности школьника». – Бийск, 1997. – с. 93-94.
10. Теория и методика обучения физике в школе: Общие вопросы / С. Е. Каменецкий, Н. С. Пурышева и др.. – М.: Издательский центр "Академия", 2000. – 368 с.
11. Фронтальные лабораторные занятия по физике в 7-11 классах общеобразовательных учреждений: Книга для учителя / В. А. Буров и др.; Под ред. Г. Г. Никифорова. – М.: Просвещение, 1996. – 368 с.
12. Якупов, Г. С. Метод проектов в процессе развития творческих способностей учащихся / Г. С. Якупов, О. Ю. Наумова и др. // Материалы всероссийской научно-практической конференции «Вызовы XXI века и образование» (3-8 февраля, 2006 г.). Секция 3. Университетский округ: механизмы интеграции и социальное партнерство. – Оренбург, ОГУ, 2006. – с. 217-223.

# КАЧЕСТВЕННАЯ МОДЕЛЬ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ОБРАЗЦЕ ИЗ ПРИРОДНОЙ ГЛИНЫ ПРИ ТЕМПЕРАТУРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Савинкова Е.С., Каныгина О.Н.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Природная глина является основным веществом для производства алюмосиликатной керамики. Синтез алюмосиликатов осуществляется с помощью двух видов температурного воздействия: сушки и обжига. Сушка производится при невысоких температурах, в течение длительного времени для удаления остаточной воды из образца. Обжиг производится в интервале температур 900–1200°C, 2 часа. При сушке и обжиге происходят структурные превращения на мезо– и микроуровнях. В данной работе представлена качественная модель таких превращений.

При давлении 50 МПа из природной необогащенной глины, химический состав которой приведен в таблице 1, получены образцы методом полусухого прессования в форме дисков размерами  $d=21$  и  $h=10$  мм, размеры частиц глинистых минералов не превышали 630 мкм. Керамическая масса имела состав: 50% (масс.) частицы глинистых минералов + 50% воды затворения.

Таблица 1. Химический состав нативной глины [1].

SiO <sub>2</sub>	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	MgO	Na <sub>2</sub> O	K <sub>2</sub> O	ППП, %	∑, %
55,9	9,51	0,86	18,63	0,72	2,05	1,9	3,24	7,08	99,89

Первоначальная сушка образцов производилась на воздухе 72 часа при комнатной температуре, потеря массы при этом составила 45%. В дальнейшем образцы были разделены на 2 партии. Первая (I) партия проходила сушку в муфельной печи, вторая (II) партия – в микроволновой печи. Обе партии образцов обжигались при температурах 300, 500, 700, 1000 и 1200°C, при скорости нагрева 30 К/мин.

Образцы первой (I) партии сушили в муфельной печи при температуре 160°C 2 часа. Качественная модель процесса испарения воды во время сушки представлена на рисунке 1. Испарение воды начинается в поверхностных слоях образца, в соответствии с направлением температурного фронта. После сушки в центре образца часто формируется водяная линза (рисунок 1в), определить наличие которой весьма затруднительно.

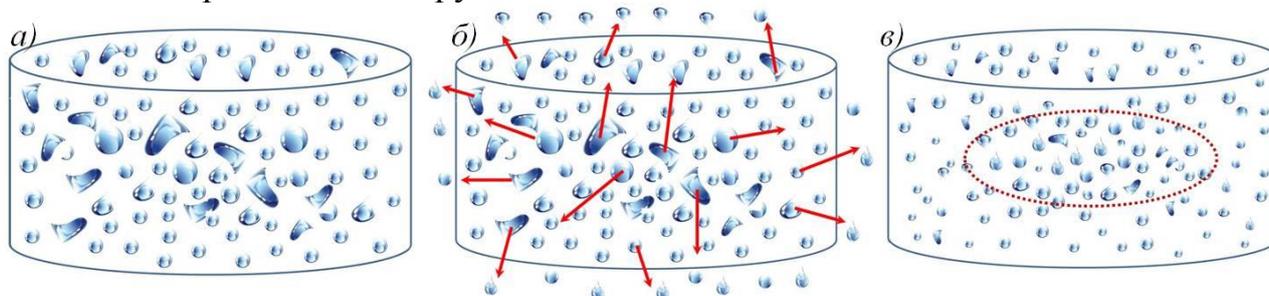


Рисунок 1. Распределение воды в образце, высушенном в муфельной печи: а) до сушки, б) во время сушки, в) после сушки.

Наличие водяной линзы приводит к разрыву образцов при высоких температурах, необходимых для синтеза керамики.

Сушка второй (II) партии образцов производилась в микроволновой печи, ( $W_{max}=750$  Вт) при следующем режиме:

- 15 минут при 20% от максимальной мощности печи (188 Вт);
- 10 минут при 40% (300 Вт);
- 10 минут при 60% (450 Вт);
- 5 мин при 80 % (600 Вт);
- 5 минут при 100% (750 Вт.).

Качественная модель перераспределения воды в образце при указанном режиме сушки представлена на рисунке 2.

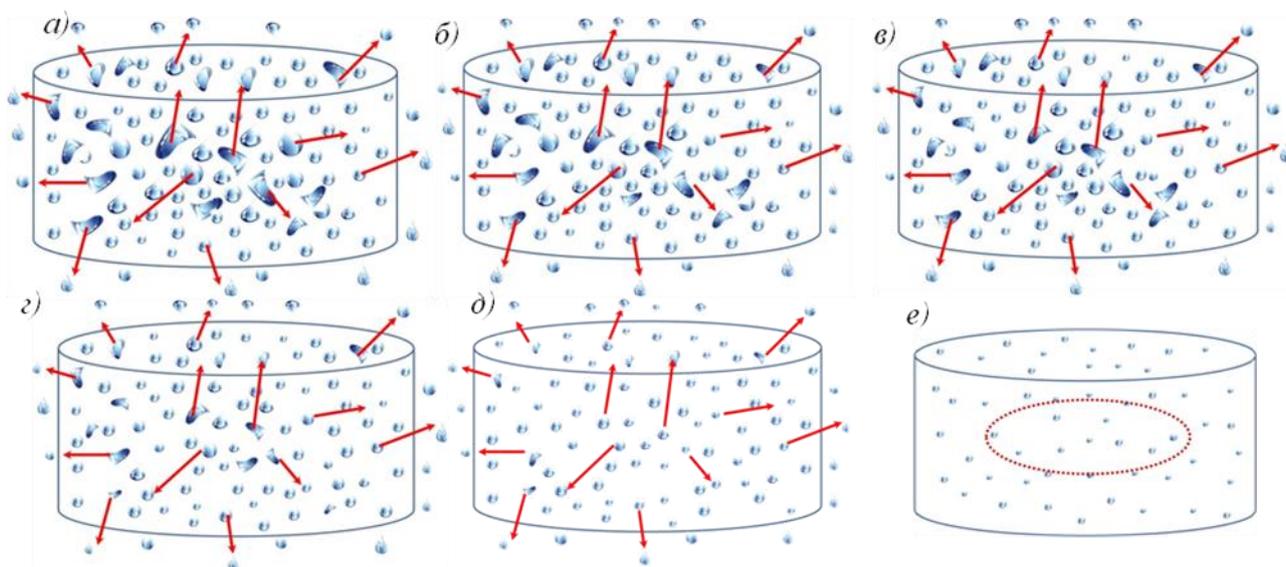


Рисунок 2. Испарение воды в образце при сушке в микроволновой печи: а) 20%, б) 40%, в) 60%, г) 80%, д) 100 % (750 Вт), е) образец после сушки в СВЧ. Нагрев в микроволновой печи начинается в центре образца, что обеспечивает равномерное удаление воды по всему объему. При использовании СВЧ-излучения наблюдается большая потеря массы (таблица 2), что объясняется более полным удалением воды, отсутствием водяной линзы (рисунок 3е). Полностью испаряется капиллярная вода, остается прочносвязанная и кристаллизационная.

Различия в технологиях сушки представлены в таблице 2.

Таблица 2. Сравнение методов сушки муфель / СВЧ-излучения.

Параметры	СВЧ-излучение; $W=0,75$ кВт	Муфель; $W=2$ кВт
Температура, °С	120	160
Время, мин	40	120
Усадка, %	1,1	0,7
Потеря массы, %	3,43	1,74

При использовании микроволновой печи в процессе сушки энергозатраты уменьшаются (рисунок 3) в 15 раз.

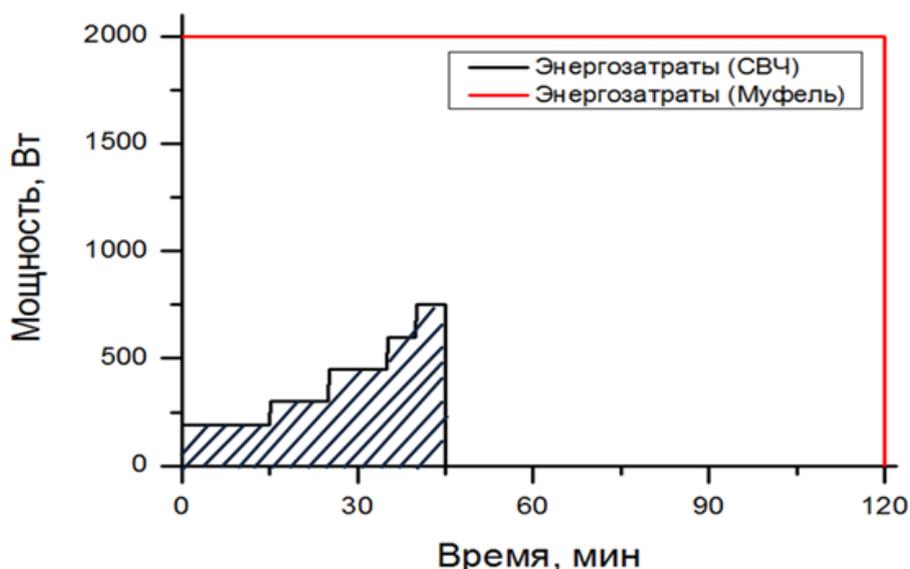
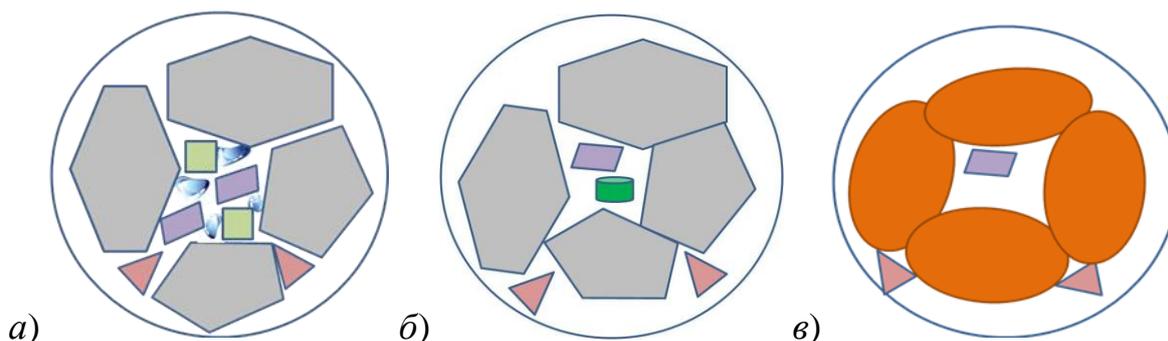


Рисунок 3. Энергозатраты при сушке в муфеле и в СВЧ–излучении.

Качественная модель начала процесса спекания по твердожидкофазному механизму представлена на рисунке 4. При обжиге 300°C активируется процесс поверхностной диффузии: возникают и начинают развиваться контактные области между поверхностями частиц (рисунок 4 а). В образцах присутствуют частицы воды в структурах монтмориллонита.

