СЕКЦИЯ 11

«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ И ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»

СОДЕРЖАНИЕ

| МОДЕЛЬ ТУШЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КСАНТЕНОВОГО КРАСИТЕЛЯ КЛАСТЕРАМИ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ Алиджанов Э.К., Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Раздобреев Д.А 2811 |
|--|
| РОЛЬ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ ЛАБОРАТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ ФИЗИКИ БАКАЛАВРАМИ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ Анисина И.Н., к.т.н., Огерчук А.А., к.п.н., Пискарёва Т.И., к.т.н. |
| РЕАЛИЗАЦИИ ОПЕРАЦИЙ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА ВЫСОКОСПИНОВЫХ ИОНАХ МИКРОВОЛНОВЫМИ ИМПУЛЬСАМИ СО СДВИГОМ ФАЗЫ Арифуллин М. Р., к.фм.н |
| РАДИОУГЛЕРОДНЫЙ МЕТОД ДАТИРОВАНИЯ Гребенщикова Т.А 2827 |
| ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СОДЕРЖАНИЕ МЕТАЛЛОВ В ПРИРОДНЫХ ГЛИНАХ ОРЕНБУРЖЬЯ Каныгина О.Н., д.фм.н., профессор, Четверикова А.Г., к. фм.н., доцент, Анисина И.Н., к.т.н 2831 |
| ОПТОПАРА С ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫМ ОТРАЖАТЕЛЕМ Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор |
| КОНФОРМАЦИОННАЯ СТРУКТУРА МАКРОМОЛЕКУЛ ПОЛИАЛАНИНА НА ПОВЕРХНОСТЯХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР Кручинин Н. Ю., канд. физмат. наук, доцент, Андрианова Е. В |
| МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА АДСОРБЦИИ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОГО НАНОСТЕРЖНЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПЛАЗМОННОГО УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССАМИ Кручинин Н. Ю., канд. физмат. наук, профессор 2850 |
| ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ МАСТЕРСТВО УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ В КОНТЕКСТЕ ДОСТИЖЕНИЯ ПРЕДМЕТНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ СТАРШЕКЛАССНИКА Кучеренко М.А., к.пед.н., Белокопытова О.Г., к.пед.н. 2859 |
| ПЛАЗМОННАЯ АКТИВАЦИЯ И ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ТОЛУОЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА ОДНО- И ДВУСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ Кучеренко М. Г., д-р физмат. наук, профессор, Степанов В.Н., канд. физмат. наук, доцент, Кручинин Н. Ю., канд. физмат. наук, доцент |
| СПЕКТРы ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ бинарных комплексов «КВАНТОВая ТОЧКа – ПЛАЗМОННая наночастица» в магнитном поле Кучеренко М.Г., доктор физмат. наук, профессор, Налбандян В.М., кандидат физмат. наук 2878 |
| СПЕКТРЫ МАГНИТОЗАВИСИМОЙ ЭКСИТОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ МАГНИТНОГО КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ Кучеренко М.Г., д-р физ |

| мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физмат. наук, доцент, Налоандян В.М., канд. физмат. наук, Теренина Л.В |
|--|
| СПИН-СЕЛЕКТИВНАЯ КРОСС-АННИГИЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОБИЛЬНЫХ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ФЕРРОМАГНИТНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ Кучеренко М. Г., дрранитер физмат. наук, профессор, Алимбеков И.Р., Неясов П.П |
| СРЕДА ДНК – ОРГАНИЧЕСКИЙ КРАСИТЕЛЬ ДЛЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗАПИСИ Лантух Ю. Д., канд. физмат. наук, доцент, Пашкевич С. Н., канд. физмат. наук, профессор, Алиджанов Э. К., канд. физмат. наук, доцент, Тихонов Г.А. |
| ФОТОИНАКТИВАЦИЯ МИКРООРГАНИЗМОВ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ Летута С.Н., д.фм.н., проф., Пашкевич С.Н., к.фм.н., доц., Летута У.Г., к.фм.н., доц., Ишемгулов А.Т., Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е., Дорошкевич А.В |
| РАСЧЕТ ПОСТОЯННОЙ МАДЕЛУНГА ДЛЯ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА, АЛЛЮМИНИЯ И КАЛИЯ С КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИЕЙ Макаров В.Н., Каныгина О.Н., д-р физмат. наук, профессор2916 |
| МЕСТО ФИЗИЧЕСКОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ КАДРОВ Манаков Н.А. д-р. физмат. наук, профессор, Цветкова Е.В |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СВЧ ПОЛЯ НА ЧАГАНСКИЕ СУГЛИНКИ Нургалиева К.К., Бердинский В.Л., д-р физмат. наук, доцент, Сокабаева С.С. 2927 |
| РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ МАГНИТНОГО ОТКЛИКА ФОТОРЕАКЦИЙ В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ Пеньков С.А2931 |
| АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА Z- СКАНИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СВОЙСТВ ОПТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ Русинов ¹ А.П., канд. физмат. наук, доцент, Олейник ² И.О |
| СИНТЕЗ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe С РЕГУЛИРУЕМЫМИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ Русинов А.П., канд. физмат. наук, доцент, Вострикова И.В |
| ДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫЙ ПОДХОД ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ФИЗИКЕ Сидоров А.В2949 |
| ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ В УНИВЕРСИТЕТАХ США Сокабаева С.С., Бердинский В.Л. д-р физмат. наук, доцент |

| ФЕРРОМАГНИТНЫМ СЛОЕМ Чмерева Т.М., д-р физмат. наук, доцент Кучеренко М.Г., д-р физмат. наук, профессор, Назаренкова А.А | ПОВЕРХНОСТНЫЕ ПЛАЗМОНЫ В ПЛАНАРНЫХ НАНОСТІ | РУКТУРАХ С |
|---|---|---------------|
| ИОННО-ОБМЕННЫЕ СВОЙСТВА ВОДНО-ГЛИНИСТЫХ СУСПЕНЗИЙ Цветкова Е.В., Юдин А.А2962 | ФЕРРОМАГНИТНЫМ СЛОЕМ Чмерева Т.М., д-р физмат. | наук, доцент, |
| Цветкова Е.В., Юдин А.А | Кучеренко М.Г., д-р физмат. наук, профессор, Назаренкова А.А. | 2957 |
| | , , | |
| КУРСЕ ФИЗИКИ Якупов Г.С2966 | ИЗУЧЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ЭЛЕКТРОТЕХНИКИ В | ШКОЛЬНОМ |

МОДЕЛЬ ТУШЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КСАНТЕНОВОГО КРАСИТЕЛЯ КЛАСТЕРАМИ ЭНДОЭДРАЛЬНЫХ МЕТАЛЛОФУЛЛЕРЕНОВ

Алиджанов Э.К., Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Раздобреев Д.А. Оренбургский государственный университет

Эндометаллофуллерены (ЭМФ) с их уникальной структурой представляют интерес с точки зрения как фундаментальной, так и прикладной науки [1]. ЭМФ имеют перспективу применения в качестве молекулярных магнетиков, молекулярных проводников, ферроэлектриков, контрастирующих материалов для ЯМР-томографии [2, 3]. Однако физические и химические свойства ЭМФ до сих пор остаются недостаточно изученными.

Молекулы ЭМФ обладают значительными собственными дипольными моментами (3-4 Дебая). В растворах, за счет Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий молекулы, ЭМФ формируют устойчивые кластеры даже при незначительных концентрациях $(10^{-7}-10^{-6}\,\mathrm{M})$ [4]. Кластеры представляют интерес для создания функциональных элементов электроники. Их физико-химические свойства отличаются от свойств как объемного материала, так и одиночных молекул.

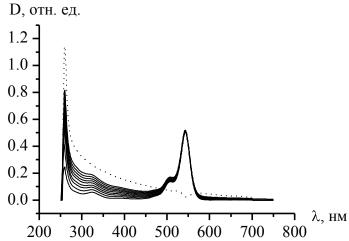


Рис.1 Изменения спектра поглощения эозина в растворе ДМФА при допировании эндоэдральными фуллеренами. Пунктир — разность спектров при нулевой и максимальной ($C_q = 5 \ 10^{-6} \ M$) концентрации тушителя.

В настоящей работе методом люминесцентной спектроскопии исследовались донорно-акцепторные свойства смеси ксантенового красителя Eosin Y (EO) и эндоэдрального фуллерена La@C82, растворенных в диметилформамиде (ДМФА). В раствор EO (концентрация $C_A = 1.1 \, 10^{-5} M$) добавляли La@C82 в соотношении от 0 до 1/3 по отношению к концентрации красителя. При этом регистрировались спектры люминесценции смеси и ее

оптической плотности. Изменения оптической плотности исходного раствора ЕО в процессе допирования представлены на рисунке 1. Пунктирная кривая представляет разность между спектром оптической плотности исходного раствора и спектром, соответствующим максимальному уровню допирования La@C82. Спектр смеси не является аддитивным по отношению к спектрам отдельных компонент, что указывает на процесс комплексообразования EO+La@C82. В таблице 1 приведены редокс-потенциалы компонент исследуемой смеси.

| | | | | Таблі | ица 1 |
|------------|----------------------|-----------------------------|-----------------------------|-------|-------|
| | Потенциал окисления, | Потенциал восстановления 1, | Потенциал восстановления 2, | 1, | |
| | эВ | эВ | В ЭВ | В | |
| La@ C82 | + 0.07 | - 0.42 | -1.37 | .34 | 1,5] |
| Eosin Y | + 0.78 | - 1.06 | - | .3 | 6] |

Свободная энергия ΔG комплекса EO+La@C82 может быть оценена по уравнению Рема-Веллера [7]:

$$\Delta G = E_{ox} - E_{red} - E^*,$$

где E_{ox} - потенциал окисления красителя, E_{red} - потенциал восстановления $La@C82, E^*$ - энергия S_1 состояния La@C82.

Подстановка соответствующих значений дает $\Delta G = -0.14$ эВ, что подтверждает возможность формирования в исследуемой смеси комплексов с переносом заряда.

На рисунке 2 приведены экспериментальные результаты по тушению люминесценции ЕО эндоэдральными фуллеренами в координатах Штерна-Фольмера. Наблюдается отклонение экспериментальной Штерн-Фольмеровской зависимости от прямой линии.

Рассмотрим возможные модели тушения, описывающие нелинейный характер зависимости Штерна-Фольмера [8].

Квадратичный ход графика тушения может быть обусловлен комбинацией статического и динамического процессов тушения. Однако удовлетворительно аппроксимировать экспериментальные результаты зависимостью

$$I_0/I = (1 + K_{cr} \cdot C_q) \cdot (1 + K_{дин} \cdot C_q),$$

не представляется возможным (рис.2, пунктирная кривая).

Экспоненциальный ход зависимости Штерна-Фольмера возможен при динамическом тушении в комбинации с эффектом «сферы тушения»:

$$I_0/I = 1 + K_{\text{дин}} \cdot C_q \cdot \exp(V \cdot C_q \cdot N_a/1000).$$

Здесь V некоторый объем вокруг молекулы тушителя, в котором происходит тушение флуорофора. Согласно данной модели аппроксимация экспериментальных результатов возможна при радиусе сферы тушения 70 нм, что представляется маловероятным.

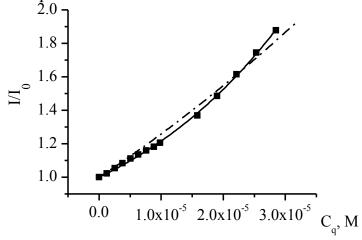


Рис. 2 Тушение люминесценции эозина кластерами M@C82:

- --- моделирование комбинацией динамического и статического тушения;
- моделирование статическим тушением с экспоненциально возрастающей константой ассоциации.

Большое значение тангенса угла наклона Штерн-Фольмеровской зависимости (на начальном участке $K_{\text{Ш}\phi} \approx 1.8 \cdot 10^4 \, \text{M}^{-1}$) и соотношение редокспотенциалов EO и La@C82 указывают на статический механизм тушения люминесценции. В этом случае коэффициент Штерна-Фольмера (коэффициент ассоциации) определяется вероятностью формирования комплексов EO+La@C82, которая экспоненциально зависит от величины свободной энергии комплекса:

$$K_a = \exp(-\Delta G/kT)$$
.

Результаты предыдущих исследований показали, что ЭМФ в полярных растворителях объединяются во фрактальные кластеры с гидродинамическим радиусом R=100 HM.Следовательно, В нашем случае молекулы EO адсорбируются на поверхности крупных ЭМФ кластеров и изменяют их зарядовое состояние. При увеличении концентрации тушителя относительная концентрация флуорофора падает, среднее количество адсорбированных на каждом кластере молекул уменьшается. Вероятно, это сопровождается изменением свободной энергии ЭМФ кластера, что экспоненциально изменяет вероятность ассоциации компонентов смеси. При этом константа статического тушения будет экспоненциально возрастать при увеличении концентрации тушителя. Из рисунка 2 видно, что заметный рост коэффициента ассоциации начинается после того, как соотношение концентраций тушителей и флуорофоров становится больше 1/1. Модель статического тушения с изменяющейся константой ассоциации можно представить выражением

$$I_0/I = 1 + K_{cr} \cdot C_q \cdot exp(-B \cdot C_q),$$

где
$$B*C_q = -\Delta G/kT$$
.

Аппроксимация экспериментальных точек по описанной модели тушения (рисунок 2, сплошная кривая) дает значения $K_{cm} = 1.78 \cdot 10^4$ и $B = 1.94 \cdot 10^4$. Исходя из полученного значения параметра B, можно оценить интервал изменения свободной энергии ЭМФ кластеров (рисунок 3).

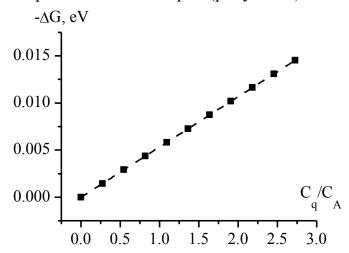


Рис.3 Изменение свободной энергии ЭМФ кластера в зависимости от относительной концентрации тушителя.

Обнаружено отклонение экспериментальной Штерн-Фольмеровской зависимости тушения люминесценции органических флуорофоров кластерами эдоэдальных металлофуллеренов от прямой линии. Для объяснения полученных экспериментальных результатов предложена модель статического тушения с экспоненциально возрастающей константой ассоциации. Параметры аппроксимация экспериментальных результатов по предлагаемой модели определяют изменение свободной энергии ЭМФ кластеров на 0.015 эВ при изменении соотношения тушителей и флуорофоров от 0 до 3/1.

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. И.Е. Кареев, В.П. Бубнов, Э.К. Алиджанов, С.Н. Пашкевич, Ю.Д. Лантух, С.Н. Летута, Д.А. Раздобреев. Кластерообразование эндоэдральных металлофуллереновс Y, Gd, Но в растворе и на поверхности твердого тела // Физика твердого тела, 2016, т 58, вып. 9 с. 1859-1863.
- 5. Mamoru Fujitsuka, Osamu Ito, Yutaka Maeda,y Takatsugu Wakahara,Takahiro Tsuchiya, Tsukasa Nakahodo,Takeshi Akasaka, Naomi Mizorogi, and higeru Nagase._Photophysical and Photochemical Properties of The La@C82 Anion// Chemistry Letters Vol.34, No.12 (2005) pp. 1600-1601.
- 6. Vishal Srivastava and Praveen P. Singh. Eosin Y catalysed photoredox synthesis: a review // RSC Adv., 2017, 7, pp. 31377 31392
- 7. Huang L., Yu X., Wu W., Zhao J. Styryl Bodipy-C60 dyads as efficient heavy-atom-free organic triplet photosensitizers // Org. Lett., 2012. Vol. 14, № 10. P. 2594–2597.
- 8. Lakowicz J. R., (2006) Principles of fluorescence spectroscopy. Springer, 3rd ed., 954 C.

РОЛЬ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДАННЫХ ЛАБОРАТОРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ ФИЗИКИ БАКАЛАВРАМИ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ

Анисина И.Н., к.т.н., Огерчук А.А., к.п.н., Пискарёва Т.И., к.т.н. Оренбургский государственный университет

Обучение физике нельзя представить только в виде теоретических студентам демонстрируются если физические Невозможно изучение процессов и явлений физики без решения задач и соответствующей практической работы собственными руками. В физической лаборатории бакалавры не только проверяют известные законы физики, но и работе с физическими приборами, овладевают экспериментальной исследовательской деятельности. С одной стороны, занятия в лаборатории являются необходимой составляющей освоения физики как экспериментальной науки, с другой, процесс выполнения заданий физического практикума переносит акцент на аналитический компонент деятельности. Курс физики в высших учебных заведениях, представляет собой основу для формирования естественно-научного знания, следовательно, он состояние современное должен отражать этой науки мировоззренческим. Для подготовки квалифицированных специалистов в различных областях необходимо сочетание фундаментального и прикладного знания, а также использования достижений теоретической, экспериментальной В структуре ООП инженерных направлений и вычислительной физики. подготовки бакалавриата физика входит в базовую часть естественно-научного и математического цикла дисциплин. Целью изучения является освоение основных законов физики и возможностей их применения при решении задач, возникающих в последующей профессиональной деятельности студентов вне зависимости от направления подготовки бакалавров, т.е. непрерывности и преемственности обучения инженерным специальностям [1].