При 500°C начинается «межчастичное связывание» – образование и рост «шеек» (рисунок 4 б); потеря массы здесь связана с удалением органики и легкоплавких компонентов. С повышением температуры обжига до 700°C частицы приобретают глобулярную форму в результате активной поверхностной диффузии; расширяются контактные области между глинистыми частицам («шейки») за счет развития процессов объемной диффузии. Результатом роста шеек является закрытие сквозной пористости (рисунок 4 в). Перемещение диффундирующего вещества в область межчастичных контактов приводит к развитию процесса сфероидизации пор (рисунок 4 з).

При температурах выше 900°C начинается процесс жидкофазного спекания, сопровождающийся усадкой изолированных пор и заполнением их вязкой жидкостью – стеклофазой (рисунок 4 д). Образцы уменьшаются в объеме на 10–20%. В твердофазном каркасе произошли фазовые и полиморфные превращения (рисунок 4 з), химические реакции.



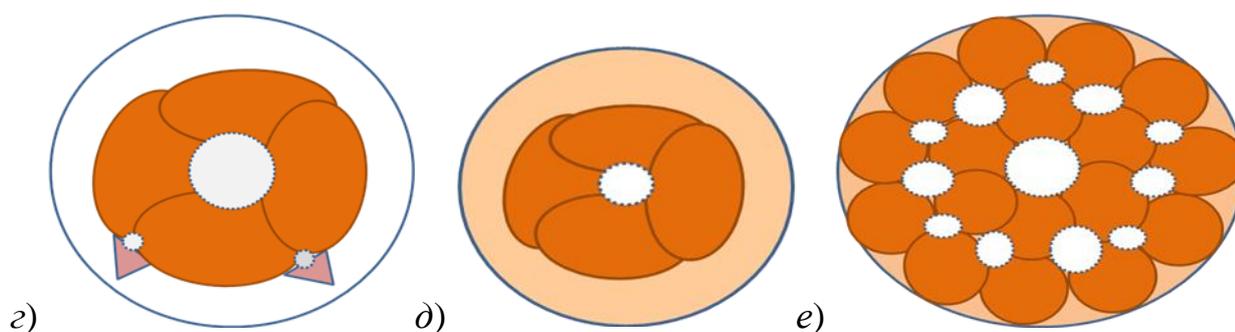


Рисунок 4. а) Развитие и возникновение связей (300°С). б) образование и рост «шеек» (500°С); в) закрытия сквозной пористости в порошковом теле (700 °С); г) сфероидизация пор (800°С), д) уплотнения порошкового тела за счет усадки изолированных пор (1000°С), е) укрупнения (коалесценция) пор (1200°С).

– монтмориллонит, – алюмосиликат, – железо,  
 – органика, – легкоплавкие компоненты,  
 – частица воды в структуре монтмориллонита.

Заключительной стадией спекания – при 1000 и 1200 °С является коалесценция – укрупнения пор (рисунок 4 д), резкое увеличение доли жидкой стеклофазы, образование твердого раствора – «желтого стекла» за счет растворения железа, сопровождающееся высокими значениями усадки.

При 1200°С образцы увеличиваются в объеме (разбухают) за счет образования крупных пор в большом количестве стеклофазы, что свидетельствует о процессах, аналогичных кипению. Пористость образца превышает 50%. (рисунок 4 е).

Качественная модель структурных превращений в образцах алюмосиликатной керамики при температурном воздействии построена с помощью значений экспериментально определенных макро–мезо–и технологических параметров ( $dl$ ,  $dm$ ,  $dV/V$ ,  $\rho$ ). Она позволяет проследить смену физико-химических процессов, протекающих в природных алюмосиликатах, определить доминирующие процессы, происходящие в двух основных фазах керамического образца – в поровом пространстве и твердофазном каркасе в различных температурных диапазонах. Модель структурных превращений в образцах позволяет сопоставить ее с реальными процессами синтеза керамики и прогнозировать вероятность получения необходимых или заданных свойств.

#### Список использованных источников

1. Каныгина О.Н. Высокотемпературные фазовые превращения в железосодержащих глинах Оренбуржья / О.Н. Каныгина, А.Г. Четверикова, Д.А. Лазарев, Е.В. Сальникова // Вест. Оренбург. гос. ун-та. – 2010. – № 6.
2. Каныгина О.Н., Монтмориллонит содержащая глина Оренбуржья как сырье для функциональных материалов. / О.Н. Каныгина, И.Н. Анисина, А.Г. Четверикова, Е.В. Сальникова Вест. Оренбург. гос. ун-та. – 2010. – № 6. С. 316–318

# ВЛИЯНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА СОБСТВЕННУЮ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ РАСТВОРОВ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА

Степанов В.Н.

Центр Лазерной и информационной биофизики,  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Особый интерес в рамках исследования переноса энергии между наноструктурами различной геометрии представляет взаимодействие элементарных возбуждений - экситонов и плазмонов. Экситон - плазмонное взаимодействие позволяет управлять поглощением и излучением гибридных структур, что делает эти структуры интересными для практических приложений. Одним из таких приложений является проблема создания экситон-плазмонных амплификаторов и конверторов электромагнитных полей оптического диапазона частот для твердотельной наноэлектроники, а также молекулярной и квантовой электроники, включая фотоэлектронную сенсорную биомолекул [1]. В ряде работ рассмотрено экситон-плазмонное взаимодействие для гибридных структур различной геометрии и состава.

В работе [2] исследовано влияние углеродных (фуллерены, нанотрубки) и металлических (Ni, Co, Fe, Cu, Ag) наночастиц на безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения между молекулами органических красителей (акридиновый оранжевый – донор и нильский синий – акцептор) в спиртовых растворах поливинилбутираля. Обнаружено влияние плазмонных наночастиц на безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения при определенных концентрациях компонентов смеси, выражающееся в увеличении интенсивности сенсibilизированной флуоресценции акцептора при одновременном тушении флуоресценции донора. Предложена простейшая модель процесса, иллюстрирующая наблюдаемое перераспределение интенсивностей свечения между спектральными полосами общего спектра.

Модель, учитывающая неоднородный характер радиального распределения звеньев полимерной цепи и сложный характер кинетики кросс-аннигиляции возбужденных электронных состояний молекул кислорода и органических красителей, связанных со звеньями макромолекулы, адсорбированной на поверхности фуллерена или углеродной нанотрубки (тубулена) в растворе, рассмотрена в работе [3].

Для исследования процессов влияния плазмонных наночастиц на собственную люминесценцию поли-пара-фениленвинилена (PPV) были отработаны методики приготовления системы и проведены эксперименты по измерению спектров. Углеродные нанотрубки и полифениленвинилен очень плохо растворяются в воде, поэтому в качестве растворителя были выбраны толуол и бензол. Известно, что некоторые процессы, протекающие в различных растворителях, имеют, тем не менее, сходные черты.

По причине неопределенности длины полимерных молекул и углеродных нанотрубок, для описания экспериментальных результатов использовалось

обозначение концентрации веществ раствора в процентом соотношении. Раствор полифениленвинилена составлял 0,00063 массовых процента, а концентрация раствора углеродных нанотрубок в относительных процентных соотношениях к максимальной концентрации их в растворе.

Воздействие на систему осуществлялась различными источниками оптического излучения. Были использованы: лазер со светодиодной накачкой с длиной волны генерации  $\lambda_{\max} = 532$  нм и полушириной линии 10 нм.; лазерный диод с длиной волны генерации  $\lambda_{\max} = 460$  нм и полушириной линии 30 нм.

На люминесцентной установке, созданной на базе монохроматора МДР 204, исследовалось влияние одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) различных концентраций на собственную люминесценцию молекул полифениленвинилена, растворенного в толуоле. Основным максимум интенсивности свечения системы наблюдался на длине волны 555 нм. Вторым локальным максимум спектра люминесценции наблюдался на длине волны 595 нм.

Было установлено, что при возбуждении раствора светодиодом с  $\lambda_{\max} = 460$  нм и полушириной линии 30 нм концентрационные зависимости интенсивности люминесценции полимера носят немонотонный характер с увеличением доли растворенных нанотрубок. Из рисунка 1 видно, что при увеличении концентрации одностенных углеродных нанотрубок от 10% до 50% наблюдается рост интенсивности свечения полимера на несколько процентов, а при дальнейшем увеличении концентрации нанотрубок – снижение интенсивности свечения PPV.

Для изучения влияния растворителя на свечение системы были проведены аналогичные эксперименты с бензолом. С целью более дифференцированных исследований интервалы изменений концентраций углеродных нанотрубок были уменьшены в 3 раза. Полученные спектры люминесценции системы «бензол – одностенные углеродные нанотрубки – фениленвинилен» представлены на рисунке 2.

При возбуждении системы лазером со светодиодной накачкой с длиной волны 532 нм спектры люминесценции имеют 2 ярко выраженных пика: первый на длине волны 560 нм, второй на 610 нм. Из графиков, см. рисунок 2, видно, что с добавлением ОУНТ от 0% до 30% наблюдается увеличение интенсивности свечения полимера в полтора раза, от 30% до 57% – незначительное уменьшение свечения PPV, от 57% до 69% увеличение интенсивности свечения на 10%. При дальнейшем увеличении концентрации углеродных нанотрубок имеет место лишь уменьшение интенсивности люминесценции, при этом характер спектральной кривой люминесценции незначительно изменяется.

При возбуждении системы светодиодом с длиной волны излучения 460 нм характер спектров люминесценции изменяется, хотя также наблюдаются интервалы концентраций нанотрубок, где интенсивность свечения как увеличивается, так и падает. При облучении системы светом с меньшей длиной волны, начинают возбуждаться другие электронно-колебательные уровни

полифениленвинилена, а также возникают другие плазмонные колебания в углеродной нанотрубке, что изменяет характер их взаимодействия и деформирует спектр наблюдаемой люминесценции. При этом характерные особенности свечения системы сохраняются.

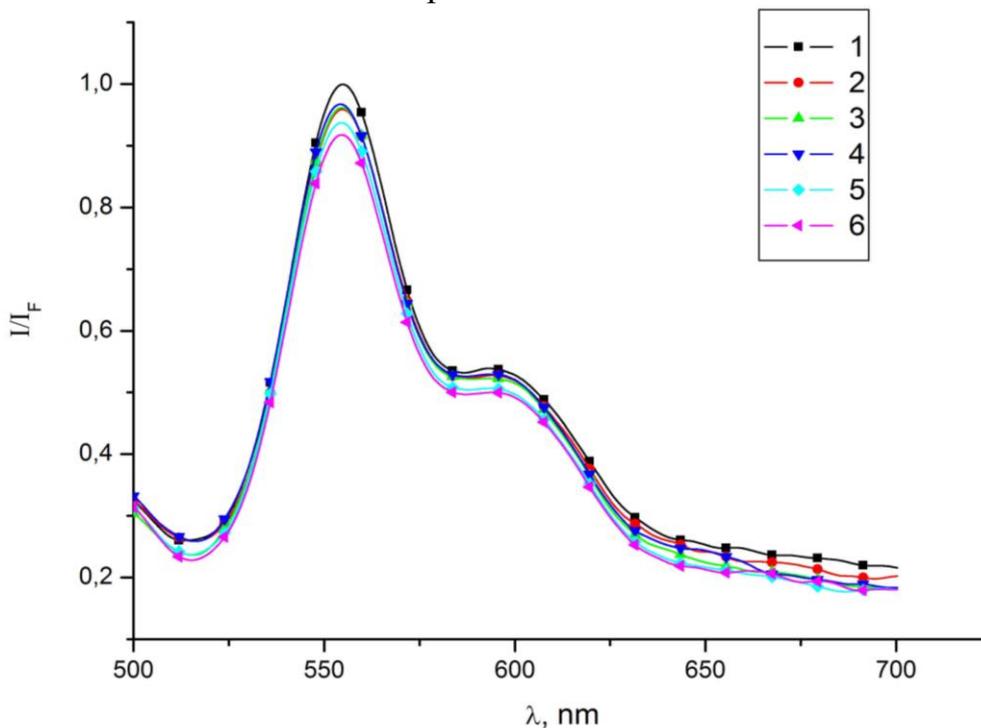


Рисунок 1 – Спектр люминесценции фениленвинилена в толуоле с добавлением одностенных нанотрубок. Концентрация ОУНТ в %: 1-0; 2-10; 3-25; 4-50; 5-75; 6-100