В условиях ограниченных временных, материальных и иных ресурсов достижение целей инженерного образования требует организации совместной работы преподавателя и студента и повышения эффективности процесса обучения. Однако ситуация осложняется слабой подготовкой вчерашних абитуриентов, что показывают итоги обучения в первом семестре. Большие пробелы в базовых знаниях физики приходится ликвидировать в основном на младших курсах. Более того, ситуация усугубляется отсутствием у них опыта лабораторных работ, старшеклассников T.K. преимущественно к сдаче ЕГЭ, и сокращением числа часов, выделяемых на изучение физики. При этом для большинства инженерных направлений бакалавриата уменьшена ДОЛЯ аудиторных одновременном увеличении доли часов, которые отводятся на самостоятельную работу. Например, общая трудоемкость дисциплины «Физика» для студентов бакалавров, обучающихся на инженерных направлениях подготовки бакалавриата ОГУ, как правило, составляет 9 зачетных единиц (324 академических часов), из которых на лабораторные занятия выделяется всего 32 часа.

Таким образом, необходимо оптимизировать процесс выполнения лабораторных работ студентами, не потеряв при этом его качество. По нашему мнению, использование прикладных программ для расчетов результатов измерений, вычисления погрешностей, построения зависимостей позволяет упростить расчеты, освободив студентов от рутинной работы. При этом компьютерная обработка позволяет более наглядно графически представить результаты измерений, изменять масштаб графиков, выделять и рассматривать отдельные участки графика, строить теоретическую зависимость и сравнивать её с экспериментальной.

таких Для освоения прикладных программ И ознакомления первокурсников с процессом выполнения лабораторных работ авторами было издано учебное пособие «Анализ и визуализация данных лабораторного эксперимента по физике». Пособие содержит краткое введение в теорию ошибок и рекомендации по выполнению лабораторных работ по курсу общей приемы обработки описаны экспериментальных графическое представление и составление итогового отчета. Приведены примеры выполнения лабораторных работ с использованием программных продуктов [2].

Особенностью данного учебно-методического пособия является то, что оно целиком опирается на реальные задачи, которые приходилось решать соавторам при проведении занятий. Мы убеждены, что учить нужно на конкретных и осмысленных примерах, которые способны убедить студента в действительной полезности преподносимых ему знаний. Тем самым мы пытаемся восстановить равновесие между классической университетской системой образования, ориентированной на фундаментальные знания, и потребностями реальной жизни, в которой зачастую требуются практические навыки. Опыт преподавания на конкретных примерах убеждает нас в том, что при таком подходе студенты с первого же занятия получают необходимые навыки для выполнения лабораторных работ, самостоятельно осваивают дополнительные возможности программных пакетов. Учебно-методическое пособие, естественно, не охватывает всего круга задач, с которыми может столкнуться физик. Наша задача – убедить студентов в полезности изучения программных пакетов и стимулировать их самостоятельно осваивать эти пакеты, сообразуясь со своими конкретными потребностями. На протяжении всего текста мы старались последовательно закреплять приобретенные знания: часть работы предлагается выполнять самостоятельно, новая информация вводится очень небольшими порциями и опирается на полученные ранее знания. В конце текста приводятся задания для самостоятельной работы, которые должны помочь закрепить изученный материал.

Все современные пакеты включают наряду с большой библиотекой стандартных функций и методов также средства удобного представления

исходных данных и результатов, а также большой набор средств отображения результатов в графическом виде. Это, в конечном счете, позволяет исследователю значительно больше времени уделить основному объекту исследования, упростить или свести к неким стандартным действиям работу по созданию отчета выполненной лабораторной работы [3].

Наиболее доступной и универсальной в настоящее время является MS Excel, однако с ее помощью можно решить не все поставленные задачи, так как программа разрабатывалась для решения повседневных офисных задач. Другой распространённой программой является пакет MATHCAD, который позволяет проводить вычисления с произвольной точностью, работать с различными типами данных (комплексные, векторы, матрицы), использовать библиотеки математических функций. Пакет объединяет в себе: редактор математических формул, библиотеку математических функций, процессор символьных преобразований, текстовый редактор, графические средства представления результатов, позволяет не только произвести вычисления, но и получить документ — итоговый отчет с комментариями, формулами, таблицами и графиками.

Одним из наиболее мощных средств графического представления результатов является программный продукт Origin [4, 5]. Этот пакет уступает таким широко распространенным пакетам как Mathematika, MathCAD, Maple в качестве математической обработке результатов, однако он позволяет не только просто строить графики и оформлять их в соответствии с желанием автора, но и проводить математическую обработку результатов: искать зависимости в данных, проводить численное дифференцирование интегрирование, И осуществлять интерполяцию экстраполяцию, проводить И преобразования данных непосредственно в самой программе (рисунки 1-3).

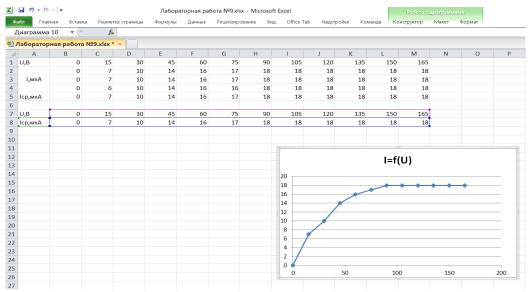


Рисунок 1 – Пример математической обработки результатов в MS Excel

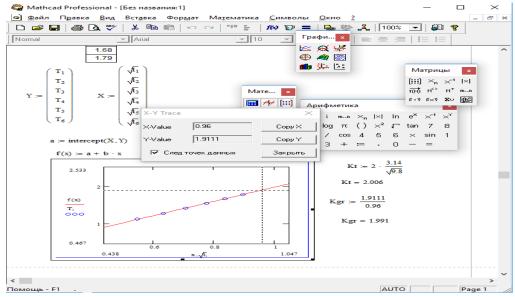


Рисунок 2 – Пример представления экспериментальных данных в MathCAD

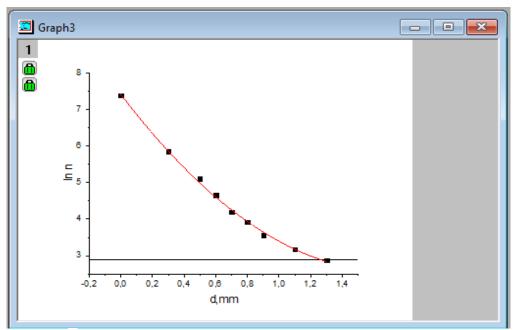


Рисунок 3 – Графическое представление результатов эксперимента в Origin

Предполагается, что учебно-методическое пособие будет полезно при изучении физики для обучающихся по образовательным программам высшего образования естественнонаучных и инженерно-технических направлений подготовки — всем тем, кому по роду своей деятельности приходится иметь дело с анализом и визуализацией экспериментальных данных.

Список литературы

1. Бюллетень научно-методического совета по физике. № 4 / Сост. Н.М. Кожевников – СПб. : Изд-во Политехнического ун-та. – 2012. – 84 с.

- 2. Огерчук, А. А. Анализ и визуализация данных лабораторного эксперимента по физике [Электронный ресурс] : учебное пособие для обучающихся по образовательным программам высшего образования по направлениям подготовки, входящих в состав укрупненных групп направлений подготовки 15.00.00 Машиностроение, 24.00.00 Авиационная и ракетно-космическая техника, 27.00.00 Управление в технических системах / А. А. Огерчук, Т. И. Пискарёва, И. Н. Анисина; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". Оренбург : ОГУ. 2018. ISBN 978-5-7410-2098-2. 119 с- Загл. с тит. экрана.
- 3. Лабораторный практикум по общей физике. Т.3/ Под ред. Ю.М. Ципенюка. М.: Изд-во МФТИ. –1998.
- 4. Леонтьева, Н.В. Применение ИКТ в натурном эксперименте лабораторного практикума по физике / Н.В. Леонтьева // Молодой ученый. 2013. №6. С. 700-703. Режим доступа: https://moluch.ru/archive/53/7096/.
- 5. Исакова, О.П. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin : Учебно-методическое пособие / О.П. Исакова, Ю.Ю. Тарасевич. Астрахань. 2007.

РЕАЛИЗАЦИИ ОПЕРАЦИЙ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА ВЫСОКОСПИНОВЫХ ИОНАХ МИКРОВОЛНОВЫМИ ИМПУЛЬСАМИ СО СДВИГОМ ФАЗЫ

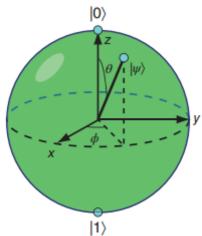
Арифуллин М. Р., к.ф.-м.н. Оренбургский государственный университет

Основной единицей квантовой информации является квантовый — кубит, состоящий из двухуровневой квантовой системы с базисными состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Способность квантовой системы находится в суперпозиции состояний с некоторым фазовым соотношением дает кубиту гораздо более богатое пространство состояний, чем его классический аналог.

Состояние кубита описывается вектором состояния

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$
,

которое отображается на поверхности сферы Блоха (рис. 1).



Спин S = 1/2 в магнитном поле является естественной реализацией кубита с собственными состояниями $|m_s=-1/2\rangle=|\downarrow\rangle=|0\rangle$ и $|m_s=+1/2\rangle=|\uparrow\rangle=|1\rangle$. Эти состояния представляют ориентации спина (его проекции на ось квантования) и состояния кубита. Много было достигнуто в исследованиях квантовых алгоритмов и управлении кубитами с помощью ЯМР, в том числе применение алгоритма факторизции Шора к числу15 [1]. Однако множество подходов в реализации квантового компьютера встречает сложность в виде инициализаций системы, например, системы ЯМР ядерных спинов становятся экспоненциально сложнее с увеличением числа кубитов, ограничивая масштабируемость подхода. Поэтому внимание исследователей переключились на спиновые кубиты электрона, хотя спины ядерных кубитов привлекательны с точки зрения времени когерентности и их приложений в квантовой памяти изза их длительного времени жизни квантового состояния до 6 часов [2].

В настоящее время исследования переключились на спины электронов. В работе [3] исследуют центры вакансий азота (NV) в алмазе и показано, что

время когерентности спина электрона в NV-центре достигает миллисекунд даже при комнатной температуре. Это открывает новое направление в управлении и манипуляции квантовыми кубитами с большим временем когерентности. Также исследуются другие центры в алмазе [4] и SiC [5], доноры и квантовые точки в кремнии [6-7], в GaAs [8], и в других полупроводниках [9]. Также исследуются молекулярные электронные спины [10-12] и используются в качестве полезных систем для проверки концепций квантовой информации.

Считается, что сильное магнитное поле необходимо для спиновых манипуляции и квантовых вычислении, чтобы обеспечить долговременную память и высокое разрешение квантовых состояний, так как вырожденные состояния спина нельзя контролировать или адресовать нулевым магнитным полем. Квантовая память, однако, должна обладать двумя противоречивыми качествами: устойчивость к шумам и управляемостью.

В работе показано, что расщепление уровней парамагнитных ионов со спином S>1/2 в нулевом магнитном поле, то есть в поле кристаллической решетки с парамагнитным ионом позволяет поддерживать когерентность и не применять сильные магнитные поля. Это новый путь реализации квантовых вычислений и сохранения квантовой информации без использования магнитного поля.

Известно, что симметричные состояния сами по себе являются «хрупкими», но становятся устойчивыми к шуму при определенных операциях нарушения симметрии. К материалам, пригодным для использования при нулевом поле, относятся кристаллы с парамагнитными ионами Ni(2+) с нулевым ядерным спином, также Fe(3+), с тремя уровнями, Gd(3+) с четырьмя и Cr(2+) с пятью уровнями.

В данной работе предлагается использовать в качестве материала парамагнитные ионы с нулевым ядерным спином в простой кристаллической решетке. Основное состояние электронов образуют триплетные состояния спина S =1. Расщепление в нулевом магнитном поле из-за спин-орбитального взаимодействия и за счет кристаллического поля состояние приводит к тому, что состояния с магнитным квантовым числом $\mathbf{m} = 0$ ($|T_0\rangle = 2^{-\frac{1}{2}}|\alpha_i\beta_j + \beta_i\alpha_j\rangle = |0\rangle$) лежит ниже вырожденных состояний с $\mathbf{m} = \pm 1$

$$\left|A\right\rangle = 2^{-\frac{1}{2}} \left|\alpha_i \alpha_j - \beta_i \beta_j\right\rangle = 2^{-\frac{1}{2}} (\left|1\right\rangle - \left|-1\right\rangle) \quad \text{M} \quad \left|B\right\rangle = 2^{-\frac{1}{2}} \left|\alpha_i \alpha_j + \beta_i \beta_j\right\rangle = 2^{-\frac{1}{2}} (\left|1\right\rangle + \left|-1\right\rangle).$$

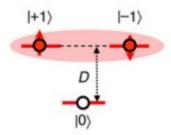
Такие состояния, расщепленные в нулевом магнитном поле, обеспечивают возможность для управления логическим кубитом на основе $|A\rangle$ и $|B\rangle$ состояний с помощью манипуляцией геометрической фазой Берри. Эти состояния позволяют применять микроволновое излучение с переменной фазой для манипулирования подсистемой с суммарным спином электронов $S=\pm 1$. Даже если подсистема достаточно вырождена, то возможно манипулировать состояниями и контролировать их фазу.

В работе предлагается использовать микроволновые импульсы со сдвигом фазы, что эквивалентно геометрическим вращениям. Гамильтониан спина S=1 в нулевом магнитном поле можно представить в изинговском виде, то есть в виде произведения двух спинов $S=\frac{1}{2}$

$$H = \frac{1}{2} \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{1Z} \boldsymbol{\sigma}_{2Z} ,$$

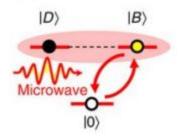
у которого собственными состояниями являются $|0\rangle$, $|A\rangle$ и $|B\rangle$, D здесь является параметром расщепления в нулевом поле.

На рисунке показано расщепление триплетных состояний в поле кристалла.



В результате действия на двухспиновую систему поляризованным вдоль оси X микроволновым излучением $H_1(t) = H_1(\sigma_{1X} + \sigma_{2X})\cos(\omega_{\Gamma}t)$ состояние $|0\rangle$ можно перевести в состояние $|B\rangle$ и обратно со сдвигом фазы.

С помощью последовательности микроволновых импульсов со сдвигом фазы можно получить квантовые логические операции



Для перевода из состояния $|0\rangle$ в состояние $|A\rangle$ можно осуществить с помощью микроволнового импульса вдоль оси Y, если используется две катушки расположенные перпендикулярно и импульсы от генератора разделены по времени, для манипулирования состояниями.

Механизм, лежащий в основе переходов спина, основан на гамильтониане взаимодействия в нулевом поле. Прямой переход между $\left|T^{+}\right\rangle = \left|\alpha_{i}\alpha_{j}\right\rangle$ и $\left|T^{-}\right\rangle = \left|\beta_{i}\beta_{j}\right\rangle$ состояниями запрещен, возможны косвенные манипуляции состоянием $\left|0\right\rangle$ управляемые соответственно поляризованными СВЧ импульсами вдоль осей X и Y, настроенными на частоту расщепления в

нулевом поле. Гамильтониан взаимодействия спинов с СВЧ импульсами имеет вид

$$H_1(t) = H_1(\sigma_{1X} + \sigma_{2X})\cos(\omega_{\Gamma}t),$$

где ω_{r} - частота СВЧ импульсов. Все манипуляции с электронным спином удобно описывать в представлении взаимодействия. Оператор эволюции без сдвига фазы имеет вид

$$U_1 = \exp(-i\frac{\theta}{2}(\sigma_{X1} + \sigma_{X2})) = (\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_{X1}\sin\frac{\theta}{2})(\cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_{X1}\sin\frac{\theta}{2})$$

Оператор эволюции под действием импульсов со сдвигом фазы СВЧ поля

$$U_{2} = \exp(-i\frac{\theta}{2}(\cos\delta \cdot \sigma_{x_{1}} \cdot I_{2} + \sigma_{y_{1}} \cdot \sigma_{z_{2}}\sin\delta)) \cdot \exp(-i\frac{\theta}{2}(\cos\delta \cdot \sigma_{x_{2}} \cdot I_{1} + \sigma_{y_{2}} \cdot \sigma_{z_{1}}\sin\delta))$$

Действие оператором U_2 на состояние $\left|T_0\right> = 2^{-\frac{1}{2}}\left|\alpha_i\beta_j + \beta_i\alpha_j\right> = \left|0\right>$ переводит это состояние в суперпозицию

$$U_2^X |T_0\rangle = \cos\theta |T_0\rangle - i\sin\theta \cdot e^{-i\delta}|B\rangle$$

Аналогичный результат получается для импульсов, поляризованных вдоль оси Y

$$U_{2}^{Y}|T_{0}\rangle = \cos\theta|T_{0}\rangle - \sin\theta \cdot e^{i\delta}|D\rangle$$

Такие импульсы позволяет реализовать квантовые логические операции. Например, логическая операция «фазовый сдвиг», которая является ключевым элементом в реализации квантового преобразования Фурье.

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

В работе также рассмотрены импульсы для реализации алгоритма CNOT (управляемое HE). Покажем реализацию операции CNOT, используя последовательность импульсов в катушках или в резонаторе вдоль осей X и Y,

Начальное состояние является суперпозицией $\cos\theta|T_0\rangle-i\sin\theta\cdot e^{-i\delta}|B\rangle$. Второй импульс является входным сигналом, в зависимости от состояния входного сигнала, или ничего не меняет в суперпозиции $U_2^X|T_0\rangle=c_1|T_0\rangle+c_2|B\rangle$, либо меняет местами коэффициенты $U_2^X|T_0\rangle=c_2|T_0\rangle+c_1|B\rangle$. Входной соответствует импульсу вдоль оси Y и действует только в пространстве состояний $|T_0\rangle, |A\rangle$. Если подать импульс $(\pi/2)_y$, то такой импульс переводит полностью из состояния $U_2^Yc_1|T_0\rangle=c_1|A\rangle$, данное состояние можно интерпретировать как исходное состояние находящиеся в состояние 1. В таком

случае, в суперпозиции $c_1|T_0\rangle+c_2|B\rangle$ должны поменять местами коэффициенты, что соответствует логической операции NOT. Обратным импульсом $(-\pi/2)_y$ переводим в нижнее состояние $c_1|T_0\rangle$, и импульсом вдоль оси X меняем местами коэффициенты c_2 и c_1 . В итоге получаем состояние $c_2|T_0\rangle+c_1|B\rangle$. Если же входное состояние было в нуле, что соответствует $c_1|T_0\rangle+c_2|B\rangle$, то ничего не меняется в исходном состоянии.

Чтобы отличить состояние $|A\rangle$ от $|T_0\rangle$ нужно измерить усредненную намагниченность вдоль оси Z. Если спин находится в суперпозиции $|B\rangle$ и $|A\rangle$ состояний

$$c_1|B\rangle+c_2|D\rangle=(c_1+c_2)|\alpha\alpha\rangle+(c_1+c_2)|\beta\beta\rangle$$
,

то намагниченность M будет не нулевой.

$$M = 4(c_1c_2^* + c_1^*c_2)$$
.

Измерение намагниченности M позволяет идентифицировать в каком из состояний находится спин электрона. Также намагниченность может выступать в качестве физической меры запутанности Бэлловских состояний.

Таким образом, показана возможность реализации логических операций квантового компьютинга с помощью импульсных манипуляций высокоспиновыми состояниями парамагнитных ионов.

Список литературы

- 1. L. M. Vandersypen, M. Steffen, G. Breyta, C. S. Yannoni, M. H. Sherwood, and I. L. Chuang, Nature, 2001, 414, 883.
- 2. M. Zhong, M. P. Hedges, R. L. Ahlefeldt, J. G. Bartholomew, S. E. Beavan, S. M. Wittig, J. J. Longdell, and M. J. Sellars, Nature, 2014, 517, 177.
- 3. F. Jelezko, T. Gaebel, I. Popa, A. Gruber, and J. Wrachtrup, Phys. Rev. Lett., 2004, 92, 076401.
- 4. M. V. G. Dutt, L. Childress, L. Jiang, E. Togan, J. Maze, F. Jelezko, A. S. Zibrov, P. R. Hemmer, and M. D. Lukin, Science, 2007, 316, 1312.
 - 5. D. J. Christle, A. L. Falk, P. Andrich, P. V. Klimov, J. Ul Hassan, N. T. Son, E. Janzén, T. Ohshima, and D. D. Awschalom, Nat. Mater., 2014, 14, 160.
- 6. J. J. L. Morton, D. R. McCamey, M. A. Eriksson, and S. A. Lyon, Nature, 2011,479, 345.
- 7. M.Veldhorst, J.C.C.Hwang, C.H.Yang, A.W.Leenstra, B.deRonde, J.P. Dehollain, J. T. Muhonen, F. E. Hudson, K. M. Itoh, A. Morello, and A. S. Dzurak, Nat. Nanotechnol., 2014, 9,981.
- 8. J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M.P. Hanson, and A.C. Gossard, Science, 2005, 309, 2180.
 - 9. J. Tribollet, J. Behrends, and K. Lips, EPL (Europhysics Letters), 2008, 84,

20009.

- 10. J. J. L. Morton, A. M. Tyryshkin, A. Ardavan, S. C. Benjamin, K. Porfyrakis, S. A. Lyon, G. Andrew, and D. Briggs, Nat. Phys., 2006, 2, 40.
- 11. G. A. Timco, S. Carretta, F. Troiani, F. Tuna, R. J. Pritchard, C. A. Muryn, E. J. L. McInnes, A. Ghirri, A. Candini, P. Santini, G. Amoretti, M. Affronte, and R. E.P. Winpenny, Nat. Nanotechnol., 2009, 4, 173.
- 12. C.J.Wedge, G.A.Timco, E.T.Spielberg, R.E.George, F.Tuna, S.Rigby, E.J.L. McInnes, R. E. P. Winpenny, S. J. Blundell, and A. Ardavan, Phys. Rev. Lett., 2012, 108, 107204.

РАДИОУГЛЕРОДНЫЙ МЕТОД ДАТИРОВАНИЯ

Гребенщикова Т.А. Оренбургский государственный университет

Радиоуглеродный метод датирования — один из наиболее эффективных методов, заключающийся в датировании биологических останков, предметов и материалов биологического происхождения путём измерения содержания в материале радиоактивного изотопа ¹⁴С по отношению к стабильным изотопам углерода. Он дает результат с минимальной погрешностью.

Углерод – один из основных составляющих биологических организмов, в земной атмосфере он присутствует в виде изотопа 14 C. Радиоактивный углерод изотопа радиоактивного имеет период 5700±30 полураспада лет, а также его содержание биологического существа и атмосфере достаточно мало, что их можно считать равными. Пока биологический объект живет, он постоянно обменивается с атмосферой углеродом, после смерти объекта обмен прекращается, а значит мы можем определить время смерти путем радиоуглеродного анализа [1].

Суть метода заключается в определении содержания радиоактивного углерода в исследуемом образце. Зная исходное соотношение изотопов углерода, определяют время, прошедшее с момента смерти организма [1].

Стабильные изотопы ¹²С и ¹³С образовались вместе со всеми остальными атомами, из которых состоит наша планета. Изотоп ¹⁴С образуется в микроскопических количествах в результате ежедневной бомбардировки солнечной атмосферы космическими лучами. При соударении с определенными атомами космические лучи разрушают их, в результате чего нейтроны этих атомов переходят в свободное состояние в земной атмосфере.

Изотоп ¹⁴С образуется, когда один из таких свободных нейтронов сливается с ядром атома азота. Далее атомы ¹⁴С, образовавшиеся с постоянной скоростью, подвергаются окислению и проникают в биосферу в процессе фотосинтеза и естественной цепочки питания

 14 С претерпевает β^- -распад, в результате распада образуется стабильный нуклид 14 N (выделяемая энергия 156,476кэВ):

$${}^{14}_{6}\text{C} \rightarrow {}^{14}_{7}N + e^{-} + \bar{\nu}_{e}$$

Скорость распада не зависит от химических и физических свойств окружения. Грамм атмосферного углерода содержит около $1,5\times10^{-12}$ г 14 С и излучает около 0,6 бета-частиц в секунду за счёт распада этого изотопа. Следует отметить, что с этой же скоростью 14 С распадается и в человеческом теле; каждую секунду в организме человека происходит несколько тысяч распадов. Ввиду малой энергии образующихся бета-частиц мощность эквивалентной дозы внутреннего облучения, получаемого по этому каналу (0,01 мЗв/год, или 0,001 бэр/год), невелика по сравнению с мощностью дозы

от внутреннего ⁴⁰К (0,39 мЗв/год). Средняя удельная активность ¹⁴С живой биомассы на суше в 2009 году составляла 238 Бк на 1 кг углерода, близко к значениям до бомбового пика (226 Бк/кг С; 1950). Бета частицы можно регистрировать с помощью счетчиков. Таким образом, измеряя количество бета частиц можно определить содержание радиоактивного углерода [1].

В организмах всех живых существ отношение изотопов ¹²С и ¹⁴С равно атмосферному отношению этих изотопов в их географическом регионе и поддерживается скоростью их метаболизма. После смерти организмы перестают накапливать углерод, и поведение изотопа ¹⁴С с этого момента становится интересным [2]. Было установлено, что за 5700 лет распадется половина ¹⁴С, вторая половина распадется еще через 5700 лет.

Отсюда следует, что первоначальное отношение изотопов 12 С и 14 С является геологической постоянной, возраст образца можно определить, измерив количество остаточного изотопа 14 С. К примеру, если в образце присутствует некоторое первоначальное количество 14 С, значит, дата смерти организма определяется двумя периодами полураспада (5700 + 5700), что соответствует возрасту 11 400 лет [3].

В этом заключается основной принцип радиоуглеродной датировки как инструмента археологии. Радиоуглерод абсорбируется в биосфере; он прекращает накапливаться со смертью организма и распадается с определенной скоростью, которую можно измерить, т.е. мы получаем «часы», которые начинают идти с момента смерти организма.[1]

Мартин Камен и Сэмюэль Рубен в 1939 году начали эксперименты, по определению нахождения в органических веществах изотопов с периодами полураспада, достаточными для представления ценности в биомедицинских ¹4C Синтезировав исследованиях. c использованием лабораторного циклотронного ускорителя было обнаружено, что период полураспада атома намного дольше, чем предполагалось ранее. С.А. Корф предсказал, что в верхних слоях атмосферы создается ¹⁴С путем взаимодействия тепловых нейтронов с ¹⁴N. На основе предсказаний Корфа в 1945 году Уиллардом было задумано, что ДЛЯ датирования можно использовать радиоуглеродный метод [2].

В чикагском университете в 1945 году Уилардом Либби была организована группа, которая начала работу по радиоуглеродному методу датирования. Уже в 1946 году была опубликована работа, где говорилось, что углерод в живом веществе может включать ¹⁴С, а также нерадиоактивные углерод. В 1947 году в журнале Science была опубликована статься, где обобщались все наблюдения, также в статье было отмечено, что их результаты подразумевают датирование материалов органического происхождения [2].

Либби и Джеймс Арнольд в качестве подтверждения своей теории датирования проанализировали образцы с известным возрастом. Это были два образца, взятые из могил двух царей Джосера и Снофру. Независимо друг от друга останки приурочены к 2625 году до нашей эры с погрешностью

в 75 лет, результаты радиоуглеродного анализа показали дату 2800 год до нашей эры с погрешностью в 250 лет. Результаты эксперимента были опубликованы в 1949 году в журнале Science. В 1960 году Уилард Либби получил Нобелевскую премию в области химии [2].

После опубликования последней статьи в течении 11 лет в мире было создано 20 лабораторий радиоуглеродного анализа. В настоящее время в России действуют 7 лабораторий, три находятся в Москве – в Геологическом институте РАН, Институте географии РАН, Институте проблем экологии и эволюции им. А.Н. Северцова РАН; три в Санкт-Петербурге – в Институте истории материальной культуры РАН, Санкт-Петербургском государственном университете и ВСЕГЕИ; одна в Новосибирске – в Институте геологии и минералогии СО РАН [3].

Радиоуглеродный метод можно провести разными способами на простом и дорогостоящем оборудовании. К ним относятся: сеточно-стенной счётчик Гейгера-Мюллера с твёрдым углеродом как носителем ¹⁴С (У.Ф. Либби, конец 1940-х годов); пропорциональный газовый счётчик (используется с 1950-х годов); жидкостно-сцинтилляционный счётчик — наиболее распространённый сегодня тип прибора (используется с 1960-х годов); ускорительный масс-спектрометр (УМС).

УМС-аппаратура — самая высокотехнологичная, сложная и дорогостоящая. Несмотря на это, число УМС-лабораторий в мире непрерывно растёт. В Англии издается специализированный журнал «Radiocarbon», в котором публикуются последние открытия и исследования, связанные с радиоуглеродным методом.

Оренбуржье богато на ископаемые как археологические, так и геологические. Для того, чтобы построить причинно-следственные связи — необходимо упорядочить во времени найденные ископаемые. Для установления даты смерти биологического объекта необходимо провести ряд исследований.

В Оренбурге в ОГУП существует школа Археологии Южного Урала, Студенты проходят практику на археологических раскопках в Оренбургской области. Все находки представлены в учебно-методическом кабинете. Руководителем школы является доктор исторический наук профессор Моргунова Н.Л.

На физическом факультет ОГУ в лаборатории на кафедре общей физики есть лабораторная установка для регистрации β-частиц, образующихся в результате β-распада — радиометр Б-2, в котором используется пропорциональный газовый счетчик Гейгера. Предлагается использовать эту установку для радиоуглеродной датировки археологических и природных образцов Оренбуржья.

Целью нашей работы является оценка возможностей лабораторного оборудования ОГУ для применения радиоуглеродного анализа для простых и сложных объектов, содержащих углерод.

Автор благодарна научному руководителю д.ф.-м.н. В.Л. Бердинскому за постановку задачи.

Список литературы

- 1. Вагнер, Г.А, Научные методы датирования в геологии, археологии и истории/ Г.А, Вагнер Москва, "Техносфера", 2006 г. с. 176.
- 2. Libby, W.F, Age determination by radiocarbon content: world-wide assay of natural radiocarbon/ E.C, Anderson, J.R, Arnold, // Science. V. 109, № 2827, P. 227–228, 1949.
- 3. Чичагова, О.А, Радиоуглеродное датирование: прошлое, настоящее, будущее Развитие идей И.П. Герасимова/ О.А. Чичагова, Э.П. Зазовская Москва, Бюллетень почвенного института им. В.В. Докучаева, выпуск 81, 2015 г.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА СОДЕРЖАНИЕ МЕТАЛЛОВ В ПРИРОДНЫХ ГЛИНАХ ОРЕНБУРЖЬЯ

Каныгина О.Н., д.ф.-м.н., профессор, Четверикова А.Г., к. ф.-м.н., доцент, Анисина И.Н., к.т.н.

Оренбургский государственный университет

Глины являются одним из самых используемых видов природного минерального сырья. Достигнутые успехи в использовании глин оказались возможны благодаря многочисленным научным исследованиям в области химии и физики силикатов. Множество продолжающихся исследований связано с кристаллического строения, особенностей влияния кристаллической решетки на свойства конечных продуктов, полученных на основе алюмосиликатов. На первый взгляд, подробно изучены вопросы фазового химической связи. равновесия В гетерогенных кристаллизации и спекания в зависимости от температуры процесса, его длительности, дисперсности частиц глины. Авторами публикаций [1-6] рассмотрены гидрофильные, сорбционные и ионообменные свойства глинистых материалов, взаимодействие их с водой; предложено достаточно много методов обработки и модифицирования глин с целью улучшения их сорбционной способности.

Однако, глины различных месторождений имеют свои особенности по строению, минералогическому и химическому составу, отличаются степенью кристалличности, дисперсностью, числом и активностью поверхностных ионообменных центров и так далее [7-12]. Изучение этих вопросов применительно к глинам конкретных месторождений представляет научный интерес, так как подробно изучены глины европейской части России, и мало сведений о глинах Южного Урала. Возможность использования Оренбургских глин в производстве функциональной керамики практически не исследована.

Изучение эволюции химических и структурных параметров природных необогащенных глин Оренбуржья при температурных воздействиях, а также разработка способов прогнозирования и управления структурными превращениями является актуальным.

Целью работы являлось изучение влияния температуры обжига на долевое содержание металлов в образцах на основе природных глин Оренбургской области. Степень вариации вхождения металлов в глины определяли методом рентгенофлуоресцентного анализа (РФА). Данный метод является неразрушающим, отличается быстротой выполнения анализа и пробоподготовкой, относительно простой дает возможность надежно общее количество металлов многокомпонентных определять В алюмосиликатных системах, содержащих аморфные и кристаллические фазы со сложными низкосимметричными решетками.

В качестве объекта исследования выбраны красная, каолиновая и монтмориллонит содержащая глины, типичные для месторождений

Оренбургской области. Химический состав исследуемых глин представлен в таблице.

| Глина | | | | | | | | | | 2 |
|----------------------------------|-------|-----------------|----------|-----------------|----------|-----|-----|------------------|----------------|------|
| | .п.п. | iO ₂ | e_2O_3 | iO ₂ | l_2O_3 | aO | gO | a ₂ O | ₂ O | , % |
| Монтмори ллонит содержащая | ,08 | 5,9 | ,51 | ,86 | 8,63 | ,72 | ,05 | ,9 | ,24 | 9,89 |
| Каолинов ая | ,37 | 4,51 | ,90 | ,5 | 4,78 | ,29 | ,06 | ,77 | ,17 | 9,85 |
| Красная | ,61 | 7,46 | ,90 | ,53 | 1,00 | ,21 | ,93 | ,04 | ,04 | 9,72 |

Из керамической массы, содержащей 20% воды с рН=7, методом полусухого прессования формовали образцы в виде дисков диаметром 25 и высотой 10 мм. В течение 48 часов высушивали на воздухе, затем в сушильном шкафу при 160 °C, 4 часа. Обжиги образцов проводили в воздушной среде путем резистивного нагрева при температурах, °C: 300, 500, 700, 800, 900, 1000. Выдержка при каждой температуре составляла 2 часа, скорость нагрева печи – 6 град/мин (медленный нагрев), охлаждение – вместе с печью.