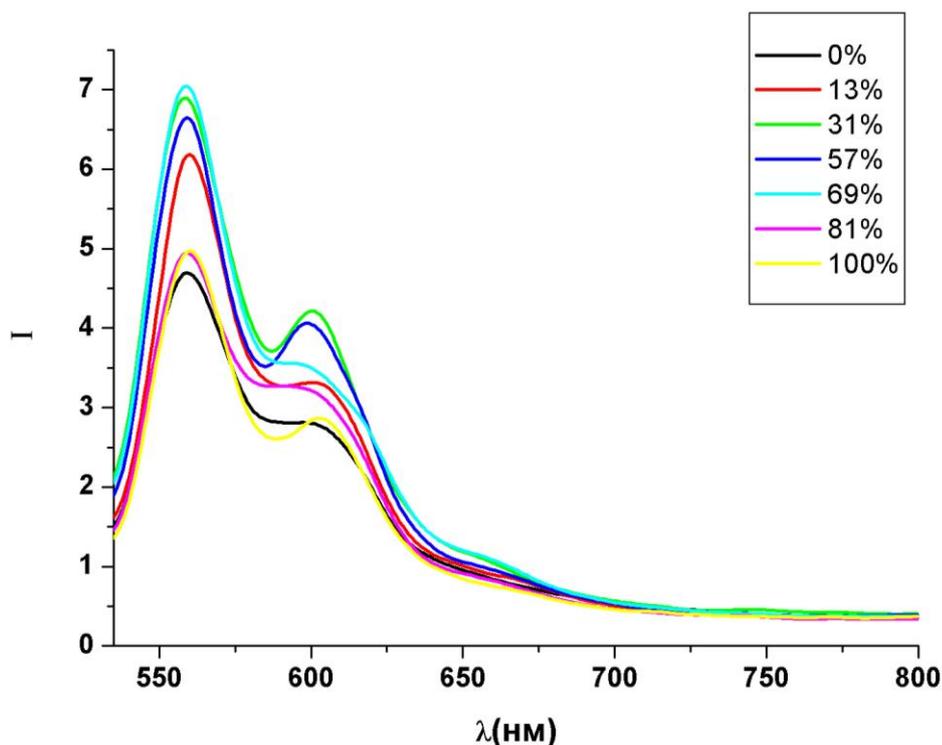


Рисунок 2 – Спектры люминесценции растворов полифениленвинилена в бензоле с различной концентрацией одностенных нанотрубок. Концентрации ОУНТ указаны на врезке

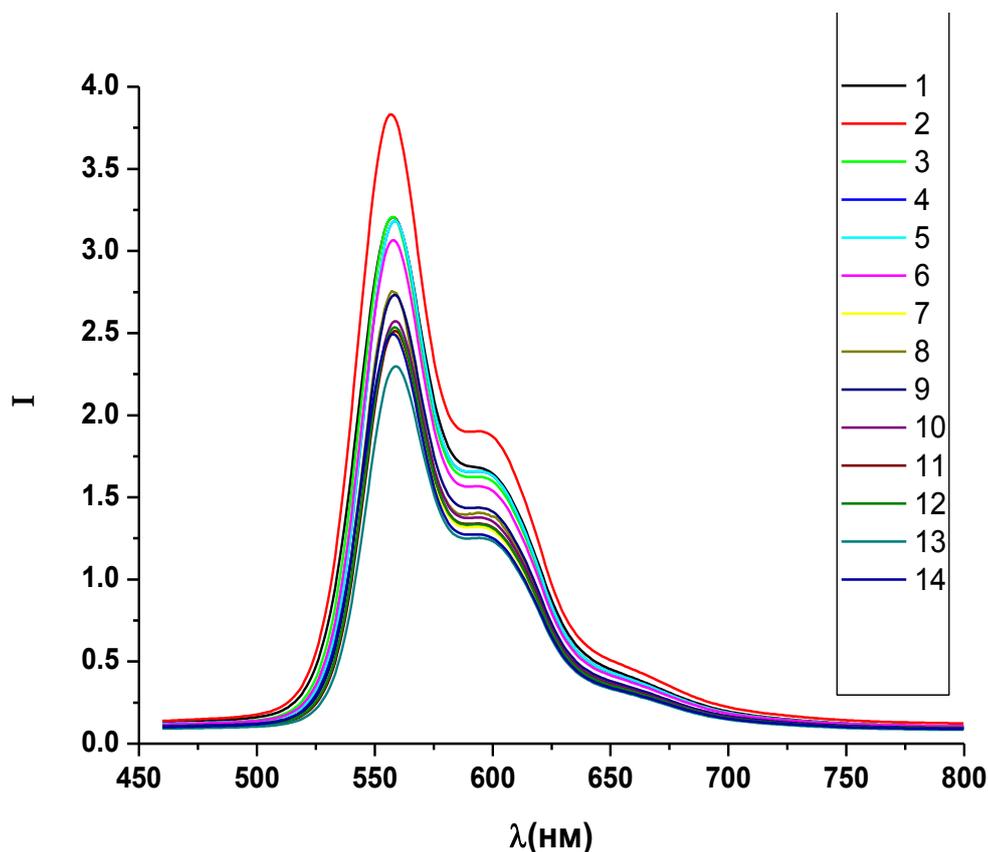


Рисунок 3 – Спектры люминесценции растворов полифениленвинилена в бензоле с различным содержанием одностенных углеродных нанотрубок. Концентрации ОУНТ: 1 - 0%; 2 - 6%; 3 - 12%; 4 - 19%; 5 - 25%; 6 - 31%; 7 - 38%; 8 - 44%; 9 - 57%; 10 - 63%; 11 - 69%; 12 - 81%; 13 - 87%; 14 - 100%

Для увеличения растворимости углеродных одностенных нанотрубок в бензоле в раствор вводили полистирол. Проявлялось влияние молекул полистирола на взаимодействие полифениленвинилена с нанотрубками. Наблюдались характерные изменения спектральных кривых люминесценции PPV. Раствор возбуждали лазером со светодиодной накачкой с длиной волны 532 нм.

Графики спектров свечения PPV для этого случая приведены на рисунках 3 и 4. Характерным отличием их от предыдущих спектров является изменение положения максимума кривой люминесценции в зависимости от концентрации углеродных нанотрубок.

Спектры люминесценции на рисунке 4 имеют два ярко выраженных пика: первый на длине волны 560 нм, второй – на 610 нм. Из графиков видно, что при наличии полистирола с добавлением ОУНТ в диапазоне концентраций от 0% до 19% происходит незначительное увеличение интенсивности люминесценции полимера, а от 19% до 69% её уменьшение почти в два раза. При увеличении концентрации от 69% до 81% наблюдается увеличение интенсивности свечения на 30% со смещением положения максимума свечения в длинноволновую область. Дальнейшее увеличение концентрации нанотрубок приводит к

уменьшению интенсивности люминесценции PPV. Возбуждение системы осуществлялось лазером со светодиодной накачкой с длиной волны 532 нм.

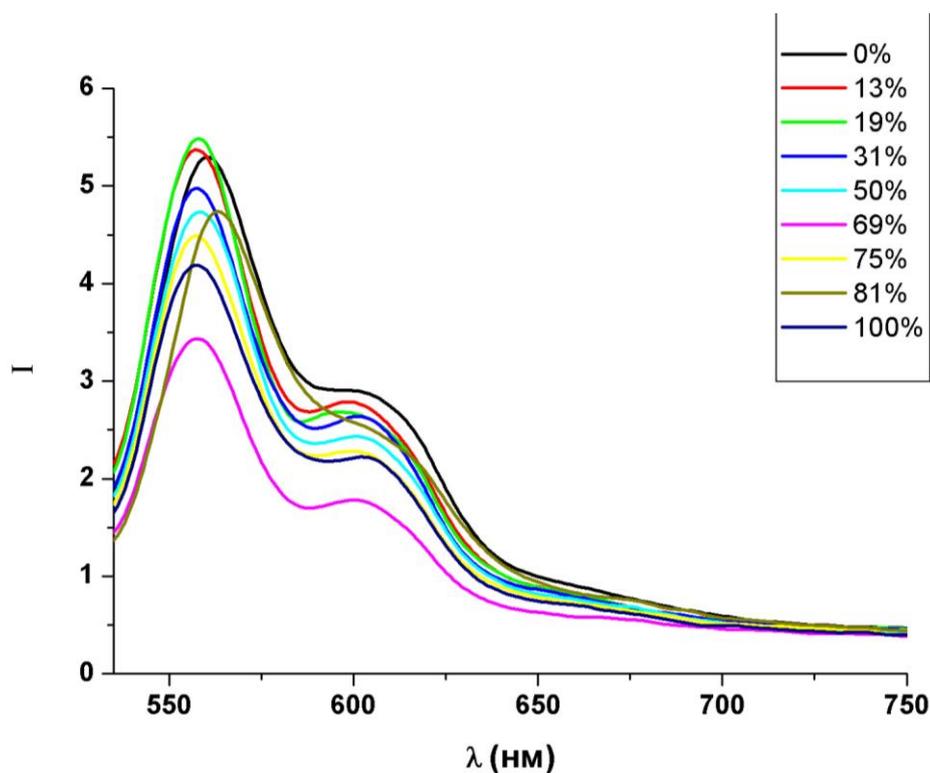


Рисунок 4 – Спектры люминесценции полифениленвинилена в бензоле с различным содержанием одностенных нанотрубок и полистирола. Концентрации ОУНТ отражены на врезке

Работа выполнена в Центре лазерной и информационной биофизики ОГУ при поддержке грантом РФФИ и Правительства Оренбургской области № 16-42-560671р\_а «Плазмонная передача энергии и повышение эффективности свечения молекулярных источников на поверхности цилиндрических оболочечных наноструктур»

#### 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 сенсорную 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. Kucherenko, M.G. Intermolecular Nonradiative Energy Transfer in Clusters

with Plasmonic Nanoparticles / M.G. Kucherenko, V.N. Stepanov, N.Yu. Kruchinin // Optics and Spectroscopy, - 2015, -Vol. 118, No. 1, -pp. 103–110. ISSN 0030\_400X.

3. Кучеренко, М.Г. Кинетика диффузионно-контролируемых фотореакций в приповерхностном слое фуллерен-тубуленовой наночастицы с адсорбированной полимерной цепью/ М.Г. Кучеренко, С.В. Измоденова, Т.М. Чмерева, Н.Ю. Кручинин, Н.С. Подрезова // Вестник ОГУ. -2013. -№ 9.-с.100-109.

# ИССЛЕДОВАНИЕ СТЕПЕНИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЁНОК ЖЕЛАТИНА, ХИТОЗАНА И ИХ СМЕСИ

Тихонов Г.А., Каныгина О.Н., Лантух Ю.Д., Чайченко К.В.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

## Аннотация

Методом рентгеноструктурного анализа исследованы полимерные плёнки желатина и хитозана, а также их смеси и выявлены различия в их структуре, связанные с условиями приготовления. Сделаны предварительные выводы о степени кристалличности полимерных плёнок.

Ключевые слова: желатин, хитозан, полимерные плёнки, рентгеноструктурный анализ, степень кристалличности.

## Введение

Биополимеры как материалы, получаемые из возобновляемых источников, обладают значительным потенциалом при использовании в современных технологиях. Они находят применение в медицине, аналитической и прикладной химии, в индустрии упаковочных материалов и др.[1].

Благодаря многим уникальным свойствам биополимеры претендуют на роль матриц при создании устройств в фотонике: активных элементов лазеров, преобразователей солнечной энергии, регистрирующих сред для оптической записи информации [2].

В связи с этим исследование физических свойств биополимерных пленок является важной научно-исследовательской задачей.

Физические и химические свойства биополимерных пленок, в том числе желатина и хитозана, исследуемых в данной работе, зависят от их состава и от условий их приготовления (таких, как температурный и влажностный режим).