Для проведения РФА образцы были измельчены и просеяны через сито с размером ячеек от 0,16 до 0,63 мм. РФА порошковых проб проводили с помощью спектрометра Spectroscan LF при следующих условиях: диапазон сканирования 780 - 3100 мА, шаг 5 мА, основная аппаратная погрешность не более 0,5%. Были получены спектры флуоресценции с характерными пиками K_{α} и K_{β} излучения. По интенсивности линий спектра рассчитывали концентрацию металлов методом множественной регрессии или методом стандарт-фона по спектру стандартного образца.

Установлено, что в спектрах монтмориллонит содержащей глины наблюдаются по два пика (K_{α} , K_{β}) для железа (Fe), меди (Cu), марганца (Mn), цинка (Zn), никеля (Ni), кобальта (Co). Наличие остальных элементов находится вне зоны чувствительности прибора. Типичный рентгенофлуоресцентный спектр этой глины представлен на рисунке 1.

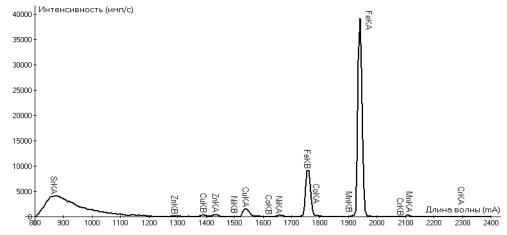


Рисунок 1 — Рентгенофлуоресцентный спектр монтмориллонит содержащей глины

Наиболее значительными по интенсивности в образцах данной глины являются пики, соответствующие железу, меди, цинку; довольно высокая интенсивность отмечена у пиков никеля и кобальта. Такие металлы, как хром и марганец присутствуют в незначительных количествах, поэтому им соответствуют пики невысокой интенсивности.

После сушки и термообработки при 300 и 500 °C долевое содержание меди в глинистой пробе (в относительных единицах, о.е.) увеличивается, марганца — незначительно уменьшается, а никеля после обжига при 500 °C снижается в 2 раза (рисунок 2).

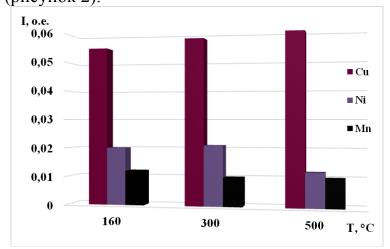


Рисунок 2 – Содержание Cu, Mn, Ni в монтмориллонит содержащей глине после сушки и обжигов 300-500 °C

Обжиги про высоких температурах — от 700 °C до 1000 °C приводят к интересным результатам: для меди, цинка и кобальта прослеживается зависимость с изменением температуры, а для хрома, марганца и никеля — нет (рисунок 3a).

Содержание железа и железистых примесей является важнейшей характеристикой качества глины, используемой для производства керамики. Ионы железа присутствуют в виде многочисленных соединений, в числе которых α - Fe_2O_3 , γ - Fe_2O_3 , Fe_3O_4 , FeO, $FeCO_3$, FeS_2 и др. Железо играет доминирующую роль в изменении структуры керамики при термообработке, в частности, образовании жидкой стеклофазы.

Исследуемая монтмориллонит содержащая глина характеризуется сравнительно высоким содержанием железа. Результаты РФА-анализа показывают, что для данной глины долевое содержание железа не зависит от температуры обжига (рисунок 3б). Таким образом, этот элемент можно использовать в качестве индикатора для оценки степени эволюции фазовой морфологии и контроля кинетики спекания алюмосиликатной керамики [13,14].

В составе каолиновой глины были определены железо, медь и цинк. Для данной глины характерно очень малое содержание железа (около 1%), не изменяющееся в интервале температур обжига от 700 °C до 1100 °C [15].

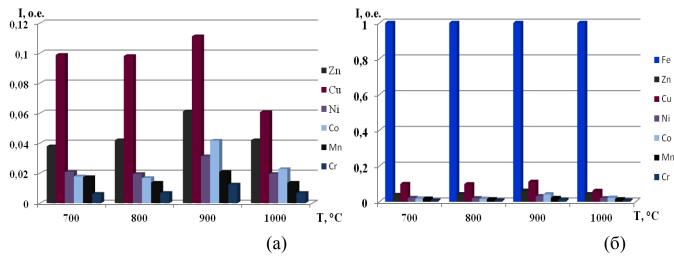


Рисунок 3 — Изменение долевого содержания металлов в монтмориллонит содержащей глине с ростом температуры обжига:

а) без учета железа; б) с учетом железа

Вариации содержания Си и Zn в этом температурном интервале носят нелинейный характер (рисунок 4a), что обусловлено протеканием многочисленных физико-химические процессов в алюмосиликатных системах. Это, прежде всего, твердофазные реакции и полиморфные превращения, взаимодействия твердых фаз с расплавами и газовой фазой, разнообразные комбинированные реакции.

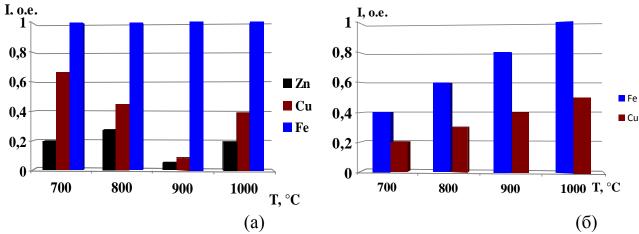


Рисунок 4 — Долевое содержание металлов после обжигов в каолиновой (a) и красной (б) глинах

В РФА-спектре красной глины наблюдаются наиболее значительные по интенсивности пики, отвечающие железу и меди, входящим в структурные элементы вещества. При изменении температуры обжига от 700 °C до 1000 °C массовая доля железа и меди в пробе увеличивается (рисунок 4б), что обусловлено протеканием в температурном интервале 700-900 °C одного из главных процессов - удаление химически связанной воды из глинистых минералов, а также переходами между легкоплавкими оксидами железа и процессами разложения CaCO₃ и других летучих компонентов.

Вывод: температурное воздействие на природные алюмосиликаты

(глины) приводит к изменению кристаллической структуры, фазового и химического состава, что, в свою очередь, оказывает существенное влияние на процессы спекания и формирование структуры керамики. РФА-анализ вхождения металлов в природные глины трех разных типов, вариации их содержания в зависимости от температуры обжига является целесообразным для составления полной картины химических и структурных откликов сложных алюмосиликатных систем на внешнее температурное воздействие.

Список литературы

- 1. Горшков, В.С. Физическая химия силикатов и других тугоплавких соединений / В.С. Горшков, В.Г. Савельев, Н.Ф. Федоров. М. : Высш.шк., 1988. 400 с.
- 2. Третьяков, Ю.Д. Керамика в прошлом, настоящем и будущем / Ю.Д. Третьяков. М., Знание, 1998 48 с.
- 3. Взаимосвязь состава, структуры и сорбционных свойств природных алюмосиликатов / Е.С Иванова, Ю.Ю. Гавронская, В.М. Стожаров, В.Н. Пак // Журнал общей химии. 2014. Т. 84. № 2. С. 185-188.
- 4. К вопросу о сорбционной очистке воды монтмориллонит содержащей глиной [Электронный ресурс] / Каныгина О. Н. [и др.] // Вестник Оренбургского государственного университета,2014. № 9, сентябрь. С. 160-163.
- 5. Полиморфные превращения кварца в глинах различного химикоминералогического состава / В.В. Шевандо, Е.В. Вдовина, А.В. Абдрахимов и [др.] // Известия вузов. Строительство, 2007. № 6. С. 40-47.
- 6. Четверикова, А. Г. Исследования полиминеральной глины, содержащей трехслойные алюмосиликаты физическими методами [Электронный ресурс] / Четверикова А. Г., Маряхина В. С. // Вестник Оренбургского государственного университета, 2015. № 1, январь. С. 250-255.
- 7. Везенцев А.И. Физико-химические характеристики природной и модифицированной глины месторождения поляна Белгородской области / А.И. Везенцев, С.В. Королькова, И.А. Воловичева // Сорбционные и хроматографические процессы. 2008. Т. 8. № 5. С. 790-795.
- 8. Горюшкин, В.В. Технологические свойства бентонитов палеоцена Воронежской антеклизы и возможности их изменения // Вестник Воронежского университета. Сер. Геология. -2005. № 1. C. 166-177.
- 9. Абдрахимова, Е.С. Кинетика структуры пористости в процессе обжига самарских легкоплавких глин различного химико-минералогического состава / Е.С. Абдрахимова, В.З. Абдрахимов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук, 2009. Т.11, № 5. С. 32 41.
- 10. Анисина, И.Н. Закономерности формирования структуры и свойств керамического материала на основе природных алюмосиликатов: Автореф... дис. кан. тех. наук. Томск.: 2016. 18 с.

- 11. Логинов, В.М. Термические исследования полиминеральных глин гжельского месторождения / В.М. Логинов, Т.Л. Неклюдова, Н.С. Югай // Стекло и керамика, 2000. N 27. C. 11-14.
- 12. Анисина, И.Н. Природные глины Оренбуржья как сырье для получения функциональной керамики / Каныгина О.Н., Анисина И.Н. // Вестник ОГУ. 2015. № 10 (185). С. 275 278.
- 13. Абдрахимова, Е.С. Превращения оксидов железа при обжиге бейделлитовой глины / Е.С. Абдрахимова, В.З. Абдрахимов // Журнал неорганической химии, 2009, том $54. \mathbb{N} \ 1. \mathbb{C}. \ 42-46.$
- 14. Анисина, И. Н. Содержание элементного железа как метка для контроля спекания алюмосиликатной керамики / Анисина И. Н., Каныгина О. Н. // Стекло и керамика,2017. № 11. С. 33-36.
- 15. Кинетика спекания в алюмосиликатных композитах [Электронный ресурс] / И.Н. Анисина, О.Н. Каныгина, Е.В. Волков, Е.В. Стародубцев // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф., 3–5 февраля 2016г. / Оренбург. гос. ун-т. Оренбург : ОГУ, 2016. [С. 1195-1201]. 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). Загл. с этикетки диска. ISBN 978-5-7410-1385-4.

ОПТОПАРА С ЭЛЛИПСОИДАЛЬНЫМ ОТРАЖАТЕЛЕМ

Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор Оренбургский государственный университет

Известны резистивные оптопары, состоящие из источника света, фотопреобразователя и корпуса, между которыми имеется оптическая связь и обеспечена электрическая изоляция. Они широко используются в различных электронных устройствах. В качестве фотопреобразователей в этих оптопарах используется фоторезистор или полупроводниковый резистор. Источником света в резистивных оптопарах, как привило, служат сверхминиатюрные лампочки накаливания [1].

устройства обладают низкой Эти выходной мощностью из-за использования в их составе источников света с малой мощностью и фотопреобразователей, рассчитанных на преобразования светового излучения малой мощности, кроме того у них низкая электрическая прочность из-за малого расстояния между источником света и фотопреобразователем. Соответственно область применения ЭТИХ оптопар ограничены характеристиками.

В настоящей работе описывается оптопара имеющая значительную выходную мощность и электрическую прочность. Этот результат достигается тем, что в оптопаре, содержащей источник света, фотопреобразователь, корпус, в качестве источника света используется ксеноновая лампа, в качестве фотопреобразователя - батарея солнечных элементов, корпус выполнен в виде трубы из диэлектрического материала, на внешней боковой поверхности которого имеются распределители потенциалов. Дополнительно в состав оптопары включен растр и эллипсоидальный отражатель. Растр и батарея солнечных элементов расположены на одной оси, совпадающей с осью корпуса, выполненного в виде трубы, причем в одном торце корпуса расположен эллипсоидальный отражатель, растр и ксеноновая лампа, а во втором торце - батарея солнечных элементов. Ксеноновая лампа предлагаемой оптопары расположена вдоль оптической оси эллипсоидального отражателя, в центре которого имеется отверстие куда входит один электрод ксеноновой лампы [2].

На рисунке 1 показана предлагаемая конструкция оптопары с эллипсоидальным отражателем. Она содержит ксеноновую лампу 1, эллипсоидальный отражатель 2, растр 3, корпус 4 выполненный в виде трубы из диэлектрического материала, на внешней боковой поверхности которого имеются распределители потенциалов и батарею солнечных элементов 5.

При отсутствии электрического тока на входе оптопары отсутствует электрический ток. При поступлении электрического тока на ксеноновую лампу 1 оптическое излучение, отраженное от эллипсоидального отражателя 2, поступает на раст 3, пройдя раст далее через корпус 4, выполненный в виде трубы из диэлектрического материала, поступает на батарею солнечных

элементов 5. В батарее солнечных элементов 5 световое излучение преобразовывается в электрический ток и через выводы этой батареи передается далее потребителю. На рисунке стрелками показан ход световых лучей.

Увеличение электрической прочности оптопары достигается за счет того, что благодаря ее конструкции увеличивается расстояние между источником света 1 и ее фотопреобразователем - солнечными элементами 5 [3].

Увеличение выходной мощности оптопары достигается за счет использования в ее составе в качестве источника света ксеноновой лампы 1, а в качестве фотопреобразователя батареи солнечных элементов 5.

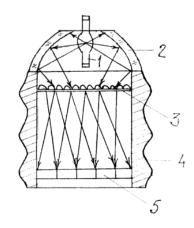


Рис. 1. Оптопара с эллипсоидальным отражателем.

1 - ксеноновая лампа, 2 - эллипсоидальный отражатель, 3 - растр, 4 - корпус, выполненный в виде трубы из диэлектрического материала, на внешней боковой поверхности которого, имеются распределители потенциалов, 5 -батарею солнечных элементов.

eë свойства Оптопара является четырехполюсником, поэтому определяются тремя основными характеристиками - входной, передаточной и выходной. Входной характеристикой предлагаемой оптопары является вольтамперная характеристика излучателя, то есть – ксеноновой лампой [4], а выходной - вольт-амперная характеристика фотоприемника при заданном токе на входе оптопары – то есть для предлагаемой конструкции солнечных элементов. Передаточной характеристикой оптопары является зависимость тока на ее выходе от тока на ее входе $I_2 = f$. Быстродействие оптопары определяется временем переключения, а также граничной частотой. Для предлагаемой конструкции оптопары эта частота варьируется единиц килогерц в зависимость от вида используемой ксеноновой лампы. Сопротивление изоляции между входом и выходом оптопары достигает 10^{10} Om.

Потери энергии в оптопаре определяются соотношением [6]:

$$\eta = \eta_1 \cdot \eta_2 \cdot \eta_3 \tag{1}$$

где: η_1 - коэффициент учитывающий потери энергии в оптической системе оптопары при ее передаче от источника оптического излучения к батарее солнечных элементов; η_2 - коэффициент описывает потери энергии при преобразовании световой энергии в электрическую, η_3 - КПД преобразования электрической энергии в световую источником излучения используемым в оптопаре [4].

Коэффициент $\hat{\eta}_1$, определяется той частью светового потока источника света, который оптической системой оптопары удается направить на батарею солнечных элементов. Эти потери энергии в первую очередь определяются параметрами источника оптического излучения и оптической системы применяемой Важнейшими оптопаре. ИЗ них являются: пространственных кривых распределения силы света выбранного источника, которая определяет величину светового потока, сосредоточенную в данном телесном угле, а, следовательно, величину его возможного захвата оптической системой; форма излучающей поверхности выбранного источника излучения в значительной степени определяющая направленность излучения; размер излучающей поверхности выбранного источника излучения; тип оптической схемы, по которой построена оптопара и оптические элементы, выбранные для ее построения [6]. В качестве коэффициента ή используют отношение захваченного оптической величины светового потока, системой направляемого для освещения батареи солнечных элементов - Φ_{3ax} к величине полного светового потока источника света - $\Phi_{\text{пол}}$, [6]:

$$\eta_1 = \frac{\Phi_{\text{MAX}}}{\Phi_{\text{post}}} \tag{2}$$

Применительно к предлагаемой конструкции оптопары η_1 находится в пределах от 0, 90 до 0,95 в зависимости от типа ксеноновой лампы.

Коэффициент η_2 описывает КПД преобразования световой энергии в электрическую солнечными элементами оптопары. Для нахождения значения этого коэффициента, в соответствии с методикой [5-7] источник оптического излучения заменяется абсолютно черным телом, нагретым до некоторой температуры T_1 . Из всего спектра излучения такого черного тела на фотоэлемент пропускается лишь узкая спектральная область с

$$\Delta v = kT_2 / 2\pi h \tag{)}$$

где T_2 – температура солнечных элементов [7].

Эта область должна примыкать к частоте v_o , соответствующей краю поглощения материала фотопреобразователя, так как меньшие частоты не создают электрон-дырочных пар и поэтому они должны быть отражены к излучателю, чтобы не допускать непроизвольные потери тепла. С другой стороны в невырожденном полупроводнике электроны занимают уровни энергии, лежащие в интервале kT над дном зоны проводимости. Поэтому свет с частотой, превышающий v_o больше, чем на kT, создает пары, обладающие избытком кинетической энергии, которая немедленно будет передана решетке.

Для получения максимального КПД преобразования солнечным элементом излучения черного тела, равного КПД цикла Карно

$$\eta = T_1 - T_2 / T_1 \tag{4}$$

и, соответственно, максимального КПД солнечных элементов для преобразования излучения используемого источника света, эта часть спектра тоже должна быть отражена.

Таким образом, в идеальном случае на фотоэлемент от черного тела пропускается только мощность

$$G_0 \left(Q_0, T_1 \right) T_2 / 2\pi h$$
 (5)

 G_{o} — спектральная плотность мощности излучения абсолютно черного тела.

Соответственно максимальный КПД солнечного элемента может быть вычислен из соотношения:

$$\mathbf{h}_{0} = \left(1 - \frac{T_{2}}{T_{1}}\right) \left[1 - \frac{\ln\left[\frac{E_{g}}{kT_{2}}\left(1 - \frac{T_{2}}{T_{1}}\right)\right] + 1}{\frac{E_{g}}{kT_{2}}\left(1 - \frac{T_{2}}{T_{1}}\right)}\right]$$
(6)

а максимальная мощность электрического тока на его выходе

$$P = \varepsilon_g N \left(1 - \frac{T_2}{T_1} \right) \left[1 - \frac{\ln \left[\frac{\varepsilon_g}{kT_2} \left(1 - \frac{T_2}{T_1} \right) \right] + 1}{\frac{\varepsilon_g}{kT_2} \left(1 - \frac{T_2}{T_1} \right)} \right]$$
(7)

где $\varepsilon_{\scriptscriptstyle g}$ — ширина запрещенной зоны полупроводника, N - число фотонов.

Эквивалентная температура черного тела, при которой КПД максимален, может быть вычислен из условия равенства числа фотонов в спектре преобразовываемого излучения числу фотонов излучаемых черным телом в интервале $\Delta \nu$. Соотношение, определяющее это равенство, может быть записано в виде [5]:

$$\frac{4\Phi^{0}}{2\pi\hbar\nu_{0}} G_{0} \Phi_{0}, T_{1} \frac{kT_{2}}{2\pi\hbar} = \frac{\Delta I}{2\pi\hbar\nu}$$
 (8)

где: n^o - показатель преломления материала фотопреобразователя, ΔI - плотность мощности преобразовываемого излучения.

У ламп спектральная область, превосходит область определяемую (2). Но, несмотря на это, для расчета КПД солнечных элементов и их максимальной мощности в этом случае также можно воспользоваться соотношениями (5) и (6) если принять, что фотоэлемент освещается черным телом нагретым до такой температуры, что в интервале частот $kT_2/2\pi h$ на него поступает столько же фотонов, сколько их имеется в спектре преобразованного излучения, ограниченного частотой ν_0 .

При этом эквивалентная температура черного тела может быть найдена из условия равенства числа фотонов в спектре излучения черного тела и рабочей частоты преобразованного излучения [5]

$$\frac{4\Phi^{0} G_{0} \Phi_{0}, T_{1}}{2\pi h \nu_{0}} \cdot \frac{kT_{2}}{2\pi h} = \int_{\nu_{0}}^{\infty} \varphi \Phi d\nu \frac{d\nu}{2\pi h \nu}$$
(9)

где φ (- спектральная плотность мощности преобразовываемого излучения.

При окончательном определении КПД следует учитывать, что мощность преобразовываемого излучения

$$P_c = \int_0^\infty \varphi \, \Phi \, d\nu \tag{10}$$

больше мощности в используемом излучении черного тела

$$P_0 = G_0 \, \mathbf{\Psi}_0, T_1 \, \frac{kT_2}{2\pi h} \, \mathbf{\Psi} n^0 \,$$

Поэтому для получения КПД преобразования немонохроматического излучения нужно (5) умножить на величину

$$h_c = \frac{P_O}{P_C} \tag{12}$$

Окончательно КПД солнечного элемента преобразовывающего оптическое излучение с широким спектром

$$\eta_2 = h_0 h_c \tag{13}$$

где h_o - вычисляется по (6), а h_c - по (12).

В случае ламп возможно увеличение КПД преобразования оптического излучения в электрический ток до значений ~70%. Это может быть сделано двумя способами. Прежде всего, могут быть использованы многослойные структуры, обеспечивающие каскадное преобразование оптического излучения. Для этих целей могут быть использованы трех- и четырехкомпонентные соединения элементов III в V групп периодической системы. Кроме того, могут быть использованы гетероструктуры с вариозной базой, когда на выходе создается широкозонное окно, соответствующее максимальной ширине спектра преобразовываемого излучения, а база имеет переменное по глубине значение (благодаря плавному изменению состава, уменьшающегося по мере углубления). Такие структуры можно получить, используя двойные, тройные и четвертные соединения на базе компонент, входящих в состав GaAs. Можно также увеличить КПД до значений близких к предельному путем увеличения кратности концентрации излучения до оптимальных величин и использованием каскадных многослойных структур [8-11].

Выходная мощность предлагаемой оптопары может быть вычислена из соотношения:

$$P_{OIIIOIIAPhI} = \eta P$$

где $P_{OITIOПАРЫ}$ - мощность на выходе оптопары, P - мощность лампы используемой в составе оптопары, η - потери энергии источника света в оптопаре.

При мощности ксеноновой лампы 150 Вт, при КПД преобразования излучения лампы солнечными элементами \sim 70% мощность электрического тока на выходе оптопары может быть \sim 80 Вт с учетом потерь, возникающих при передаче оптического излучения от трубчатой ксеноновой лампы к батарее солнечных элементов. Для этого в качестве солнечных элементов, прежде всего, могут быть использованы многослойные структуры, обеспечивающие каскадное преобразование оптического излучения. Для этих целей могут быть использованы трех- и четырехкомпонентные соединения элементов III и V групп Периодической системы. Кроме того, могут быть использованы гетероструктуры с вариозной базой, когда на выходе создается широкозонное окно, соответствующее максимальной ширине спектра преобразовываемого излучения, а база имеет переменное по глубине значение ε_g . Такие структуры можно получить, используя двойные, тройные и четвертные соединения на базе компонент, входящих в состав GaAs

Список литературы

- 1. Иванов В.И. Полупроводниковые оптоэлектронные приборы: Справочник / В.И. Иванов, А.И. Аксенов, А.М. Юшин 2-е изд. перераб. и доп. М.: Энергоатомиздат, 1989. 448 с, с. 309.
 - 2. Кирин И.Г. Патент РФ N2670706, опубликовано 29.11.2018, Бюл. 34.
- 3. Кирин И.Г. Электрические изоляторы со световодами/ И.Г. Кирин $\,-\,$ М.: Энергоатомиздат, 1994.-32 с.
- 4. Г.Н Рохлин Разрядные источники света/ Г.И. Рохлин 2-е изд. перераб. И доп. М.: Энергоатомиздат, 199. 720 с.
- 5. Раушенбах Г.П. Справочник по проектированию солнечных батарей. М.: Энергоатомиздат.1983г.- 357с.
- 6. Кирин И.Г. Фотоэлектронные трансформаторы/ И.Г. Кирин.-М.: Университетская книга, 2013.-136 с.
- 7.Кирин И.Г. Потери энергии в источниках вторичного электропитания с системами гальванической развязки «Источник оптического излучения фотоэлектрический преобразователь» / Кирин И.Г. // Интеллект. Инновации. Инвестиции. 2014. №4. С. 153-157.
- 8. Фаренбрух А.Д., Бъюб Р.Х. Солнечные элементы: теория и эксперимент: Пер. с англ./Под редакцией М.М. Колтуна. М.: Энергоатомиздат.1978. -261с.
- 9.Фрааз Л.П. Усовершенствованные солнечные элементы, предназначенные для работы в системах с концентраторами излучения: Современные полупроводниковые элементы фотоэнергетики / под ред. Т.Ф. Кутмса, Дж.К. Микина. Пер. с англ. Под ред. М. М. Колтуна М.: Мир, 1988, С. 201-261.

- 10. Mac-Millan H. F., Hamaker H. C., Virshyp G. E., Wethen J. C. Multijunction III-V solar cells: recent and projectes results // 20-th IEEE Photovoltaic Spec. 26-30, 1988: Conf. Rec. vol1. New York N = 4 1988 P.48-54.
- 11. Алферов Л. М. Андреев В. М. Гарбуров Д. З. Егоров Б. В. Ларинов В. Р. Румянцев В. Д. Федоров О. М. Высокоэффективные солнечные элементы с промежуточным преобразованием излучения, предназначенные для работы с концентраторами светового потока // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. 1987. Т. 4. Вып. 18. С. 1128-1130.

КОНФОРМАЦИОННАЯ СТРУКТУРА МАКРОМОЛЕКУЛ ПОЛИАЛАНИНА НА ПОВЕРХНОСТЯХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР

Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Андрианова Е. В. Центр лазерной и информационной биофизики, Оренбургский государственный университет

Гибридные наноструктуры, с расположенными на их поверхности полимерными молекулами, конформационная которых структура чувствительна к изменению водородного показателя, широко изучаются в настоящее время с целью их дальнейшего применения в биомедицинских исследованиях, а также в химических сенсорах. При этом могут быть адсорбированные как на поверхности наноструктуры использованы полимерные макромолекулы, так и формироваться полимерные щетки, у которых один конец макроцепи связан с поверхностью наноструктуры [1-6]. Перспективным является использование таких наноструктур, как углеродные нанотрубки фуллерены, c расположенными на ИΧ поверхностями полипептидами [7-8].

В данной работе методом молекулярной динамики исследовались конформационные изменения макроцепей полиаланина на поверхности однослойной углеродной нанотрубки, а также фуллерена в зависимости от изменения водородного показателя. Первая наносистема представляет собой углеродную нанотрубку (длина 15 нм, диаметр 4.05 нм, хиральность n=30 и m=30) с адсорбированной на ней макромолекулой полиаланина из 100 аминокислотных звеньев. Вторая состоит из фуллерена С720, на поверхности которого сформирована полимерная щетка из 54 молекул полиаланина (длиной 10 и 15 аминокислотных остатков), при этом один конец макроцепи был зафиксирован на поверхности фуллерена.

Молекулярно-динамическое моделирование (МД-моделирование) производилось с использованием программного комплекса NAMD [9] при постоянной температуре 300 К с шагом по времени 0.001 пс. Углеродной нанотрубки и фуллерена фиксировались. МД-моделирование производилось в вакууме для первой и второй наносистемы в течение 1 нс по 5 раз, а также в воде для фуллерена с полимерными молекулами из 10 аминокислотных остатков ALA в течение 3 нс три раза. При МД-моделировании в воде фуллерена с полимерными молекулами полиаланина длиной 10 звеньев вся молекулярная система была помещена в куб со стороной 20 нм, заполненный водой. Для контроля получения равновесных конформаций осуществлялось наблюдение за изменением среднеквадратичного расстояния между атомами полипептида в различных конформациях (RMSD). Использовалось силовое поле CHARMM22 [10] для полиаланина при значении водородного показателя pH=7. В этом случае аминокислотные остатки ALA нейтральны. Параметры для атомов углерода нанотрубки задавались такими же, как и для атомов типа CA силового поля CHARMM22, которые используются для описания молекул бензола [11].

При значениях водородного показателя pH>10 аминокислотные остатки ALA заряжены отрицательно, а при pH<2 они заряжены положительно. В обоих случая макромолекула полиаланина представляет сильно заряженный полиэлектролит. Поэтому МД-моделирование производилось только при значении pH=11. Для полиаланина в этом случае использовалось силовое поле силовое поле CHARMM General Force Field (CGenFF) [12-13].

По результатам МД-моделирования по всем полученным конечным конформациям полиаланина рассчитывались среднее радиальное распределения концентрации атомов полипептида при значениях водородного показателя pH=7 и pH=11.

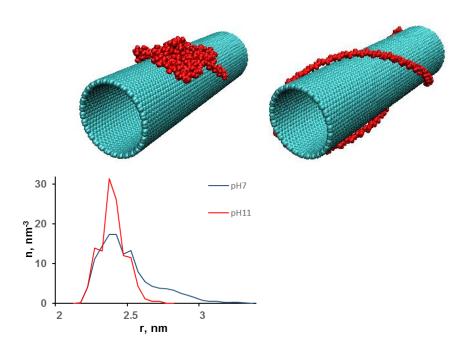


Рис. 1. Макромолекула полиаланина из 100 звеньев на поверхности углеродной нанотрубки после МД-моделирования при значениях водородного показателя рH=7 (A) и рH=11 (Б) и средние радиальные зависимости концентрации атомов полиаланина (В)

На рисунке 1 изображены одни из результатов МД-моделирования полиаланина из 100 звеньев на поверхности углеродной нанотрубки. На рисунке 1А изображен полиаланин после МД-моделирования при значении водородного показателя рН=7, а рисунке 1Б при значении водородного показателя рН=11. Видно, что при изменении водородного показателя произошли значительные изменения конформационной структуры полиаланина на поверхности нанотрубки: при рН=11 молекула полипептида обвивает углеродную нанотрубку. Это связано с изменившимся зарядом аминокислотного остатка ALA, и, соответственно, в взаимным отталкиваниям

звеньев друг от друга. В результате все звенья полиаланина при рH=11 находятся на поверхности нанотрубки, в то время как при рH=7 формируется неоднородное распределение звеньев макроцепи. На рисунке 1В изображены средние радиальные распределения концентрации атомов полиаланина на поверхности нанотрубки при различных значениях водородного показателя. На графике видно, что при рH=7 формируется неоднородное радиальное распределение концентрации атомов полиаланина, профиль которого значительно шире, чем при значении рH=11, при этом пик радиального распределения при рH=11 значительно выше.

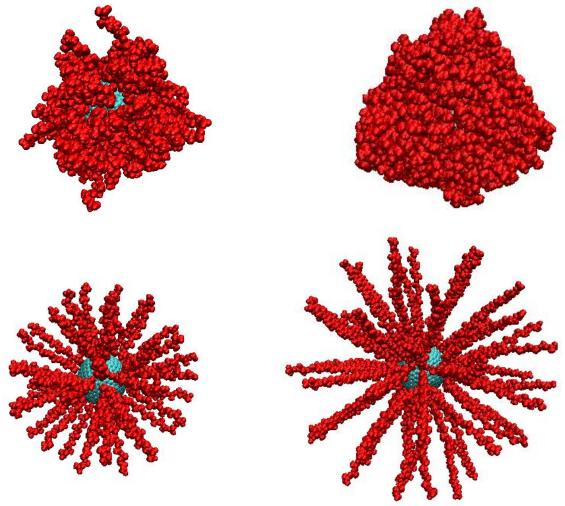


Рис. 2. Конформационные структуры полиаланина из 10 (A, B) и 15 (Б, Γ) звеньев с зафиксированным одним концом на поверхности фуллерена С720 после МД-моделирования при значениях водородного показателя рH=7 (A, Б) и рH=11 (B, Γ)

На рисунке 2 изображены одни из результатов МД-моделирования полиаланина из 10 звеньев в воде при рН=7 (рис. 2A) и рН=11 (рис. 2B) на поверхности фуллерена С720, а также из 15 звеньев в вакууме при рН=7 (рис. 2Б) и рН=11 (рис. 2Г). Видно, что при рН=7 произошла адсорбция нейтральных аминокислотных остатков ALA на поверхности фуллерена, при этом звенья полипептида полностью обволакивают фуллерен. При рН=11 наблюдается

другая картина: все макромолекулы полиаланина вытянуты в прямую линию от поверхности фуллерена, что связано с отталкиваниям друг от друга не только заряженных звеньев, расположенных на одной макроцепи, отталкиванием между заряженными макромолекулами. Ha рисунке зависимости изображены средние радиальные концентрации макромолекул полиаланина из на поверхности фуллерена С720 при различных значениях водородного показателя. Видно, что при рН=7 профиль радиального распределения концентрации атомов полипептидов значительно уже, чем при рН=11, но при этом пик радиального распределения имеет значительно большую величину. При рН=11 ширина профиля радиального распределения концентрации атомов макромолекул определяется длиной вытянутых от поверхности макроцепей полиаланина.

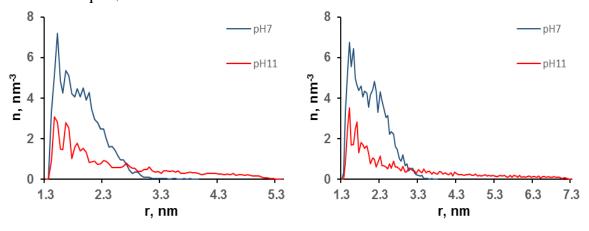


Рис. 3. Средние радиальные зависимости концентрации атомов макромолекул полиаланина из 10 (A) и 15 (Б) звеньев на поверхности фуллерена С720 при различных значениях водородного показателя

Таким образом, по результатам МД-моделирования макромолекул полиаланина на поверхностях однослойной углеродной нанотрубки и фуллерена видно, что при изменении водородного показателя до значений, при которых макроцепь становится сильно заряженным полиэлектролитом, происходят значительные изменения конформационной структуры.