Желатин представляет собой линейный высокоасимметричный полипептидный полимер белковой природы, в котором отдельные звенья макроцепи связаны пептидной связью  $-NH-CO$ . Макромолекулы желатина состоят в среднем из 500-600 аминокислотных остатков, так что их молекулярная масса лежит в пределах 40000-100000 и более [3]. Желатин занимает особое место в ряду высокомолекулярных соединений по способности образовывать разнообразные надмолекулярные структуры [4].

В фотонике желатин используется как в традиционных светочувствительных материалах, так и в технологии перспективных сред для регистрации оптической и голографической информации (слои дихромированного желатина) [5].

Хитозан является  $\beta$ -(1-4)-2-амино-2-дезоксид-Д-гликополисахаридом, производным хитина – второго по распространенности (после целлюлозы) в природе полисахарида. Интерес к изучению свойств хитозана в последнее время возник благодаря комплексу уникальных физико-химических и биологических свойств этого биополимера, обуславливающих многообразие областей его применения. Хитозан является поликатионным полимером. Благодаря биосовместимости с тканями человека и низкой токсичности хитозан предлагается на роль невирусного носителя в генной терапии. Способность усиливать регенеративные процессы в организме, подавлять рост бактерий привлекательны для использования хитозана в хирургии и других областях медицины. Известны применения хитозана в аналитической химии, текстильной, полиграфической промышленности, а также в качестве сорбентов в различных областях науки и техники.

В работе [6] исследовано взаимодействие между макромолекулами хитозана и желатина при образовании (био)полиэлектrolитных комплексов "желатин – хитозан" при постоянной концентрации желатина. Показано, что (био)полиэлектrolитные комплексы "желатин – хитозан" формируются в результате электростатических взаимодействий между положительно заряженными аминогруппами хитозана и отрицательно заряженными аминокислотными остатками глутаминовой и аспарагиновой кислот желатина.

Для получения информации о структуре образца в данной работе использовался метод рентгеноструктурного анализа. Этот метод позволяет получить информацию о степени кристалличности полимеров, характеризующейся отношением объема кристаллической фазы полимера к объему кристаллической и аморфной фаз. Степень кристалличности для большинства полимеров колеблется от 20 до 80 %. Она определяется по величине какого-либо физического свойства полимера, различного для кристаллической и аморфной фаз [7]. Как правило, кристаллическая структура более устойчива при низких температурах, а аморфная – при высоких. Известно, что степень кристалличности полимера меняется в зависимости от способа его получения, а также от того, подвергается ли он механической обработке (например, вытяжке) или термообработке. Доказано, что механические или тепловые воздействия влияют на процессы кристаллизации [8].

Для полимерных кристаллов характерна высокая степень дефектности. Она вызвана неоднородностью строения самих макромолекул, а именно так называемой первичной структуры полимера. Как правило, на концах макромолекулы имеются группы, отличающиеся по химическому составу от мономерных звеньев, например, остатки инициатора. Полидисперсность полимера приводит к тому, что вероятность упорядочения таких групп стремится к нулю, и каждая из них создаёт дефект, исключение из дальнего порядка [9]. Ширина рефлексов на рентгенограммах кристаллических полимеров обычно значительно больше, чем на рентгенограммах кристаллов низкомолекулярных веществ [10].

Целью данной работы являлось исследование структуры полимерных плёнок желатина и хитозана, а также их смеси методом рентгеноструктурного анализа.

### Материалы и методы исследования

Для приготовления образцов использовались фотографический желатин марки А и хитозан фирмы MP Biomedicals.

Плёнки готовились методом полива на стеклянные подложки из раствора. Для желатина использовался 10% (по массе) водный раствор, а для хитозана - раствор в слабой уксусной кислоте.

Для приготовления смеси желатина с хитозаном сначала готовились растворы желатина и хитозана указанным способом, далее они смешивались в нужной пропорции.

Сушка плёнок производилась сразу после полива при различных температурах: при комнатной температуре (25°C), при температуре 8°C в холодильнике, или при температуре 50°C в сушильном шкафу.

Для изучения структуры пленок использовался метод рентгеноструктурного анализа. В исследовании использовался минидифрактометр МД-10 (длина волны  $\lambda_{Cu} = 1,54 \text{ \AA}$ ).

### Результаты и обсуждение

Были получены дифрактограммы плёнок желатина, хитозана, их смеси и проведён их анализ.

На рисунке 1 представлены нормированные дифрактограммы плёнок желатина при различных условиях высушивания.

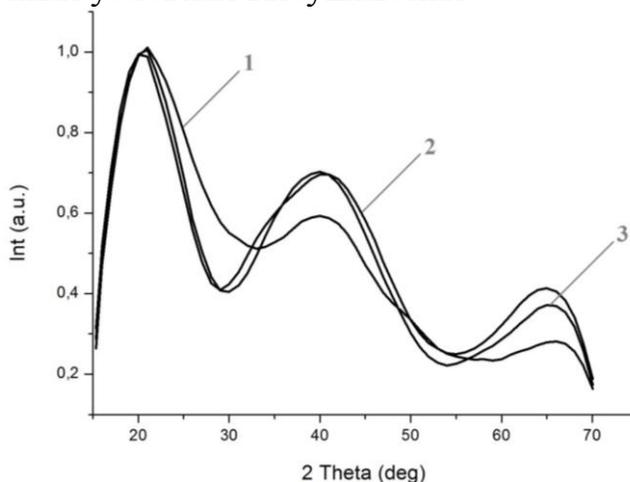


Рисунок 1 – Нормированные дифрактограммы плёнок желатина

- 1 – сушка при температуре 50°C;
- 2 – сушка при температуре 25°C;
- 3 – сушка при температуре 8°C

Как видно из дифрактограмм, наибольшей степенью кристалличности обладают плёнки желатина, сушка которых производилась при температуре 25°C и 8°C. Рассчитанные степени кристалличности для данных плёнок

следующие: плёнка желатина после сушки при температуре 8°C – 57%, при температуре 25°C – 56%, при температуре 50°C – 34%.

На рисунке 2 представлены нормированные дифрактограммы плёнок хитозана.

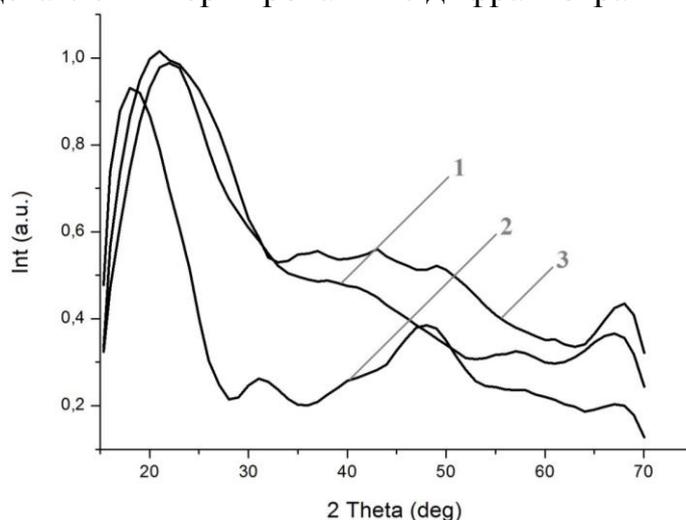


Рисунок 2 – Нормированные дифрактограммы плёнок хитозана

- 1 – сушка при температуре 50°C;
- 2 – сушка при температуре 25°C;
- 3 – сушка при температуре 8°C

Из рис. 2 видно, что наибольшей степенью кристалличности обладает плёнка хитозана, сушка которой производилась при температуре 25°C. Рассчитанные степени кристалличности для плёнок следующие: плёнка хитозана после сушки при температуре 8°C – 50%, при температуре 25°C – 55%, при температуре 50°C – 44%.

На рисунке 3 представлены нормированные дифрактограммы желатин-хитозановых плёнок, приготовленных при аналогичных условиях.

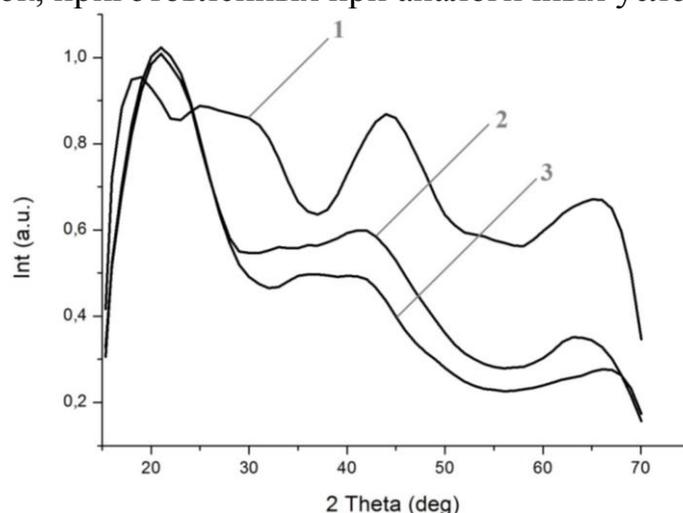


Рисунок 3 – Нормированные дифрактограммы желатин-хитозановых плёнок (отношение желатина к хитозану по массе 1:1)

- 1 – сушка при температуре 50°C;
- 2 – сушка при температуре 25°C;
- 3 – сушка при температуре 8°C

Рассчитанные степени кристалличности для данных плёнок следующие: желатин-хитозановая плёнка после сушки при температуре 8°C – 48%, при температуре 25°C – 38%, при температуре 50°C – 30%.

Как видно из приведённых выше дифрактограмм, структура плёнок желатина почти не меняется при понижении температуры сушки ниже комнатной (рисунок 1). Но при повышении температуры выше комнатной (50°C), происходит аморфизация полимера и кристаллические пики «размываются». В случае плёнки хитозана ситуация идентична плёнке желатина (рисунок 3).

Для желатин-хитозановой плёнки (рисунок 3) при повышении температуры выше комнатной первый пик (12°) размывается, но, при этом, второй и третий пики (23° и 33°) становятся более выраженными (при температурах сушки, ниже комнатной эти пики имеют меньшую интенсивность). Из этого можно сделать вывод об изменении пространственной конфигурации кристаллических составляющих в желатин-хитозановой плёнке при увеличении температуры сушки.

Выявленное изменение в структуре желатин-хитозановой плёнки может быть связано с изменением конформационного состояния в желатине, а именно, увеличением доли глобулярных конформаций желатина при температуре сушки выше 40°C [1].

Ниже приведена таблица степени кристалличности исследованных полимеров в различных условиях приготовления.

Таблица 1 – Степени кристалличности исследуемых полимеров в плёночном состоянии при различных условиях сушки

<b>Полимер / Температура сушки</b>	<b>8°C</b>	<b>25°C</b>	<b>50°C</b>
Желатин	57%	56%	34%
Хитозан	50%	55%	44%
Желатин/хитозан = 1/1	48%	38%	30%

### **Заключение**

Произведён анализ дифрактограмм полимерных плёнок (желатин, хитозан и желатин-хитозановая смесь). Было выявлено, что с повышением температуры сушки, плёнки, состоящие из желатина и хитозана аморфизуются. В желатин-хитозановой плёнке с повышением температуры сушки меняется конфигурация кристаллической фазы. Данное изменение конфигурации может быть связано с переходом желатина в другое конформационное состояние (из фибриллярного в глобулярное). Также было выявлено, что желатин и хитозан обладают большей степенью кристалличности, чем желатин-хитозановая смесь в плёночном состоянии.