Список литературы

- 1. Chiu, Y. A dual-emission Förster resonance energy transfer nanoprobe for sensing/imaging pH changes in the biological environment / Y. Chiu, S. Chen, J. Chen, K. Chen, H. Chen, H. Sung // ACS Nano. 2010. V. 4(12). P. 7467–7474.
- 2. Kumar, S. Zhao Surface-Grafted Stimuli-Responsive Block Copolymer Brushes for the Thermo-, Photo- and pH-Sensitive Release of Dye Molecules / S. Kumar, Y.L. Dory, M. Lepage, Y. Zhao // Macromolecules. 2011. V. 44(18). P. 7385–7393.
- 3. Wu, Y. pH-Responsive Quantum Dots via an Albumin Polymer Surface Coating / Y. Wu, S. Chakrabortty, R.A. Gropeanu, J. Wilhelmi, Y. Xu, K. Shih Er, S.

- Ling Kuan, K. Koynov, Y. Chan, T. Weil // Journal of the American Chemical Society. 2010. V. 132(14). P. 5012-5014.
- 4. Jhon, Y.K. Formation of Polyampholyte Brushes via Controlled Radical Polymerization and Their Assembly in Solution / Y.K. Jhon, S. Arifuzzaman, A.E. Özçam, D. J. Kiserow, J. Genzer // Langmuir 2012 28 (1), 872-882
- 5. Han, X. Thermo-/pH-responsive behaviours of base-rich diblock polyampholytes in aqueous solution: experiment and simulation / X. Han, J. Feng, F. Dong, X. Zhang, H. Liu, Y. Hu // Molecular Physics. 2014. V. 112(15). P. 2046-2057.
- 6. Yang, P. Molecular dynamics simulations of PAMAM dendrimer-encapsulated Au nanoparticles of different sizes under different pH conditions / P. Yang, S. Ju, Y. Chuang, H. Chen // Computational Materials Science. 2017. V. 137.- P. 144-152
- 7. 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.
- 8. Кручинин, Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование адсорбции полипептидов с фотоактивными молекулами поверхностью углеродной нанотрубки / Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко // Хим. физика и мезоскопия. 2016. T. 13. N 2. C. 225.
- 9. 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. P. 1781-1802.
- 10. 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.
- 11. Zhu, F. Water and Proton Conduction through Carbon Nanotubes as Models for Biological Channels / F. Zhu, K. Schulten // Biophysical Journal Volume. 2003. V. 85. P. 236-244.
- 12. 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. P. 671-690.
- 13. 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. – V. 33. – P. 2451-2468.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА АДСОРБЦИИ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОГО НАНОСТЕРЖНЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ ПЛАЗМОННОГО УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССАМИ

Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор Центр лазерной и информационной биофизики, Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Золотые наночастицы и наностержни, покрытые полимерными цепями, широко применяются в биомедицинских исследованиях, а также в различных сенсорах основе эффекта например, В на гигантского комбинационного рассеяния [1-4] или датчике молекулярного (в том числе синглетного) кислорода [5-6]. В качестве такой гибридной наносистемы может быть использован золотой наностержень (нанопровод), котором Особый интерес адсорбирована макромолекула полипептида. вызывает использование полиамфолитных полипептидов, заряженные аминокислотные остатки которых могут являться центрами адсорбции молекул органических красителей, находящихся в растворе в ионной форме [6-7]. Поэтому большое значение имеет изучение конформационной структуры полиамфолитных полипептидов с учетом характера расположения заряженных звеньев на поверхности золотого наностержня.

Радиальные распределения концентрации атомов полипептида, рассчитанные по результатам моделирования методом молекулярной динамики на поверхности адсорбента, могут аппроксимироваться радиальными зависимостями, которые получены для идеальной макромолекулы с гауссовым распределением звеньев на основе специальной математической модели конформационной структуры полимера методами статистической теории макромолекул [6-7].

Поэтому было произведено молекулярно-динамическое моделирование (МД-моделирование) для трех разных полипептидов на поверхности золотого наностержня радиусом R=2.5 нм:

- 1) A80R10D10 полипептид, состоящий из 80 звеньев ALA, по цепи которого равномерно распределены 10 звеньев ARG и 10 звеньев ASP;
- 2) A60R20D20 полипептид, состоящий из 60 звеньев ALA и равномерно распределенных попарно 20 звеньями ARG и 20 звеньями ASP;
- 3) A92R4D4 полипептид, состоящий из 92 звеньев ALA и равномерно распределенных попарно 4 звеньями ARG и 4 звеньями ASP.

В стартовой конфигурации полипептид находился около поверхности золотого наностержня, свернутый в неравновесную клубковую структуру – три разные стартовые позиции клубка для каждого полипептида.

МД-моделирование производилось с использованием программного комплекса NAMD 2.12 [8] при постоянной температуре 300 К с шагом по времени 0.001 пс в воде в течение 15 нс. Данного времени было достаточно для

получения равновесных конформаций полипептидов. Для контроля получения равновесных конформаций осуществлялось наблюдение за изменением среднеквадратичного расстояния между атомами полипептида в различных конформациях (RMSD). Использовалось силовое поле CHARMM22 [9]. Взаимодействие с золотым наностержнем описывалось потенциалом Леннард-Джонса (потенциал 6-12), разработанным в работе [10]. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1.2 нм с помощью функции сглаживания между 1.0 и 1.2 нм. Электростатические взаимодействия рассчитываются непосредственно на расстоянии 1.2 нм, для более дальних дистанций использовался метод частица—сетка Эвальда (РМЕ) [11] с шагом сетки 0.11 нм.

По результатам МД-моделирования на конечном стационарном участке траектории по полученным конформациям рассчитывалось среднее радиальное распределение концентрации атомов макромолекулы на поверхности наностержня с дифференциацией по типам звеньев. По полученным средним на конечном стационарном участке распределениям концентрации атомов из разных стартовых клубков для каждого полипептида рассчитывалось полное среднее радиальное распределение.

Для каждого полипептида без различия по типам звеньев проводилась аппроксимация полного среднего радиального распределения концентрации атомов формулами, полученными методами статистической теории макромолекул [5-7].

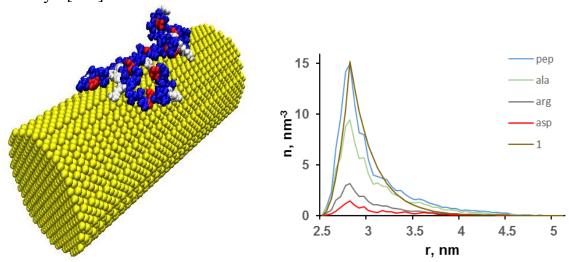


Рисунок 1 — Макромолекула A80R10D10 (A) на поверхности золотого наностержня после МД-моделирования (синим цветом изображены звенья ALA, белым — ARG, красным - ASP) и средние радиальные зависимости концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев (Б) (рер — средняя радиальная зависимость концентрации атомов по всем атомам полипептида; ala, arg и asp - средние радиальные зависимости концентрации атомов по типам аминокислотных остатков; цифрой 1 — обозначена аппроксимирующая кривая)

Было произведено МД-моделирование для каждого полипептида из трех разных стартовых клубков на поверхности золотого наностержня. Во всех случаях происходила адсорбция полипептидов. На рисунках изображены одни из результатов МД-моделирования полипептидов A80R10D10 (рис. 1A), A60R20D20 (рис 2A) на поверхности золотого наностержня через 15 нс. Были получены полные средние радиальные зависимости концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев (рис. 1Б и 2Б). Согласно формулам, полученым методами статистической теории макромолекул, были построены аппроксимирующие кривые (рис. 1Б и 2Б) к распределениям средней радиальной концентрации атомов полипептида без различия по типам звеньев. Аналогичные результаты были получены и для полипептида А92R4D4 (рис. 3).

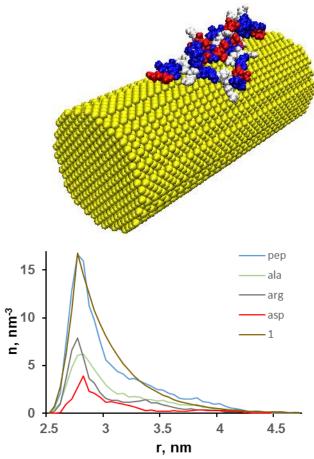


Рисунок 2 — Макромолекула A60R20D20 (A) на поверхности золотого наностержня после МД-моделирования и средние радиальные зависимости концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев (Б)

Как видно из рисунков средние радиальные зависимости концентрации атомов полипептида A80R10D10 (рис. 1Б), A60R20D20 (рис. 2Б) и A92R4D4 (рис. 3Б) хорошо аппроксимируется формулами, полученными методами статистической теории макромолекул, а средние радиальные зависимости концентрации атомов по отдельным звеньям схожи с профилем радиальной концентрации всего полипептида. Различия в значениях концентрации атомов

по типам звеньев обусловлены как разным количеством звеньев в макроцепи, так и количеством атомов в различных аминокислотных остатках (24 атома ARG, 12 атомов ASP и 10 атомов ALA).

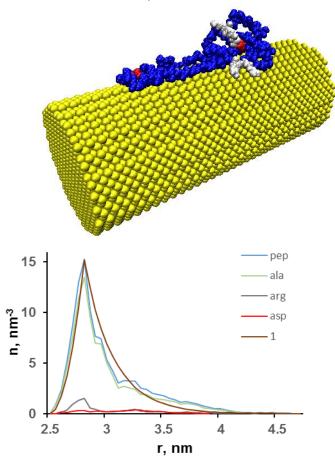


Рисунок 3 — Макромолекула A92R4D4 (A) на поверхности золотого наностержня после МД-моделирования и средние радиальные зависимости концентрации атомов полипептида с дифференциацией по типам звеньев (Б)

Такие структуры можно использовать при создании люминесцентнооптического измерителя концентрации молекулярного (в том числе – синглетного) кислорода, а также в датчиках на основе эффекта поверхностного плазмонного резонанса или эффекта гигантского комбинационного рассеяния.

Влияние плазмонных мод наноцилиндра на адсорбционные свойства и конформационную динамику полипептидов

Возбуждение В наноцилиндре, плазмонных МОД существенно различающихся как по типу (симметрии), так и по частотам, может оказывать значительное влияние и на процессы адсорбции-десорбции макроцепей полиамфолитов [12]-[14], и на процессы конформационных перестроек опушечного слоя. Но если эффект усиления-ослабления притяжения звеньев к поверхности цилиндра будет заметным при активации высокочастотных плазмонных мод – в диапазоне частот плазмонного резонанса, то инициация конформационных переходов макроцепи вблизи наностержня становится возможной лишь при возбуждении в нем СВЧ-мод. В последнем случае следует говорить не о плазмонном резонансе (как будет показано далее, резонанса как такового и нет), а о плазмонной активации конформационной подвижности фрагментов полипептида.

Необходимо отметить, что немаловажную роль в случае СВЧ-мод, и просто определяющую — в случае проявления в адсорбции плазмонного резонанса играет специфика кривизны цилиндрической поверхности проводника. Напряженность локального поля вблизи этой поверхности многократно превышает напряженность поля в отсутствие наноцилиндра на резонансных частотах и заметно увеличивается в некоторой области за счет деформации однородной картины в случае низких частот.

Модификация адсорбционных свойств полипептидов в локальном поле на частотах плазмонного резонанса. Будем рассматривать два характерных случая активации высокочастотных плазмонных мод в цилиндре: а) при цилиндра поперечной относительно ориентации оси *Z*. вектора $\mathbf{E}_{out}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$ внешнего однородного монохроматического (на частоте ω) поля, вызывающего вынужденные колебания поверхностной плотности заряда локализованные плазмоны; б) квазиодномерные поверхностные плазмоны, распространяющиеся вдоль z.

В случае физической адсорбции характерная энергия притяжения звена макромолекулярной цепи отстоящего от поверхности цилиндра на расстоянии δr может быть оценена в единицах тепловой энергии kT как [15]

$$U(\delta r) = -\frac{kT}{8\delta r^3} \sum_{n} \alpha_{jk} (i\omega_n) (3n_k n_l - \delta_{kl}) \eta_{lj} \frac{\varepsilon_1 (i\omega_n) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 (i\omega_n) + \varepsilon_2},$$

где $\eta_{lj}=2\delta_{3l}-\delta_{lj}$ - диагональный тензор, $\alpha_{jk}(\omega)$ - тензор дипольной (d) динамической электронной поляризуемости мономера цепи

$$\alpha_{jk}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \sum_{n} \frac{\omega_{n0} \operatorname{Re}\left[\left\langle 0 \mid \widehat{\mathcal{E}}_{j} \mid n \right\rangle \left\langle n \mid \widehat{\mathcal{E}}_{k} \mid 0 \right\rangle\right] - \omega \operatorname{Im}\left[\left\langle 0 \mid \widehat{\mathcal{E}}_{j} \mid n \right\rangle \left\langle n \mid \widehat{\mathcal{E}}_{k} \mid 0 \right\rangle\right]}{\omega_{n0}^{2} + \omega^{2}} .$$

Модификация выражения для характерной энергии адсорбции в случае поверхности металла дает следующий результат (f_{0n} - сила осциллятора электронного перехода $0 \rightarrow n$) [15]

$$U(\delta r) = -\frac{\hbar \omega_{res}^2}{8\delta r^3} \sum_{n} \frac{e^2 f_{0n}}{m \omega_{0n}} \frac{\omega_{res}}{\omega_{0n} + \omega_{res}}.$$

В случае а) напряженность квазистатического поля вне цилиндра, т.е. при r > R и помещении его в поле \mathbf{E}_0 имеет вид [16]

$$\mathbf{E}_{2}(r,\varphi) = E_{0}\mathbf{n}_{x} + E_{0}\frac{\varepsilon_{1}(\omega) - \varepsilon_{2}}{\varepsilon_{1}(\omega) + \varepsilon_{2}}\frac{R^{2}}{r^{2}} \Big[(1 - 2\sin^{2}\varphi) \cdot \mathbf{n}_{x} + \sin 2\varphi \cdot \mathbf{n}_{y} \Big].$$

$$\tag{1}$$

В случае б) — делокализованных квазиодномерных плазмонов компоненты вектора напряженности поля вне нанопровода (r > R) имеют вид [18]

$$E_{r} = \sum_{n} \left(a_{n} \frac{ik_{z}}{q_{2}} \frac{d}{d(q_{2}r)} H_{n}^{(1)}(q_{2}r) - b_{n} \frac{\omega_{n}(k_{z})n}{q_{2}^{2}r} H_{n}^{(1)}(q_{2}r) \right) \exp[i(k_{z}z + n\varphi - \omega t)],$$
(2)

$$E_{\varphi} = -\sum_{n} \left(a_{n} \frac{nk_{z}}{q_{2}^{2} r} H_{n}^{(1)}(q_{2}r) + b_{n} \frac{i\omega_{n}(k_{z})}{q_{2}} \frac{d}{d(q_{2}r)} H_{n}^{(1)}(q_{2}r) \right) \exp[i(k_{z}z + n\varphi - \omega t)],$$
(3)

$$E_{z} = \sum_{n} a_{n} H_{n}^{(1)}(q_{2}r) \exp[i(k_{z}z + n\varphi - \omega t)].$$
(4)

Здесь в (2)-(4) $H_{_n}^{_{(1)}}(\rho)$ – функции Ханкеля первого рода, k_z – продольное волновое число, a_n , b_n – константы. Волновые $q_{_{1,2}}=i\sqrt{k_{_z}^2-(\omega/c)^2}arepsilon_{_{1,2}}(\omega)=i\kappa_{_{1,2}}$ становятся чисто мнимыми величинами при $k_z > (\omega/c) \sqrt{arepsilon_{\rm I,2}(\omega)}$ и определяют затухание амплитуды напряженности поля по нормали к поверхности нанопроволоки. Тогда функции Ханкеля $H_n^{(1)}(\rho)$ Бесселя представить через функции мнимого аргумента $K_n(\rho) = i(\pi/2) \exp(i(\pi n/2)) H_n^{(1)}(\rho)$. Диэлектрическая проницаемость металла $\varepsilon_{\scriptscriptstyle \perp}(\omega)$ обладает сильной частотной дисперсией, в отличие от диэлектрической постоянной среды ε_2 , окружающей нанопроволоку, c – скорость света в вакууме. Частоты продольных поверхностных плазмонов $\omega_n(k_z)$ определяются из решения дисперсионного уравнения [18]

$$\frac{n^2 k_z^2 c^2}{\omega_n^2(k_z) R^2} \left(\frac{1}{\kappa_z^2} - \frac{1}{\kappa_1^2} \right)^2 = \left(\frac{1}{\kappa_z} \frac{K_n' \, \mathcal{L}_2 R}{K_n \, \mathcal{L}_2 R} \right) \frac{1}{\kappa_1} \frac{I_n' \, \mathcal{L}_1 R}{I_n \, \mathcal{L}_1 R} \right) \left(\frac{\varepsilon_z}{\kappa_z} \frac{K_n' \, \mathcal{L}_2 R}{K_n \, \mathcal{L}_2 R} \right) \frac{I_n' \, \mathcal{L}_1 R}{\kappa_1}$$

2855

где $I_n(\rho)$ - функции Бесселя первого рода мнимого аргумента. Однако в квазистатическом приближении, коэффициенты $\kappa_{1,2} \to k = |k_z|$, и утрачивают зависимость от частоты. Учитывая, что в модели Друде $\varepsilon_1 = \varepsilon_\infty - \omega_{pl}^2/\omega^2$, из (5) следует [19]

$$\omega_n^2(k) = \omega_{pl}^2 \left(\varepsilon_{\infty} + \varepsilon_2 \frac{I_n \langle R \rangle K_{n-1} \langle R \rangle + K_{n+1} \langle R \rangle}{K_n \langle R \rangle} I_{n-1} \langle R \rangle + I_{n+1} \langle R \rangle^{-1} \right).$$
 (6)

Для осесимметричной TM_0 -моды поверхностных плазмонов (n=0) закон дисперсии (6) принимает форму

$$\omega_0(k) = \frac{\omega_{pl}}{\sqrt{\varepsilon_{\infty} + \varepsilon_2 f(kR)}}, \quad f(kR) = \frac{K_1(kR)I_0(kR)}{K_0(kR)I_1(kR)}, \tag{7}$$

и становится практически неотличимым от (5) для наноцилиндров малого радиуса. В асимптотике $kR \to \infty$ получаем $f(kR) \to 1$ и $\omega_0(\infty) = \omega_{pl} / \sqrt{\varepsilon_\infty + \varepsilon_2}$, как в случае локализованного плазмонного резонанса (1).

Инициация конформационных переходов макроцепи локальным *СВЧ-полем*

Уменьшение частоты поля на 5-6 порядков, т.е. переход в диапазон $\omega \sim 0,1 \div 1$ ГГц резко изменяет характер отклика макроцепной структуры металлополимерного композита на действие поля. По-прежнему будем анализировать и поле поперечных мод локализованных плазмонов (1), и поле (2)-(4) квазиодномерных поверхностных плазмонов с дисперсионным законом (7). В диапазоне СВЧ выполняется сильное неравенство $\omega_{pl}^2/\omega^2 >> \varepsilon_2, \varepsilon_\infty$. По этой причине фактор усиления локального поля $L(\omega) = [\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2]/[\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2],$ обеспечивающий яркий эффект плазмонного резонанса имеет, теперь, нулевой порядок $L(\omega) \sim 1$. Тем не менее, перераспределение модуля напряженности в локальном поле имеет место в пределах величин одного порядка. Так, при $\varphi = 0, \pi$ из (1) получаем вблизи поверхности цилиндра $E_{2x} \approx 2E_0$, а при $\varphi = \pm \pi/2$ уже $E_{2x} \approx 0$, т.е. ощутимое изменение напряженности локального поля.

Для осесимметричной TM_0 -моды поверхностных плазмонов с законом дисперсии (7) низкочастотный участок приходится на длинноволновую асимптотику $kR \to 0$, и тогда из (17) получаем $\varepsilon_z f(kR) >> \varepsilon_{\infty}$ потому что $(kR)^2 \ln(kR) \xrightarrow[kR \to 0]{} 0$ и тогда $\omega_0(k) \xrightarrow[kR \to 0]{} k_z c / \sqrt{\varepsilon_2}$. Например частоте $\omega_0(k) \sim 1$ ГГц отвечает $k \approx 0.03$ см⁻¹ и соответственно величина $kR \approx 3 \cdot 10^{-8}$.

Поле с компонентами напряженности (2)-(4) будет непосредственно воздействовать на заряженные участки фрагментов полиамфолита и

электронейтральные участки с большим статическим дипольным моментом. При соразмерности частот конформационных переходов цепи с частотами поля можно ожидать проявления конформационного резонанса в перестройке макромолекулярной структуры опушечного слоя. Вблизи поверхности наноцилиндра этот эффект должен быть особенно заметным из-за относительно высоких значений амплитуды локальных полей.

Следует отметить, что, безусловно, возможно и вполне ожидаемо неспецифическое влияние СВЧ-поля на десорбцию малых молекул и макроцепей благодаря тепловому эффекту поля. Мы оставляем здесь этот вопрос без детального обсуждения, хотя он, несомненно, должен приниматься во внимание при планировании эксперимента и анализе его результатов.

Таким образом, нанокомпозиты, представляющие собой проводящие цилиндры с полипептидной оболочкой являются перспективными объектами наноэлектроники молекулярной сенсорики И ввиду открывающихся возможностей плазмонного управления структурными характеристиками макромолекулярной опушки таких систем В различных спектральных диапазонах.

Список литературы

- 1. Yan, X. One-pot synthesis of polypeptide-gold nanoconjugates for in vitro gene transfection/ X. Yan, J. Blacklock, J. Li, H. Möhwald // ACS Nano. 2012. V. 6. Is.1. P. 111-117.
- 2. *Mirabbaszadeh*, *K*. Investigation of adsorption of polymers on metallic nanowires: A molecular dynamics study / K. Mirabbaszadeh, E. Zaminpayma // Applied Surface Science. 2012. V. 261. P. 242–246.
- 3. *Yang*, *Y*. Encapsulation of gold nanoparticles into self-assembling protein nanoparticles / Y. Yang, P. Burkhard // Journal of Nanobiotechnology. 2012. V. 10:42.
- *4.* Sisco, P.N. Adsorption of Cellular Proteins to Polyelectrolyte-Functionalized Gold Nanorods: A Mechanism for Nanoparticle Regulation of Cell Phenotype?/ Sisco PN, Wilson CG, Chernak D, Clark JC, Grzincic EM, Ako-Asare K, et al. // PLoS ONE. 2014. V. 9(2): e86670.
- 5. *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.
- 6. *Кручинин*, *Н.Ю*. Молекулярно-динамическое моделирование конформационной структуры полиамфолитов на поверхности золотой наночастицы / Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко // Сибирский физ. журн. 2018. − Т. 18. − № 2. − С. 86-94.
- 7. Кручинин, Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование адсорбции полипептидов с фотоактивными молекулами поверхностью

- углеродной нанотрубки / Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко // Хим. физика и мезоскопия. -2016. Т. 13. № 2. С. 225.
- 8. *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. P. 1781-1802.
- 9. *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.
- 10. *Heinz, H.* Accurate Simulation of Surfaces and Interfaces of Face-Centered Cubic Metals Using 12–6 and 9–6 Lennard-Jones Potentials / H. Heinz, R.A. Vaia, B.L. Farmer, R.R. Naik // J. Phys. Chem. C. 2008. V. 112. Is. 44. P. 17281–17290.
- 11. *Darden, T.* Particle mesh ewald: An n log(n) method for ewald sums in large systems / T. Darden, D. York, L. Pedersen // J. Chem. Phys. 1993. V. 98, P. 10089-10092.
- 12. *Браун, О. М.* Взаимодействие между частицами, адсорбированными на поверхности металлов / О. М. Браун, В. К. Медведев // Успехи физ. наук. 1989. Т. 157. № 4. С. 631-666.
- 13. *Агеев*, *В*. *Н*. Десорбция, стимулированная электронными возбуждениями / В. Н. Агеев, О. П. Бурмистрова, Ю. А. Кузнецов // Успехи физ. наук. 1989. Т. 158. № 3. С. 389-420.
- 14. Браун, О.М. Колебательная спектроскопия адсорбатов / О.М. Браун, А.И. Волокитин, В.П. Жданов // Успехи физ. наук. 1989. Т. 158. № 3. С. 421-450.
- 15. *Бараш, Ю. С.* Силы Ван-дер-Ваальса / Ю. С. Бараш. Москва: Наука. 1988. 344 с.
- 16. *Новотный, Л.* Основы нанооптики / Л. Новотный, Б.Хехт. М.: Физматлит, 2009. 483 с.
- 17. *Климов, В.В.* Наноплазмоника / В.В. Климов. М.: Физматлит. 2009. 480 с.
- 18. *Стрэттон, Дж. А.* Теория электромагнетизма / Дж. А. Стрэттон. Москва- Ленинград : ОГИЗ. 1948 . 540 с.
- 19. *Кучеренко*, *М. Г*. Перенос энергии в цилиндрической наноструктуре, состоящей из металлической жилы и коаксиальной оболочки с молекулами люминофора / М. Г. Кучеренко, Т. М. Чмерева // Журнал приклад. спектр. 2017. -Т. 84. -№ 3. С. 358-367.

ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ МАСТЕРСТВО УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ В КОНТЕКСТЕ ДОСТИЖЕНИЯ ПРЕДМЕТНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ СТАРШЕКЛАССНИКА

Кучеренко М.А., к.пед.н., Белокопытова О.Г., к.пед.н. Оренбургский государственный университет

Расширение теоретической И методической подготовки учителя, повышение уровня его профессионального мастерства – решающее условие предметных результатов обучаемых-выпускников достижения средней (полной) школы, оценка качества которых производится с помощью материалов контрольных измерительных (далее КИМ) едином государственном экзамене по физике. Указанные материалы обеспечивают диагностику освоения на всех таксономических уровнях всех включенных в кодификатор¹ содержательных элементов, проверяет такие предусмотренные способы деятельности, как усвоение понятийного аппарата стандартом² умениями, школьного курса физики, овладение методологическими применение знаний при объяснении физических явлений и решении задач. Кроме того, КИМ-ы опосредованно проверяют умения выпускников работать с информацией физического содержания при использовании различных способов представления информации в текстах в виде таблиц, графиков, схем или схематических рисунков. Отметим, что наиболее важным для успешного продолжения образования в вузе способом деятельности в спецификации КИМ-ов³ заявлено решение задач разного уровня сложности по всем разделам курса физики средней школы.

В связи с этим, Министерством образования Оренбургской области была инициирована программа повышения квалификации учителей физики «Теоретические и практические основы подготовки школьников к единому государственному экзамену по физике», которая рассчитана на 204 часа аудиторной и самостоятельной работы и реализуется в 2018-2019 учебном году на факультете повышения квалификации преподавателей Оренбургского университета. С двумя группами слушателей в количестве 82 учителей физики г. Оренбурга и Оренбургской области работают преподаватели физического факультета университета: доценты кафедры физики и методики преподавания физики (Ф и МПФ) Пискарева Т.И., Узенбаев Ф.Г, Гуньков В.В., Кучеренко М.А.; доцент кафедры радиофизики и электроники (РФ и Э) Русинов А.П.; старшие преподаватели кафедры ФиМПФ Белокопытова О.Г. и Якупов Г.С.; старший преподаватель кафедры РФиЭ Гадаева Э.К.. К этому добавим, что в

² Федеральный компонент государственного образовательного стандарта среднего (полного) полного общего образования по физике, базовый и профильный уровень. 2004г.

¹ Кодификатор элементов содержания и требований к уровню подготовки выпускников образовательных организаций для проведения единого государственного экзамена по физике. 2018г.

³ Спецификация контрольных измерительных материалов для проведения в 2019 году единого государственного экзамена по физике.

совместном сотрудничестве преподавателей факультета и учительского сообщества решается и задача привлечения выпускников к поступлению на направления подготовки бакалавров, реализуемых в университете (03.03.02) 03.03.03 Радиофизика; 12.03.04 Биотехнические системы технологии), к олимпиадной (Межрегиональная олимпиада Нижегородского «БИБН»; Евразийская многопрофильная университета олимпиада старшеклассников «Поиск») И учебно-исследовательской деятельности (секция «Университетские школьников школы» В рамках научной конференции студентов).

Доминантной целевой установкой в рабочей программе повышения квалификации и в совместной взаимообусловленной учебной деятельности со слушателями является повышение профессионального мастерства учителя физики посредством совершенствования ключевого способа деятельности – решения задач повышенного и высокого уровня сложности с опорой на ключевые «проблемные зоны», выявленные в методических рекомендациях для учителей, подготовленных на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2018 года.

В целях коррекции структурно-содержательных элементов учебных занятий, на начальном этапе работы, мы провели анкетирование, позволяющее представить «портрет слушателя» с точки зрения практики физического образования в конкретном учебном заведении города или области. Выбранные результаты анкетирования представлены в таблице 1.

Таблица 1 - Результаты анкетирования слушателей программы ФПКП – учителей физики

| Пункты анкеты | Данные по ответам слушателей,% | |
|----------------------------|---|--|
| 1. Ваш педагогический стаж | До 10 лет – 16 | |
| | От 11 до 20 лет – 26 | |
| | От 21 до 30 лет и выше – 58 | |
| 2. Ваша недельная учебная | До 10ч. – 6 | |
| нагрузка | От 11 до 20ч. – 55 | |
| | От 30ч. и выше – 31 (из них 31-37ч. – 4%) | |
| 3.Ваша учебная | 7 класс: 2ч. – 94; 4ч. – 6 | |
| недельная нагрузка по | 8 класс: 2ч. – 91; 3ч. – 3; 4ч. – 6 | |
| классам | 9 класс: 2ч. – 58; 3ч. – 36; 4ч. – 6 | |
| | 10 класс: 2ч. – 77; 3ч. – 6; 4ч. – 3; 5ч. – 11; 7ч. – 3 | |
| | 11 класс: 2ч. – 75; 3ч. – 16; 4ч. – 3; 5ч. – 3; 7ч 3 | |
| 4. Оцените по 10- | 1 Обеспеченность в демонстрационном | |
| балльной шкале | оборудовании: 0 - 5б. – 64; 6-10б36 | |
| обеспеченность Вашего | 2 Обеспеченность в лабораторном | |
| учебного процесса по | оборудовании: 0-5б 64; 6-10б. – 16 | |
| физике в: 1-демонстра- | 3 Обеспеченность в проекторе и компьютере: | |
| ционном оборудовании; 2- | 0-5б. – 16; 6-10б. – 84 | |
| лабораторном оборудо- | 4 Обеспеченность в дидактических материалах: | |

| вании; 3 – проекторе и | 0-56. – 22; 6-106. – 78 | |
|---------------------------|--|--|
| компьютере;4- дидакти- | 0 30. 22, 0 100. 70 | |
| 1 ' | | |
| ческих материалах | | |
| 5. Сколько часов в | Не занимаюсь подготовкой учащихся на | |
| неделю Вы занимаетесь | дополнительных занятиях – 6 | |
| подготовкой учащихся к | 1ч. – 20 | |
| ЕГЭ на дополнительных | 2ч. – 41 | |
| занятиях в школе? | 3ч. – 20 | |
| | 4ч. – 13 | |
| 6. Количество | Не сдают ЕГЭ в 2018-2019 у.г. – 17 | |
| учащихся, планирующих | От 1 до 4 учащихся – 61 | |
| сдавать ЕГЭ по физике в | От 7 до 13 учащихся - 22 | |
| 2019 г. В Вашем ОУ | | |
| 7. Сколько в среднем | Изучение теории: | |
| часов в неделю Вы тратите | 0-5ч. – 76 | |
| на различные виды | 6-20ч. – 24 | |
| подготовки к учебным | Решение задач: | |
| занятиям: 1. изучение | 0-5ч. — 79 | |
| теории; 2. решение задач; | 6-20ч. – 21 | |
| 3. подготовку демонстра- | Подготовка демонстрационного эксперимента: | |
| ционного эксперимента | 0-5ч. — 90 | |
| 1 | 6-10ч. — 10 | |

Анализ результатов анкетирования слушателей программы повышения квалификации позволяет заключить, что:

- 1. Высокий процент (примерно 58%) учителей физики, имеющих стаж педагогической деятельности более 30 лет, объективно ориентирован на традиционные приемы, формы и методы обучения, а также способы представления учебного материала в основном в виде линейных структур. Учитель затруднен в организации формирования умений самостоятельной познавательной деятельности школьников по получению новых теоретических знаний, их осмыслению и первичному закреплению.
- 2. Примерно 4% опрашиваемых указали на значительную недельную нагрузку, что позволяет предположить возможность самообразования учителя в направлении освоении нового содержания и способов деятельности повышенного и высокого уровня сложности. Кроме того, для большой группы учительского сообщества существуют условия развития проектно-исследовательского и олимпиадного направления деятельности в своей школе за счет перепланировки количественных и качественных особенностей своей предметной самоподготовки.
- 3. Недельная нагрузка изучения дисциплины «Физика» (преобладает 2ч. в неделю в выпускном классе: базовая подготовка обучаемого) не позволяет учителю, как показывает практика, в рамках урока подготовить школьника к

успешной сдаче ЕГЭ, а именно к выполнению заданий 25-32 КИМов ЕГЭ, что должно, очевидно, способствовать поиску новых дидактических приемов и форм учебной работы.

- 4. Ответы анкетируемых указывают на то, что, испытывая недостаток в лабораторном и демонстрационном оборудовании, учитель по объективным причинам не может отказаться от «меловой физики», а, значит, существует проблема в формировании методологических умений школьников в реальном учебно-практическом исследовании.
- 5. Следует констатировать, что количество выпускников, выбравших ЕГЭ по физике в 2019 г., невелико, что, как очевидно, создаст в ближайшее время проблемы по обеспечению абитуриентами вузов г.Оренбурга и Оренбургской области, созданию новых инженерно-научных кадров региона.

В дополнении к анкете, в целях оценки качества предметных умений учителя физики, нами была проведена диагностическая контрольная работа, задания 25-32 демонстрационного варианта ЕГЭ по включающая только физике 2019г. Заметим, что задания 25-27 относятся к заданиям повышенного уровня с кратким ответом и направлены на проверку умения использовать понятия и законы физики для анализа различных процессов и явлений, умения решать задачи на применение одного-двух законов (формул) по какой-либо из тем школьного курса физики и оцениваются 1 баллом. В свою очередь, задания 28-32 являются заданиями высокого уровня сложности, проверяют умение использовать законы и теории сразу из 2-3-х разделов физики в измененной или новой ситуации и оцениваются 3 баллами. Анализ выполнения контрольной работы группой 1 (выполняли 34 слушателя программы, реализуемой на базе Орского государственного технологического института (ОГТИ)0 и группой 2 (выполняли 37 слушателей программы, реализуемой на базе ОГУ) по выбранным критериям приведен в таблице 2.