### Список литературы

1. Бокерия, Л.А. Плёночные композиции на основе желатина, структурированные различными способами / Л.А.Бокерия и др. // Бюллетень НЦССХ им. А.Н. Бакулева РАМН, том 15, № 4, 2014, с.60-72
2. Лантух, Ю.Д. Фотофизика оптических функциональных материалов на основе комплексов биополимеров с органическими красителями / Ю.Д. Лантух, С.Н. Пашкевич, С.Н. Летута, Э.К. Алиджанов – Оренбург, Вестник ОГУ, 2015. №13. С. 162–167.
3. Джеймс, Т.Х. Теория фотографического процесса / Т.Х. Джеймс; пер. с англ. А. Л. Картужанский. – Москва: Химия, 1980. – 672 с.
4. Измайлова, В.Н. Процесс структурообразования в слоях бихромированной желатины для регистрации голограмм / В.Н. Измайлова, Г.А. Соболев, С.Б. Соболева, Г.П. Ямпольская, З.Д. Туловская // Материалы и устройства для регистрации голограмм. Л.: ФТИ, 1986. – с. 47-67.
5. Малов, А.Н. Голографические регистрирующие среды на основе дихромированного желатина: супрамолекулярный дизайн и динамика записи /А.Н. Малов, А.В. Неупокоева. – Иркутск: ИВВАИУ(ВИ), 2006. – 345 с.
6. Воронько, Н.Г. Взаимодействие желатины с хитозаном: влияние концентрации полисахарида / Н.Г. Воронько, С.Р. Деркач, Н.И. Соколан – Вестник МГТУ, том 18, № 1, 2015 г. стр. 80-89
7. Сутягин, В.М. Химия и физика полимеров / В.М. Сутягин, Л.И. Бондалетова. – Томск: ТПУ, 2003 – 208 с.
8. Трилор, Л. Введение в науку о полимерах / Л. Трилор; Пер. с англ.: Н.А. Платэ. – Москва: Мир, 1973 – 238 с.
9. Рабек, Я. Экспериментальные методы в химии полимеров / Я. Рабек; пер. с англ. Я.С. Выгодский. – Москва: Мир, 1983. – 384 с.
10. Тагер, А.А. Физико-химия полимеров / А.А. Тагер. – Москва: Химия, 1968 – 536 с.

**ТЕХНОЛОГИЯ СКВОЗНОГО ИЗЛОЖЕНИЯ КУРСА РЕШЕНИЯ  
ЗАДАЧ ПО ДИНАМИКЕ ДЛЯ УЧИТЕЛЕЙ ФИЗИКИ  
«УСЛОВНЫХ СПЕЦИАЛИСТОВ», ЧИТАЕМОГО В ОРЕНБУРГСКОМ  
ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

**Узенбаев Ф.Г.**

**Оренбургский государственный университет, г. Оренбург**

Раздел «Динамика» курса физики является базовым для понимания физических методов анализа законов природы, овладения необходимыми компетенциями при решении учебных, исследовательских и множества разнообразных технических задач. Вместе с этим раздел «Динамика» весьма объёмный и разносторонний по своему содержанию, пронизывающий и связанный с большинством разделов курса физики. В условиях ограниченного времени курсов было бы невозможным раскрытие внутренних связей между разделами курса физики, а также внутренних связей в самом разделе «Динамики» методом последовательного изложения методов решения задач динамики. В указанных обстоятельствах рациональным, на наш взгляд, является применённый нами метод «сквозного» изложения методов решения учебных задач по динамике и смежных с ней разделов физики. Суть метода заключается в подборе ограниченного количества задач, которые позволяют реализовать метод «от простого к сложному» в одной теме и включают понятия, пронизывающие несколько, на первый взгляд, разных тем рассматриваемого раздела. Например, понятия «связанных тел» включает много разнообразных задач с нитями, блоками и ассоциируется у учащихся с буквальным понятием связанных, т.е. «привязанных» друг к другу тел. Однако, хорошо известно, что понятие «связанные тела» в физике значительно шире, чем быденное представление. Например, груз в автомобиле часто перевозится будучи «связанным» силой трения покоя и без всякой привязи с помощью верёвки. Луна связана с Землёй гравитационным полем и движется вместе с ней вокруг Солнца.

Известно также, что сложной для понимания учащихся является сила трения покоя, которая обеспечивает движение транспорта, наше передвижение, однако трение ассоциируется только с сопротивлением движению. Раскрывая богатый класс задач на применение понятия силы трения, мы предлагаем использовать наряду с «простыми» задачами на «связанное» движение, благодаря силе трения покоя, задачи, позволяющие выработать компетенции решения задач на условие «отрыва» тел друг от друга, используя определения сил трения покоя  $F_{\text{тр.п.}} \leq \mu N$ . Указанная компетенция является одной из ключевых в научном познании, т.к. поиск и нахождения граничных условий перехода между различными состояниями физических систем, а в широком научном смысле, между различными состояниями систем различной природы (химической, общественной и др.) является ключевой задачей науки.

Решение задачи на движение двух брусков, связанных невесомой нерастяжимой нитью по поверхностям различной природы можно дополнить задачами на нахождение натяжения в разных точках верёвки, обладающей массой. Тем самым, отрабатываем умение переходить от абстрактных, идеализированных понятий к реальным условиям на основе решения задач на динамику связанных тел.

Задачи на совместное движение двух тел, например, доска, находящаяся на гладкой поверхности и брусок, пущенный по доске с начальной скоростью, позволяют, в контексте «сквозной» технологии сочетать динамические задачи с кинематикой относительного движения тел в инерциальных системах отсчёта, а так же сравнить с методом решения этой задачи с использованием закона сохранения полного импульса системы тел.

Дальнейшее развитие темы внутрипредметных связей в курсе Механики и физики в целом с использованием понятия силы трения, в широком смысле, проводим с использованием задачи на условие движения автомобиля, например, в гору, а также задачи на условие равновесия картины на вертикальной стене.

Предложенная нами и реализованная технология «сквозного» изложения темы решения задачи по динамике с целью раскрытия основных методик решения с опорой на понятие и свойства силы трения, по отзывам слушателей курсов, оказался для них весьма интересным и с точки зрения педагогической и с точки зрения познавательной технологии. Совокупность предложенных задач, технология «сквозного» изложения темы «Сила трения» является «методичкой» для учителей при обобщении раздела «Динамика» в школьном курсе физики, способом раскрытия внутрипредметных связей и формированию у учащихся научных и познавательных компетенций.

#### Список литературы

1. Каменецкий, С. Е. Теория и методика обучения физике в школе: Общие вопросы: Учеб. пособие для студ. высш. пед. учеб. заведений / С. Е. Каменецкий, Н. С. Пурешева, Н. Е. Важеевская и др.; Под ред. С. Е. Каменецкого и Н. С. Пурешевой. – М.: Издательский центр «Академия», 2000. – 368 с. ISBN 5-7695-0327-0.

2. Каменецкий, С. Е. Теория и методика обучения физике в школе: Частные вопросы: Учеб. пособие для студ. пед. вузов / С. Е. Каменецкий, Н. С. Пурешева, Т. И. Носова и др.; Под ред. С. Е. Каменецкого – М.: Издательский центр «Академия», 2000. – 384 с. ISBN 5-7695-0579-6.

3. Ханнанов, Н. К. Настольная книга учителя физики. 7-11 классы / Н. К. Ханнанов. – М.: Эксмо, 2008. – 656 с. ISBN 978-5-699-23330-4.

4. Грачёв, А. В. Физика: 10 класс: базовый уровень, профильный уровень: учебник для учащихся общеобразовательных учреждений / А. В. Грачёв, В. А. Погожев, А. М. Салецкий и др. – М.: Вектана-Граф, 2011. – 432 с.: ил. ISBN 978-0-00-807334-0.

5. 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 978-5-346-01629-8.

6. Сикорская, Г. А. *Профильная школа. Элективные курсы: учебно-методическое пособие в трёх частях. Часть III. Физика* / Г. А. Сикорская, Ф. Г. Узенбаев. – Оренбург: ИПК ГОУ ОГУ, РАО ЮУ НОЦ, 2008. – 249 с. ISBN 978-5-7410-0870-6.

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДИЧЕСКИХ УКАЗАНИЙ В ОРГАНИЗАЦИИ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО ФИЗИКЕ В УСЛОВИЯХ СОВРЕМЕННОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Цветкова Е.В., Белокопытова О.Г.  
Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Лабораторный практикум составляет важную и обязательную часть теоретического и практического обучения студентов профессиональных образовательных организаций высшего образования. Эффективная организация практикума в преподавании учебных дисциплин способствует формированию требуемых ФГОС результатов обучения – профессиональных и общих компетенций, основанных на практическом опыте, умениях, знаниях.

Лабораторный практикум – как вид учебного занятия должен проводиться в специально оборудованных учебных лабораториях. Необходимым структурным элементом лабораторного практикума, является инструктаж, проводимый преподавателем в начале семестра.

Лабораторный практикум проводится в составе академической группы с разделением на подгруппы. Лабораторный практикум – существенный элемент учебного процесса в университете, в ходе которого студенты сталкиваются с самостоятельной практической деятельностью в конкретной области. Лабораторный практикум является средним звеном между углубленной теоретической работой обучающихся на лекциях, практических занятий и применением знаний в будущем освоении профессии. Эти занятия удачно сочетают элементы теоретического обучения и практической работы. Выполняя лабораторные работы, студенты лучше усваивают программный материал, так как многие определения и формулы необходимо применять практически, происходит взаимодействие теории с практикой, что в целом способствует уяснению сложных вопросов науки и становлению студентов как будущих специалистов. Само значение слов «лаборатория», «лабораторный» (от латинского «labor» – труд, работа, трудность, «laboro» – трудиться, стараться, хлопотать, преодолевать затруднения) указывает на понятия, связанные с применением умственных и физических усилий для разрешения научных и практических задач. Не случайно слово «практикум», применяемое для обозначения определенной системы практических (преимущественно лабораторных) учебных работ, выражает ту же основную мысль: греческое «*praktikos*» означает «деятельный», что предполагает такие виды учебных занятий, которые требуют от студента усиленной умственной деятельности.

Установление межпредметных связей в области лабораторного практикума ведется следующим образом: производится соответствие понятий, определений и обозначений физических величин для того, чтобы они составляли единую систему во всех дисциплинах; согласование порядка ввода этих понятий, чтобы базовые дисциплины и основной курс лекций по изучаемому предмету одновременно готовили студента к восприятию

материала, рассматриваемого в данной лабораторной работе. Т.е., само построение лабораторного практикума должно способствовать установлению логических связей профилирующего курса с другими дисциплинами с тем, чтобы студенты усвоили его как целостную систему со всей структурой, отражающей данную науку. При разработке методических указаний к лабораторному практикуму важно учесть то, что выпускники университета, хорошо усвоившие теоретический материал, не всегда могут применять его в своей будущей профессиональной деятельности. Следовательно, основное требование к лабораторному практикуму в университете – выбор такого содержания учебного материала и формы организации занятия, которые способствуют развитию активной учебной и познавательной деятельности студентов, творчеству и самостоятельности в решении научных и практических задач. Успех лабораторных занятий зависит от теоретической, практической и методической подготовленности преподавателя, его организаторской работы по подготовке занятия, от состояния лабораторной базы и методического обеспечения, а также от степени подготовленности самих студентов, их активности на занятии [1].

Методические указания в организации лабораторного практикума по физике являются неотъемлемой частью обучения студентов в процессе выполнения экспериментальных лабораторных работ. Основная цель использования методических указаний – организовать обучающегося при проведении лабораторной работы, нацелить его на проведение эксперимента, указать порядок действий при выполнении эксперимента, задать способ оформления результатов измерений и расчетов величин, расчёт погрешностей. Все лабораторные работы имеют разделы: цель лабораторной работы, приборы и материалы, краткая теория, порядок выполнения работы и контрольные вопросы. Цель лабораторной работы определяет конечный результат, который должен получить студент.

Все лабораторные работы по своим целям разбиты на три группы:

- лабораторные работы *исследовательского* характера направлены на изучение свойств явлений, установление закономерностей между физическими величинами;

- лабораторные работы *по проверке законов* проводятся с целью закрепления знаний или обобщения материала, задача такого занятия - это выполнение экспериментальной проверки законов физики;

- лабораторные работы *по измерению или определению физических величин* предназначены для приобретения навыков работы с измерительными приборами, овладения методов кодировки научной информации, знания методов оценки погрешности измерений и расчетов. Лабораторные работы такого типа являются контрольными экспериментальными работами.

Указание приборов и материалов в лабораторной работе позволяет студенту оценить степень точности выполняемой работы и определить метод выполнения эксперимента.

Сведения из теории имеют минимум информации по теме, в которой сосредоточен весь необходимый базовый материал, что позволяет напомнить студенту основные понятия и зависимости между величинами.

Раздел «Выполнение работы» позволяет студенту разложить цель на задачи, которые необходимо выполнить, чтобы достичь цели, в данном разделе сосредоточены основные математические уравнения законов, физических величин, выводы из данных уравнений искомых величин. В данном разделе рекомендованы способы оформления результатов и расчета погрешностей. Контрольные вопросы вводятся для проверки осознанного выполнения работы и имеют прикладной характер.

В результате выполнения цикла лабораторных работ по физике студент должен реализовать следующие цели и задачи освоения дисциплины «Физика»:

– **Цели** освоения дисциплины:

Развитие представлений у студентов о фундаментальных физических законах и их проявлениях в природе. Показать возможности применения основных физических законов при решении научно-технических задач. Проиллюстрировать единство естественнонаучных дисциплин и соотношение между эмпирическими и теоретическими знаниями.

– **Задачи:**

Развить у студентов умение использовать основные законы физики при решении научно-практических задач. Развить навыки необходимые для освоения специальных технических дисциплин, предусмотренных ФГОС на специальность. Сформировать основу знаний, необходимых для гармонического развития личности у студентов и приобретения ими научно-технического кругозора и интеллекта.

При выполнении лабораторного практикума студент должен:

- **знать:** основы разделов физики;
- **владеть умениями** проводить наблюдения, планировать и выполнять эксперименты, выдвигать гипотезы и строить модели, применять полученные знания по физике для объяснения разнообразных физических явлений и свойств веществ; практического использования физических знаний; оценивать достоверность естественнонаучной информации; исследовательской и проектной деятельности, методами лабораторного исследования зависимостей физических величин.

Лабораторный практикум способствует:

– развитию познавательных интересов, интеллектуальных и творческих способностей в процессе приобретения знаний и умений по физике с использованием различных источников информации и современных информационных технологий;

– воспитанию убежденности в возможности познания законов природы; использования достижений физики на благо развития человеческой цивилизации; необходимости сотрудничества в процессе совместного выполнения задач, уважительного отношения к мнению оппонента при обсуждении проблем естественнонаучного содержания; готовности к морально-

этической оценке использования научных достижений, чувства ответственности за защиту окружающей среды; использование приобретенных знаний и умений для решения практических задач повседневной жизни, обеспечения безопасности собственной жизни, рационального природопользования и охраны окружающей среды [2].

Выполнение лабораторных работ и оформление результатов фиксируется в лабораторных тетрадях, оценка деятельности студента при выполнении лабораторной работы проводится по представленным отчетам в тетрадях.

Отчеты в тетрадях обучающихся должны иметь следующую структуру:

- Лабораторная работа №...
- Тема лабораторной работы....
- Цель лабораторной работы:.....
- Приборы и материалы:.....
- Ход работы:

а) порядок выполнения работы, разложенный на последовательные, логически завершенные задачи;

б) результаты эксперимента (оформленные в виде таблицы);

в) расчет погрешностей;

г) графическая зависимость экспериментально определенных величин;

д) выводы по выполненной работе (в расчетных работах результаты записываются в виде доверительного интервала, в котором лежит данная величина).

- Ответы на контрольные вопросы.

Формы организации студентов на лабораторных работах: фронтальная, групповая и индивидуальная.

- При **фронтальной форме** организации занятий все студенты выполняют одновременно одну и ту же работу.
- При **групповой форме** организации занятий одна и та же работа выполняется бригадами по 2 - 3 человека.
- При **индивидуальной форме** организации занятий каждый студент выполняет индивидуальное задание.

Оценки за выполнение лабораторной работы могут выставляться по балльной системе или в форме зачета и учитываться как показатели текущей успеваемости студентов.

Образование становится фундаментальным, если оно ориентировано на выявление глубинных сущностных оснований и связей между разнообразными процессами окружающего мира. Фундаментальные знания об этих основаниях и связях содержатся в общих естественнонаучных и гуманитарных дисциплинах, обобщенно отражающих логику и структуру соответствующих наук с позиции сегодняшнего дня. Образование становится целостным, когда эти общие дисциплины оказываются не просто совокупностью традиционных курсов, а образуют единые циклы фундаментальных дисциплин, объединенных общей целевой функцией, объектом исследования, методологией построения каждой из дисциплин и ориентированных на междисциплинарные связи [3].

Мы пришли к выводу, что физика оказывает влияние на другие естественные науки не только своим содержанием, но и своими методами, принципами подхода к решению проблем, поэтому она в большей мере определяет стиль научного мышления. Но по некоторым направлениям физика как целостная дисциплина оказалась на стадии разрушения – несмотря на то, что роль физики в образовании сегодня должна возрасти: растет насыщенность производства физическими методами контроля; расширяются масштабы использования в технике и технологии новых физических явлений и эффектов; увеличение наукоемкости приближает инженерные теории к физическим [4].

Таким образом, мы считаем, что правильно построенный лабораторный практикум является одним из важных элементов междисциплинарного взаимодействия. А это играет не мало важную роль в развитии у будущих бакалавров и студентов общих и профессиональных компетенций.

#### *Список литературы*

1. *Борытко, Н.М. Система профессионального воспитания в вузе: учеб.-метод. пособие / Н. М. Борытко ; под ред. Н. К. Сергеева. – М. : АПКиППРО, 2005. – 120 с.*

2. *Наумова, О.Г. Развитие естественнонаучного мировоззрения студентов в университетском образовании : авт. дисс. ...канд. пед. наук : 13.00.01 / О.Г.Наумова. – Оренбург, 2008.*

3. *Суханов, А.Д. Целостность естественнонаучного образования // Высшее образование в России. – 1994. - № 4. – С. 49-53.*

4. *Белокопытова, О.Г. Влияние межпредметных связей и исследовательской деятельности в процессе изучения физики на развитие личности студента / Белокопытова О.Г., Цветкова Е.В. - Материалы Всерос. науч.-метод. конф. «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры» [Электронный ресурс] – Оренбург : ОГУ, 2016. – ISBN 978-5-7410-1385-4.*

# БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЙ ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ МЕЖДУ МОНОСЛОЯМИ J-АГРЕГАТОВ ПОСРЕДСТВОМ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОНОВ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ

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

Перенос энергии между J-агрегатами (JA) активно исследуется в последнее время как экспериментально, так и теоретически представителями разных естественнонаучных отраслей. Замечательные свойства органических молекул, объединенных в J-агрегаты, а именно, узкие спектральные линии поглощения и флуоресценции, малое время жизни по отношению к излучению, делают перспективным использование JA при конструировании различных оптических устройств. Изучение модельных систем, содержащих смесь J-агрегатов двух сортов, важно для понимания процессов переноса энергии, наблюдающихся в биологических светособирающих комплексах, а также для создания систем искусственного фотосинтеза.

Основная сложность наблюдения переноса энергии между JA связана с узостью их спектров поглощения и флуоресценции и, как следствие, с малым их перекрытием. Тем не менее, в последние два десятилетия появились экспериментальные работы, в которых данный перенос удавалось обнаружить. Так, в работах [1,2] сообщается о переносе энергии между JA, образованными молекулами разных цианиновых красителей, в полимерной пленке. Авторы работы [3] наблюдали перенос энергии между двумя полимерными пленками с JA, разделенными кварцевой пластинкой.

В теоретическом описании переноса энергии от экситонов JA, являющегося донором, к JA – акцептору существует два основных подхода. В первом из них скорость переноса энергии находится в результате суммирования скоростей переноса между отдельными молекулами разных JA с учетом делокализации молекулярного возбуждения в JA [4,5], а во втором подходе считается, что перенос энергии осуществляется виртуальными фотонами [6].

Известно, что вблизи проводящих поверхностей скорость межмолекулярного безызлучательного переноса энергии изменяется, поскольку появляется дополнительный – плазмонный – канал передачи энергии [7]. В случае, когда молекулы донора и акцептора расположены с разных сторон протяженной проводящей пленки, этот канал становится доминирующим [8].

В данной работе, теоретически рассмотрен безызлучательный перенос энергии экситонного возбуждения

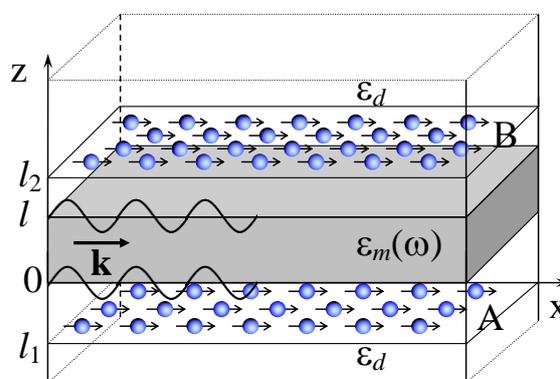


Рисунок 1 – Взаимное расположение металлической пленки и монослоев J-агрегатов

между монослоями J-агрегатов А и В посредством поверхностных плазмонов металлической пленки. Геометрия задачи представлена на рисунке 1. Исследование проведено в рамках подхода, который использовался при расчете скорости межмолекулярного переноса энергии вблизи проводящей пленки [8].

Скорость безызлучательного переноса энергии экситона от одного монослоя к другому может быть найдена в рамках квантовомеханической теории возмущений

$$dU(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |M(\mathbf{q})|^2 \delta(E_1 - E_2), \quad (1)$$

где  $E_{1(2)} = E_{ex}^{A(B)}(\mathbf{q}) - E_0^{A(B)}$  – энергия перехода J-агрегата А(В) из экситонного в основное состояние;  $\mathbf{q}$  – волновой вектор экситона;  $M(\mathbf{q})$  – составной матричный элемент, определяемый выражением

$$M(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, j} \left[ \frac{\langle 2 | V_{pl-exB}^{(j)} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | V_{pl-exA}^{(j)} | 1 \rangle}{E_1 - \hbar\omega_k^{(j)} + i\hbar/\tau} \right]. \quad (2)$$

Здесь введены следующие обозначения: начальное состояние системы  $|1\rangle = |1_{ex}^A, 0_{ex}^B, 0_{pl}\rangle$  – экситонное состояние монослоя А, конечное состояние системы  $|2\rangle = |0_{ex}^A, 1_{ex}^B, 0_{pl}\rangle$  – экситонное состояние монослоя В,  $|\mathbf{k}\rangle = |0_{ex}^A, 0_{ex}^B, 1_{pl}\rangle$  – промежуточное плазмонное состояние, характеризуемое волновым вектором  $\mathbf{k}$ ,  $\tau$  – время жизни поверхностного плазмона. Суммирование по  $j$  учитывает возможность возбуждения в тонкой пленке двух типов поверхностных плазмонов: антисимметричных (высокочастотных  $\omega_k^{(1)}$ ) и симметричных (низкочастотных  $\omega_k^{(2)}$ ).

Чтобы получить полную скорость переноса энергии, нужно усреднить выражение (1) по начальным и просуммировать по конечным колебательным состояниям молекул в J-агрегатах. В результате выражение (1) преобразуется к виду

$$U(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \int \left| \sum_{\mathbf{k}, j} \left[ \frac{\langle 2 | V_{pl-exB}^{(j)} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | V_{pl-exA}^{(j)} | 1 \rangle}{\hbar\omega - \hbar\omega_k^{(j)} + i\hbar/\tau} \right] \right|^2 G_A(\omega) G_B(\omega) d\omega, \quad (3)$$

где  $G_{A(B)}(\omega)$  – распределение по частотам в спектре флуоресценции J-агрегата А (в спектре поглощения J-агрегата В).

Для вычисления матричных элементов оператора плазмон-экситонного взаимодействия  $V_{pl-ex}^{(j)} = -\sum_{\mathbf{n}} \mathbf{d}(\mathbf{n}) \cdot \mathbf{E}^{(j)}(\mathbf{n})$ , входящих в (2), воспользуемся

формализмом вторичного квантования. В этом подходе оператор дипольного момента перехода  $\mathbf{J}_A$  в экситонное состояние имеет вид

$$\mathbf{d}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \left( \mathbf{d}_{01} e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} B_{\mathbf{q}} + \mathbf{d}_{10} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{n}} B_{\mathbf{q}}^+ \right), \quad (4)$$

где  $\mathbf{d}_{10}$  – дипольный момент перехода в молекуле между основным и первым возбужденным состояниями,  $\mathbf{n}$  – вектор, задающий положение молекулы в JA,  $N$  – число молекул в JA,  $B_{\mathbf{q}}$  и  $B_{\mathbf{q}}^+$  – операторы уничтожения и рождения экситона.

Напряженность электрического поля поверхностного плазмона моды  $j$  находится таким же образом, как в работе [9]. В диэлектрической среде при  $z < 0$  напряженность экспоненциально убывает по мере удаления от металлической пленки

$$\mathbf{E}_d^{(j)}(\mathbf{r}, z, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k^{(j)}}{S L^{(j)}(k)}} \left( 1 \mp e^{-k_{mz}^{(j)} l} \right) e^{k_{dz}^{(j)} z} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k}} - i \frac{k}{k_{dz}^{(j)}} \mathbf{e}_z \right) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_k^{(j)} t)} a_{\mathbf{k}} + \text{э.с.} \quad (5)$$

В области металла  $0 \leq z \leq l$  напряженность имеет вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_m^{(j)}(\mathbf{r}, z, t) = & \quad (6) \\ = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k^{(j)}}{S L^{(j)}(k)}} & \left[ \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k}} + i \frac{k}{k_{mz}^{(j)}} \mathbf{e}_z \right) e^{-k_{mz}^{(j)} z} \mp \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k}} - i \frac{k}{k_{mz}^{(j)}} \mathbf{e}_z \right) e^{k_{mz}^{(j)}(z-l)} \right] e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_k^{(j)} t)} a_{\mathbf{k}} + \text{э.с.} \end{aligned}$$

При  $z > l$  также имеет место экспоненциальное убывание напряженности поля

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_d^{(j)}(\mathbf{r}, z, t) = & \quad (7) \\ = \mp \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k^{(j)}}{S L^{(j)}(k)}} & \left( 1 \mp e^{-k_{mz}^{(j)} l} \right) e^{-k_{dz}^{(j)}(z-l)} \left( \mathbf{e}_{\mathbf{k}} + i \frac{k}{k_{dz}^{(j)}} \mathbf{e}_z \right) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega_k^{(j)} t)} a_{\mathbf{k}} + \text{э.с.}, \end{aligned}$$

где знак «-» относится к антисимметричному, «+» – к симметричному плазмону. В формулах (5)-(7) через  $S$  обозначена площадь поверхности пленки,  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}}$  и  $\mathbf{e}_z$  – единичные векторы вдоль волнового вектора плазмона и в перпендикулярном поверхности направлении,  $a_{\mathbf{k}}$  – оператор уничтожения плазмона. Частота поверхностного плазмона  $\omega_k^{(j)}$  является решением дисперсионного уравнения

$$e^{k_{mz} l} = \mp \frac{\varepsilon_m(\omega) k_{dz} - \varepsilon_d k_{mz}}{\varepsilon_m(\omega) k_{dz} + \varepsilon_d k_{mz}}, \quad (8)$$

где  $k_{dz} = \sqrt{k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_d}$ ,  $k_{mz} = \sqrt{k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_m(\omega)}$ ,  $\varepsilon_m(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_{pl}^2}{\omega^2}$ ,  $\varepsilon_d$  – не

зависящая от частоты диэлектрическая проницаемость среды, окружающей металлическую пленку,  $\varepsilon_\infty$  – высокочастотная диэлектрическая проницаемость металла,  $\omega_{pl}$  – плазменная частота металла,  $c$  – скорость света в вакууме.

Величина  $L^{(j)}(k)$  имеет размерность длины, возникает при приведении гамильтониана электромагнитного поля поверхностного плазмона к вторично квантованному виду и характеризует размер области локализации поверхностного плазмона в направлении нормали к поверхности металлической пленки

$$L^{(j)}(k) = \frac{1}{2k_{dz}^{(j)}} \left(1 - e^{-k_{mz}^{(j)} l}\right)^2 \left[ \varepsilon_d \left(1 + \frac{k^2}{k_{dz}^{(j)2}}\right) + \frac{\omega_k^{(j)2}}{c^2} \frac{\varepsilon_d^2}{k_{dz}^{(j)2}} \right] +$$

$$+ \frac{1}{2k_{mz}^{(j)}} \left(1 - e^{-2k_{mz}^{(j)} l}\right) \left[ \left( \varepsilon_\infty + \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_k^{(j)2}} \right) \left(1 + \frac{k^2}{k_{mz}^{(j)2}}\right) + \frac{\omega_k^{(j)2}}{c^2} \frac{\varepsilon_m^2}{k_{mz}^{(j)2}} \right] \mp$$

$$\mp l e^{-k_{mz}^{(j)} l} \left[ \left( \varepsilon_\infty + \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_k^{(j)2}} \right) \left(1 - \frac{k^2}{k_{mz}^{(j)2}}\right) - \frac{\omega_k^{(j)2}}{c^2} \frac{\varepsilon_m^2}{k_{mz}^{(j)2}} \right].$$

В квазистатическом приближении  $c \rightarrow \infty$ ,  $k_{mz}, k_{dz} \rightarrow k$ , частоты антисимметричного и симметричного плазмонов могут быть найдены из (8) в явном виде

$$\omega_k^{(1)2} = \frac{\omega_p^2 (1 + e^{kl})}{\varepsilon_\infty (1 + e^{kl}) - \varepsilon_d (1 - e^{kl})}, \quad \omega_k^{(2)2} = \frac{\omega_p^2 (1 - e^{kl})}{\varepsilon_\infty (1 - e^{kl}) - \varepsilon_d (1 + e^{kl})}. \quad (9)$$

Для симметричных плазмонов дисперсионные кривые (8) и (9) имеют небольшие количественные расхождения. Поведение дисперсионных кривых для антисимметричных плазмонов с учетом запаздывания (8) и в квазистатическом приближении (9) имеют качественные отличия в области малых волновых чисел. Также в квазистатическом приближении коэффициент  $L^{(j)}(k)$  упрощается

$$L^{(j)}(k) = \frac{2}{k} \frac{\omega_{pl}^2}{\omega_k^{(j)2}} (1 - e^{-2kl}).$$

В итоге формулы (5)–(7) для напряженностей электрического поля плазмона переходят в выражения, использованные в работе [8].

Вычисление матричных элементов оператора плазмон-экситонного взаимодействия приводит к результату

$$\langle \mathbf{k} | V_{pl-ex}^{(j)} | 1 \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k^{(j)}}{s_A L^{(j)}(k)}} (\mathbf{d}_{10}^A \cdot \mathbf{e}_k) \left( 1 \mp e^{-k_m^{(j)}l} \right) e^{-k_{dz}^{(j)}l_1} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}, \quad (10)$$

$$\langle 2 | V_{pl-ex}^{(j)} | \mathbf{k} \rangle = \mp \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k^{(j)}}{s_B L^{(j)}(k)}} (\mathbf{d}_{01}^B \cdot \mathbf{e}_k) \left( 1 \mp e^{-k_m^{(j)}l} \right) e^{-k_{dz}^{(j)}(l_2-l)} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}, \quad (11)$$

где  $s_{A(B)}$  – площадь элементарной ячейки монослоя А(В). Символ Кронекера, возникающий в результате суммирования по узлам двумерной решетки JA

$$\sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{n}} = N \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}},$$

выражает равенство импульсов экситона и промежуточного поверхностного плазмона.

После подстановки формул (10), (11) в составной матричный элемент (2) получаем

$$M(\mathbf{q}) = \frac{2\pi}{\sqrt{s_A s_B}} d_{01}^A d_{10}^B \cos\alpha \cos\beta \sum_j (\mp) \frac{\omega_q^{(j)}}{L^{(j)}(q)} \frac{\left( 1 \mp e^{-k_m^{(j)}l} \right)^2 e^{-k_{dz}^{(j)}(l_1+l_2-l)}}{\omega - \omega_q^{(j)} + i/\tau}, \quad (12)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  – углы между волновым вектором экситона и дипольными моментами перехода в молекулах J-агрегатов А и В.

При проведении расчетов скорости переноса энергии (3) в качестве монослоя JA – донора энергии экситона был выбран псевдоизоцианин (PIC), монослоя-акцептора – краситель TDVC. Распределения по частотам в спектрах флуоресценции и поглощения указанных J-агрегатов выбирались в виде функции Лоренца со следующими параметрами. Положение максимума приходится на  $\hbar\omega_0^A = 2.13$  эВ в J-агрегате PIC и  $\hbar\omega_0^B = 2.115$  эВ в J-агрегате TDVC. Ширина контура на половине высоты составляет  $\Gamma_A = 0.033$  эВ и  $\Gamma_B = 0.045$  эВ [10,11]. Перенос энергии осуществлялся поверхностными плазмонами серебряной пленки толщиной  $l = 15$  нм. Расстояние от нижней поверхности пленки до монослоя А было равно  $l_1 = 15$  нм, до монослоя В –  $l_2 = 20$  нм. В расчетах диэлектрическая проницаемость среды, окружающей пленку, составляла  $\epsilon_d = 2$ , высокочастотная диэлектрическая проницаемость серебра -  $\epsilon_\infty = 3.7$ , плазменная частота серебра -  $\hbar\omega_{pl} = 9.1$  эВ, время жизни плазмона -  $\tau = 10$  фс.

На рисунке 2 представлены результаты расчетов квадрата модуля составного матричного элемента  $|M(\mathbf{q})|^2$  при различных значениях волнового вектора экситона. Из рисунка видно, что квадрат модуля имеет два максимума, соответствующие частотам симметричного и антисимметричного плазмона, которые с ростом волнового числа смещаются в область больших частот, причем расстояние между ними сокращается в соответствии с законом дисперсии поверхностных плазмонов. Кроме того, в  $|M(\mathbf{q})|^2$  большой вклад дают симметричные плазмоны. Также на рисунке изображены лоренцевы контуры линий флуоресценции PIC и поглощения TDBC, наибольшее перекрытие с которыми имеет квадрат модуля составного матричного элемента, вычисленный при  $q = 2.0 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ .

На рисунке 3 изображена зависимость скорости переноса энергии экситона (3) от волнового вектора при разных значениях толщины серебряной пленки. Эта зависимость немонотонная и максимум скорости переноса наблюдается при таком значении волнового числа, при котором обеспечивается наибольшее перекрытие квадрата модуля составного матричного элемента со спектрами флуоресценции PIC и поглощения TDBC. Кроме того, с ростом толщины проводящей пленки наблюдается смещение максимума скорости переноса в область меньших волновых чисел.

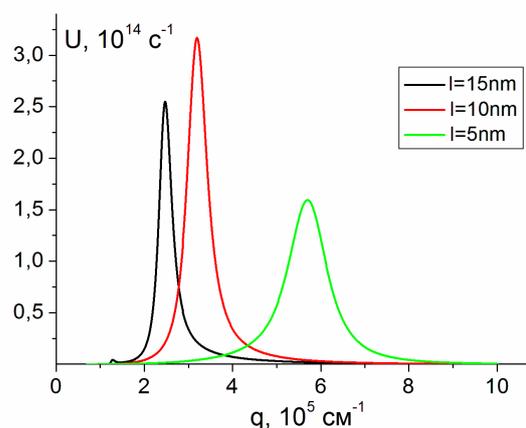
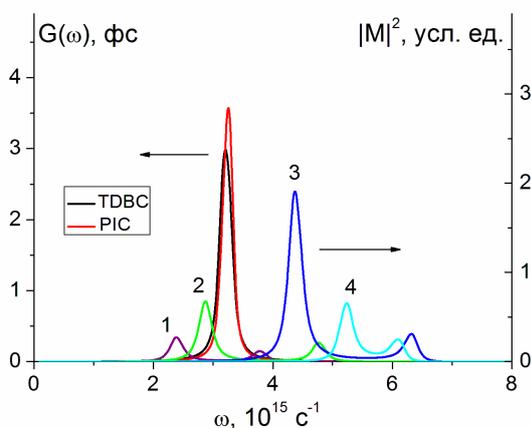


Рисунок 2 – Зависимость квадрата модуля составного матричного элемента от частоты при разных значениях волнового числа экситона  $q = 1.5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ (1),  $q = 2.0 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ (2),  $q = 5.0 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ (3),  $q = 1.0 \cdot 10^6 \text{ см}^{-1}$ (4)

Рисунок 3 – Зависимость скорости передачи энергии между монослоями от волнового числа экситона при разных значениях толщины металлической пленки

Таким образом, в данной работе теоретически исследована возможность безызлучательного переноса энергии экситона от одного монослоя J-агрегата к другому посредством поверхностных плазмонов серебряной пленки нанометровой толщины. Проведенные расчеты показали, что подбором молекул красителей, образующих JA, а также геометрических и электродинамических параметров рассмотренной слоистой системы, можно регулировать скорость безызлучательной энергопередачи.

### Список литературы

1. Sluch, M.I. *Energy transfer between J-aggregates of quinocyanine dyes in the sodium alginate films* / M.I. Sluch, A.G. Vitukhnovsky, Y. Yonezawa, T. Sato, T. Kunisawa // *Optical materials*. – 1996. – No.6. – P.261-266.
2. Petrenko, V.Yu. *Efficient energy transfer between J-aggregates of thiamonomethinecyanine dyes* / V.Yu Petrenko, O.P. Dmitriev, Yu.L. Slominskii, A.L. Smirnova // *Chem. Phys. Lett.* – 2015. – V.621. – P. 22-28.
3. Nakajima, H. *Excitation energy transfer between J-aggregates in layer-by-layer alternate assemblies* / H. Nakajima, N. Kometani, K. Asami, Y. Yonezawa // *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. – 2001. – V.143. – P.161-167.
4. Didraga, C. *Excitation Energy Transfer between Closely Spaced Multichromophoric Systems: Effects of Band Mixing and Intraband Relaxation* / C. Didraga, V.A. Malyshev, J. Knoester // *J. Phys. Chem. B*. – 2006. – V. 110. – P. 18818-18827.
5. Chuang, C. *Scaling Relations and Optimization of Excitonic Energy Transfer Rates between One-Dimensional Molecular Aggregates* / C. Chuang, J. Knoester, J. Cao // *J. Phys. Chem. B*. – 2014. – 118. P. 7827-7834.
6. Manolatu, C. *Radiative and Non-Radiative Exciton Energy Transfer in Monolayers of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides* / C. Manolatu, H. Wang, W. Chan, S. Tiwari, F. Rana // *arXiv:1601.05853v1 [cond-mat.mes-hall]*. – 2016.
7. Кучеренко, М.Г. *Процессы с участием электронно-возбужденных молекул на поверхностях твердых адсорбентов: монография* / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева. – Оренбург: ОГУ, -2010 – 344с. - ISBN 978-5-7410-1137-9.
8. Chmereva, T.M. *Intermolecular radiationless electronic excitation energy transfer near a conductive film* / T.M. Chmereva, M.G. Kucherenko // *Russian Physics Journal*. – 2015. - V. 57. - No. 10. – P. 1428-1435.
9. Чмерева, Т.М. *Плазмон-экситонное взаимодействие в слоистых наноструктурах с двумерными J-агрегатами* / Т.М. Чмерева, М.Г. Кучеренко // *Оптика и спектроскопия*. – 2016. – Т. 120. - № 6. – С. 941-947.
10. Lebedev, V.S. *Plasmon – exciton coupling effects in light absorption and scattering by metal/J-aggregate bilayer nanoparticles* / V.S. Lebedev, A.S. Medvedev // *Quantum Electronics*. – 2012. – V.42. – No.8. – P. 701-7013.
11. Lerario, G. *Room temperature Bloch surface wave polaritons* / G. Lerario, A. Cannavale, D. Ballarini et al. // *arXiv:1401.4555v1 [cond-mat.mes-hall]*. – 2014.

# ПСИХОЛОГИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СТУДЕНТОВ ГУМАНИТАРНЫХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ В КОНТЕКСТЕ ОБУЧЕНИЯ ФИЗИКИ

Якупов Г. С.

Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Обучение студентов гуманитарных специальностей естественнонаучных дисциплин, в частности физики, сопровождается вполне ожидаемыми трудностями. Наиболее значимой из них является негативное отношение обучающихся к изучению физики. Преподаватели, работающие со студентами-гуманитариями, встречаются с этим в первую очередь. Это, в основном, неприятие физики студентами таких специальностей, считающих, что данная дисциплина им абсолютно, не нужна в будущем, а также абсолютно не поддается познанию. Большая часть гуманитарной аудитории отрицательно относится к изучению естественнонаучных дисциплин, в том числе физики.

Такое отношение к изучению физики студентов гуманитарных специальностей основано в большей степени тем, что слабый уровень школьной подготовки является одной из причин неприятия физики. Как правило, студенты, обучающиеся на гуманитарных специальностях, выпускники профильных классов с гуманитарным профилем, в учебном плане которых на изучение физики не отводилось большое число часов и имела место сильная асимметрия между естественнонаучными и гуманитарными дисциплинами.

В то же время, можно отметить, что абсолютной неспособности к изучению естественнонаучных предметов на самом деле нет. Любой учащийся обладает всеми необходимыми способностями успешно (в той или иной степени) для овладения заданным программой курсом физики при организации правильного подхода к ее изучению.

Таким образом, существует необходимость в такой организации процесса обучения физики на гуманитарных специальностях. Данный подход позволил бы учесть особенности данной категории обучающихся.

Рассмотрим, какие характерные психологические черты личности присущи студентам-гуманитариям при изучении ими физики. У студентов гуманитарных специальностей хорошо развиты наглядно-образный и интуитивный виды мышления.

Для таких студентов свойственно тематическое богатство мышления, гуманитарии больше склонны к глубокому эмоциональному переживанию. Принадлежность человека к определенному типу мышления влияет на выбор специальности при поступлении в вуз.

Относить людей к типам "гуманитариев" или "логически мыслящих" позволяет выраженная асимметричность правого или левого полушарий

головного мозга. Установлено, что к чертам «гуманитарного» типа относятся следующие когнитивные особенности:

- способность к детализированному сохранению зрительных объектов;
- склонность использовать образные формы репрезентации, развитые чувственно-конкретные виды мышления.

Чертами личности таких учащихся являются:

- склонность следовать чувству;
- открытость миру и людям;
- яркие фантазии, воображение;
- потребность в новых впечатлениях.

Из особенностей мотивационной сферы можно выделить:

- преобладание социальных мотивов над познавательным;
- стремление к самопознанию;
- потребность в самосовершенствовании в сфере чувств и характера, в яркой, насыщенной событиями жизни;
- стремление к самореализации в личностном плане.

Восприятие красоты физики у студентов-гуманитариев идет через наблюдения проявлений физических закономерностей в окружающей действительности.

При построении обучения для учащихся специальностей гуманитарного профиля, необходимо усилить идейную сторону преподавания физики и ослабить рутинную техническую сторону. Кроме того, необходимо подчеркнуть, что сама физика имеет огромный гуманитарный потенциал и ее изучение необходимо для формирования правильной картины мира. Так, например, следует обратить внимание на то, что из разделов физики воспринимается гуманитариями лучше всего те, где присутствует большое количество наглядного материала. Здесь играет роль и лучшая организация курса, и большие его наглядность, логичность, доказательность, опора на историю науки и большее разнообразие задач.

В качестве способа организации обучения физике предпочтительно опираться на те особенности мышления студентов, которые являются более сильной стороной. Важно начинать с некоторого образа, с конкретных примеров, тем самым опираясь на мыслительные способности, характерные для гуманитарного типа (склонность использовать образные формы воспроизведения, развитые чувственно-конкретные виды мышления). Далее следует направить учащихся на формирование обобщений (в этом они слабее), что необходимо для изучения физики.

При недостаточной подготовленности к восприятию физики выпускников профильных гуманитарных классов, где такие предметы, как физика, играют второстепенную роль, возможен такой подход к обучению, при котором происходит превращение изучаемого материала в личностно значимую информацию для каждого студента, в котором делается акцент на понимание концептуальных моментов при слабой опоре на школьные знания. Поэтому

содержание образов и конкретных примеров, с которых следует начинать изучение физики, должно быть лично значимым.

Затрагивая вопрос о личной значимости воспринимаемой учебной информации, можно вплотную подойти к проблеме мотивации учения. Мотивацию учения определяет сочетание внешних мотивов одновременно с внутренними мотивами. Особенностью мотивационной сферы гуманитарного типа является преобладание социальных мотивов, которые в свою очередь относятся к группе внешних мотивов, над познавательными. Создавая направленность обучения физики на специальность, можно добиться привлечения интереса студентов к изучению физики, не являющейся основной дисциплиной. В этом случае студенты-гуманитарии ожидают воспринимать изучаемый материал как ценность для будущей профессиональной деятельности, и убеждаться в практической значимости изучаемой дисциплины для решения задач осваиваемой специальности. Оправдание их ожиданий может способствовать осознанному с их стороны изучению физики.

Интерес к изучению отдельных дисциплин (внутренние мотивы) формируется через осознание полезности и применимости получаемых знаний для дальнейшей профессиональной деятельности (внешние мотивы). В противном случае у студентов формируется мнение о том, что изучаемая ими дисциплина не нужна.

Для организации процесса обучения физики студентов гуманитарных специальностей следует создавать такие психологические условия, при которых развитие внутренних мотивов учебно-познавательной деятельности (более слабо проявляются у учащихся) в освоении курса физики будет происходить при опоре на преобладающий у гуманитариев мотив учения – профессиональный мотив. Создание таких условий будет способствовать развитию мотивационной сферы от отрицательного отношения изучения физики у гуманитариев к заинтересованному и осознанному.

Выявление профессионального мотива как преобладающего позволяет получить ответ на вопрос, поставленный ранее о содержании образов и конкретных примеров при изучении учебных элементов. Характер будущей профессиональной деятельности студента определяет содержательную сторону обучения гуманитариев.

При обучении физике студентов-гуманитариев, учитывая их неподготовленность к восприятию содержания учебного материала, вероятно, придется отказаться от линейности изложения, а перейти на поэтапное его изложение. На начальном этапе рассматривается некоторый конкретный для данной специальности образ изучаемого понятия в виде представления (которые иногда бывают интуитивными) о понятии, существующее в изучаемой студентами сфере гуманитарного знания. Далее на следующем этапе делается обобщение, выделяется физическая сущность понятия. При этом необходимые физические понятия и утверждения последовательно вводятся для формирования целостного представления об изучаемом понятии. На заключительном этапе происходит проецирование

теоретического материала на будущую деятельность студента. Здесь рассматриваются исследования из данной гуманитарной области знания, результаты которых получены с помощью применения изучаемого физического понятия или метода.

В заключении можно отметить, что причисление студентом себя к конкретной категории гуманитариев или естественников, весьма условное и можно привести множество примеров, когда известные учёные физики и математики делали немалые успехи и в сфере гуманитарных наук, например Рене Декарт, автор большого числа философских трактатов, Исаак Ньютон, написавший фундаментальный труд по истории древних царств, Андре Мари Ампер, который имел научные работы в области политологии и социологии. Гуманитарный потенциал, который содержит в себе физика невозможно переоценить, без понимания этого, невозможно формирование правильной системы ценностей.