Таблица 2 – Результаты входной контрольной работы в формате ЕГЭ

| № здания (№ | Результаты выполнения контрольной работы,% | |
|-----------------------------|--|----------------------------|
| задания в КИМ-ах ЕГЭ) | Группа 1 | Группа 2 |
| 1(25) | Выполнили верно: 1б. – 91. | Выполнили верно: 1б. – 57. |
| | Выполнили неверно -9 | Выполнили неверно -40. |
| | | Не приступили |
| | | к выполнению - 3 |
| 2(26) | Выполнили верно: 1б. – 60. | Выполнили верно: 1б. – 24. |
| | Выполнили неверно -32. | Выполнили неверно -68. |
| | Не приступили | Не приступили |
| | к выполнению - 8 | к выполнению - 8 |
| 3(27) | Выполнили верно: 1б. – 89. | Выполнили верно: 1б. – 78. |
| | Выполнили неверно 0б 3. | Выполнили неверно 0б 11. |
| | Не приступили | Не приступили |

| | к выполнению – 8. | к выполнению– 11. |
|-------|------------------------|-------------------|
| | Не приступили | Не приступили |
| 4(28) | к выполнению - 53 | к выполнению - 57 |
| | 0б. – 6 | 0б. – 5 |
| | 1б – нет | 16 – 19 |
| | 26. –15 | 26. –5 |
| | 36 26 | 26. –3 36 14 |
| | | |
| | Не приступили | Не приступили |
| | к выполнению - 24 | к выполнению - 41 |
| 5(29) | 06. – 3 | 06. – 19 |
| | 16 – 29 | 16 – 24 |
| | 26. – 29 | 26. – 3 |
| | 36 15 | 36 14 |
| | Не приступили | Не приступили |
| 6(30) | к выполнению - 29 | к выполнению - 87 |
| | 06 6 | 0б. – 5 |
| | 16 – 32 | 16-5 |
| | <i>26.</i> − <i>24</i> | <i>2б.</i> – нет |
| | <i>36.</i> – <i>9</i> | <i>36.</i> − 3 |
| 7(31) | Не приступили | Не приступили |
| | к выполнению: 76 | к выполнению: 78 |
| | 0б. – 15 | 0б. – 14 |
| | 16 – 3 | 16 - 5 |
| | 2б. – нет | <i>2б.</i> – нет |
| | 36. – 6 | <i>36.</i> − 3 |
| | Не приступили | Не приступили |
| | к выполнению: 88 | к выполнению: 86 |
| 8(32) | 0б. – нет | 0б. – 8 |
| | 1б – нет | 16 – 3 |
| | 26. – 6 | 2б. – нет |
| | 36 6 | 36 3 |
| | | |

В дополнение к количественным данным по выполнению контрольной работы приведем некоторые замечания, касающиеся существенных качественных характеристик выполнения ее слушателями:

- 1. В части работ (примерно в 30% случаев) при решении заданий высокого уровня сложности №28-32 отсутствуют рисунки как элементы решения, необходимые для детального понимания предложенной физической ситуации.
- 2. При описании физической модели отсутствует четкая логическая структура и обоснование приложения выбранного закона или принципа в заданных условиях задач.

3. Результаты выполнения контрольной работы коррелируют ЕГЭ по физике в 2018г.: выполнения выпускниками приоритет механики и более низкие результаты прослеживается молекулярной физике и электродинамике; наиболее сложным заданием оказалась задача на соединение конденсаторов; при решении качественной задачи только 6% выделили все необходимые логические шаги, построили объяснение для каждого логического шага и четко сформулировали ответ на поставленный в задаче вопрос.

Вследствие этого, обобщая методические рекомендации для учителей, подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2016-2018 гг. и собственные разработки сотрудников физического факультета, мы приводим перечень методических средств, которые, на наш взгляд, могут повысить эффективность работы учителя и учащихся в урочной и внеурочной деятельности по освоению дисциплины. К таким методическим средствам относятся:

- 1. Организация профильных физико-математических классов или специальных групп в классе.
- 2. Создание системы *индивидуальных планов* для обучающихся, выбравших физику для продолжения образования, включая сюда и дистанционную форму обучения.
- 3. Использование в процессе повторения и подготовки к ЕГЭ методов дифференциации в обучении посредством выделения групп учащихся с различным уровнем подготовки: при работе с Г1 сосредоточиться на базовом курсе физики, особо выделяя наиболее значимые элементы; для работы с Г2 повторение всех элементов курса физики на базовом уровне следует сочетать с дополнительной математической подготовкой; для Г3 необходимо акцентировать формирование умения решать типовые расчетные задачи повышенного уровня сложности и выбирать посильные для решения задачи высокого уровня сложности; для Г4 акцентом должно стать решение задач с неявно заданной физической моделью, в которых необходимо требовать обоснование хода решения [1].
- 4. Отказ от принципа *«заучить как можно больше решений типовых задач»* и реализация такого, например, алгоритма деятельности: первоначально совместный с учителем разбор в классе наиболее сложной задачи, а далее работа в группах учащихся по самостоятельной выработке плана решения более простых задач-частных случаев сложной.
- 5. Включение на каждом уроке *качественных задач:* от простых вопросов, требующих «одношаговых» ответов до сложных задач, требующих многоступенчатых обоснований на основании нескольких законов или явлений. Использование при этом как письменных форм ответов, так и устных.
- 6. Усовершенствование тематического планирования с перераспределением части времени, отведенного на механику, электродинамику («Электромагнитные колебания и волны», «Оптика»), на молекулярную и квантовую физику.

- 7. Проведение *реальных опытов и демонстраций* (отказ от «меловой физики») с набором оборудования, в котором учитывается избыточность элементов по сравнению с их необходимым количеством [2].
- 8. Использование Открытого банка ЕГЭ для выбора *обучающих заданий комплексного характера* в рамках повторительно-обобщающих уроков и подготовки к экзаменам.
- 9. Целесообразный выбор обучающих заданий, требующих анализа отдельных характеристик процесса. При этом важно, чтобы в описании одного и того же процесса были использованы различные способы представления информации (словесный, табличный, графический или при помощи схем и схематичных рисунков).
- 10. Избегание в поурочных дидактических материалах однотипных формулировок заданий при отработке одного и того же элемента содержания или способа действия. Необходимо использовать задания с различными текстами, с наличием лишних или недостающих данных. Результатом такого выбора является создание условий для эффективного обучения чтению и осмыслению условия задачи, адекватного выбора модели обоснованности суждений [3].
- 11. Использование Открытого банка ЕГЭ для создания учителем собственного систематизированного фонда заданий, что позволит посредством самостоятельного выбора целостно представить систему планируемых результатов обучения в различных тематических разделах дисциплины.
- 12. Создание когнитивных кари и систематики задач по теме или разделу [4,5].
- 13. Использование *технологии работы в малых группах сотрудничества* из 3-5 человек (для учащихся со средним уровнем подготовки), для которой характерны, в частности:
- 1. Четкая формулировка задач, которые должны быть понятны и осознанны всеми членами группы.
 - 2. Оказание своевременной помощи при затруднении.
- 3. Грамотная организация оценки деятельности как группы в целом, так и каждого участника.
 - 4. Организация рефлексии.

При этом группы могут формироваться как из учащихся с различным уровнем подготовки (для изучения нового материала), так и из учащихся одинакового уровня подготовки (для закрепления необходима подготовка дифференцированных заданий для различных групп).

Обратим внимание на то, что учебная деятельность в малых группах сотрудничества обеспечивает использование приема активного самостоятельного обучения на основе разработки учителем промежуточных планируемых результатов (тематических или на законченный блок уроков), а именно четкое целеполагание: что школьники должны выучить на ближайшие

несколько уроков; какие задания должны научиться делать; как это будет проверяться и оцениваться (критерии оценивания результата) [6,7].

- 14. Использование *технологии «перевернутого обучения»*, включающей следующие ключевые этапы:
- Первый этап: учащиеся с высоким уровнем подготовки самостоятельно изучают новый материал с помощью учебников, он-лайн технологий, специально подготовленных учебных материалов для самостоятельной работы.
- Второй этап: на уроке выполняется деятельность более высокого уровня (учебно-исследовательская; решение качественных и расчетных задач повышенного и высокого уровня сложности).

При этом при организации обучения решению задач учащихся с высоким подготовки «лесенке усложнения» задач должна различающихся предусмотрена вариация заданий, как ПО сложности (использование изученного деятельности алгоритма решения комбинирование различных изученных алгоритмов; выбор собственного алгоритма решения), так и по контексту (типовые учебные ситуации, с которыми учащиеся уже встречались и в которых используются явно заданные модели; измененные ситуации, в которых необходимо увидеть и обосновать выбор физической модели, вводить дополнительные обоснования в решении; новые ситуации, предполагающие серьезную деятельность физических процессов и самостоятельный выбор физической модели для решения задачи) [8,9].

Приведенный выше арсенал методических средств может дополнить собственный практический опыт учителя и стать основой освоения выпускниками способов деятельности и элементов содержания фундаментального курса физики средней школы.

Список литературы

- 1. Методические рекомендации для учителей. Подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2017 года [Электронный ресурс] Режим доступа: http://www.fipi.ru. 23.12.18.
- 2. Методические рекомендации для учителей. Подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2016 года [Электронный ресурс] Режим доступа: http://www.fipi.ru. 23.12.18.
- 3. Методические рекомендации для учителей. Подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2018 года [Электронный ресурс] Режим доступа: http://www.fipi.ru. 23.12.18.
- 4. Кучеренко, М.А. Средства методической подготовки учителя физики на курсах повышения квалификации университета [Электронный ресурс] / М.А. Кучеренко, М.Н. Перунова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции. Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2016. С. 1211-1219.

- 5. Кучеренко, М.А. Практика совершенствования физикоматематического образования учителей и учащихся (на примере Оренбургской области) /М.А. Кучеренко, А.Г. Четверикова // Вестник Оренбургского университета. 2018/ N213. C.36-42.
- 6. Кричевский, Р.Л. Психология малой группы: теоретический и прикладной аспект /Р.Л. Кричевский, Е.М. Дубовская . М.:МГИУ, 1991. 360с.
- 7. Баранова, Н.М. Инновационные технологии: обучение в малых группах по методике сотрудничества /Н.М. Баранова, А.А. Змушко// Вестник РУДН, серия Вопросы образования: языки и специальность. − 2008. №3. − С.92-96.
- 8. Курвитс, М. Модель «Перевернутый класс». Что переворачиваем?/ М.Курвитс, Ю.Курвитс // Управление школой. 2014. №7/8. С.38-40.
- 9. Ремизова, Е.Г. Реализация методики смешанного обучения по модели «перевернутый класс» на уроках информатики [Электронный ресурс] / Режим доступа: http://mskito.edu.ru/2014/section/229/94840. -24.12.18.

ПЛАЗМОННАЯ АКТИВАЦИЯ И ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ТОЛУОЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ПОЛИФЕНИЛЕНВИНИЛЕНА ОДНО- И ДВУСТЕННЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент Центр лазерной и информационной биофизики, Оренбургский государственный университет

Ключевые слова: молекулярная люминесценция, углеродная нанотрубка, экситон-плазмонное взаимодействие

Фотопроцессы в полупроводниковых полимерных композитах значительный интерес ДЛЯ представляют многочисленных исследователей и специалистов-практиков в области электроники, солнечной энергетики и систем переработки и хранения информации. Полимерные гибридные наноструктуры различного строения могут найти применение при современной элементной базы И будущей наноэлектроники. Полученные в последние годы рядом авторов результаты дают основания для успешного использования исследованных композитных полимерных структур, с возможностями модифицирования их электронных электронике и нанофотонике, молекулярной эффективных фотовольтаических ячеек и селективных химических сенсоров.

В данной работе объектами исследования являлись бензольные и толуольные растворы полупроводникового органического полимера поли[2метокси-5-(2'-этилгексилокси)-1,4-фенилен-винилен] – poly[2-methoxy, 5-(2'ethylhexyloxy)-1,4-phenylene-vinylene (MEH-PPV) c добавками двустенных углеродных нанотрубок (УНТ). МЕН-PPV – это проводящий полимер из семейства твердотельных полимеров с молекулярным весом ~ 150000 – 250000. Небольшая оптическая ширина запрещенной зоны и яркожелтая флуоресценция делает PPV кандидатом на внедрение в такие области современной твердотельной электроники как производство светоизлучающих диодов (СИД) и фотоэлектронных устройств различной модификации и применения. Благодаря термической и механической стабильности этого полимера, технологичности его производства и обработки, а также наличию подходящих электрических и оптических свойств, вероятнее всего PPV ожидает широкий спектр применений. Физические и электронные свойства PPV легко могут быть изменены путем включения в макроцепь функциональных полифенилен-винилен Известно, ЧТО групп. электролюминесценции, что позволяет рассматривать его как перспективную полимерную основу для органических светодиодов. Так, PPV использовался в качестве эмиссионного слоя в первых полимерных светоизлучающих диодах, а также как электронодонорный материал в органических солнечных элементах [1].

[2] было предыдущей работе авторов исследовано углеродных нанотрубок и металлических (Ni, Co, Fe, Cu, Ag) наночастиц на безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения молекулами органических красителей (акридиновый оранжевый – донор и нильский синий – акцептор) в спиртовых растворах поливинилбутираля. При определенных концентрациях компонентов смеси было обнаружено это влияние, выражающееся в увеличении интенсивности сенсибилизированной флуоресценции акцептора при одновременном тушении флуоресценции донора. Была предложена простейшая модель процесса, воспроизводящая наблюдаемое перераспределение интенсивностей свечения между спектральными полосами общего спектра, а также выполнены молекулярнодинамические расчеты структуры нанокомпозитов, подтверждающие образование ассоциированных молекулярно-плазмонных комплесов, охваченных макроцепной оболочкой.

Основной целью данной работы являлось обнаружение проявлений плазмонных свойств УНТ в экситонной люминесценции макроцепей PPV, растворенных в бензоле или толуоле. Углеродные нанотрубки и полифениленвинилен плохо растворяются в воде, поэтому в качестве растворителя и использовались толуол и бензол.

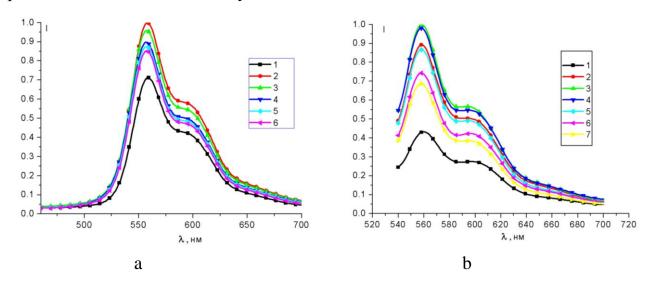


Рис. 1 Спектры люминесценции растворов полифениленвинилена в толуоле с различным содержанием (%) а) ОУНТ: **1-**0 , **2-**6.6 **3-**13.2 , **4-**19.8 , **5-**66 , **6-**100. b) ДУНТ: **1-**0 , **2-**6.6 **3-**13.2 , **4-**19.8 , **5-**26.4 , **6-**52.8 , **7-**100 .

Раствор полифениленвинилена составлял 0,00063 массовых процента, а концентрация УНТ измерялась в относительных процентных соотношениях к максимальной концентрации их в растворе. Углеродные нанотрубки массой 0,5 мг разводили в 15 мл растворителя. Затем раствор помещали в ультразвуковую ванну на 2 часа для разделения сцепленных в клубки нанотрубок. После этого производилось центрифугирование смеси с последующим отделением неразведенной части нанотрубок. Для улучшения растворимости нанотрубок в

ряде случаев в раствор добавлялся полистирол. Полученные таким образом растворы с разведенной фракцией УНТ использовалась в экспериментах.

Для исследования процессов влияния плазмонных наночастиц на собственную люминесценцию полифениленвинилена были проведены эксперименты по измерению спектров свечения растворов PPV с различным содержанием УНТ. Возбуждение растворов производилось на длине волны λ= 532 нм. Для толуольного раствора основной спектральный максимум свечения приходился на длину волны 555 нм (Рис. 1.). Из рисунка 1 видно, что при добавлении в раствор полифениленвинилена ДУНТ малых концентраций наблюдалось резкое увеличение интенсивности свечения. При дальнейшем же увеличении концентрации ДУНТ происходило тушение флуоресценции смеси.

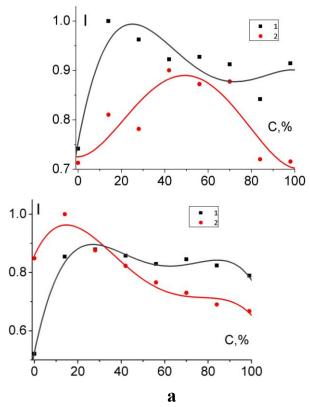


Рис. 2. Концентрационные зависимости интенсивности в максимуме спектра свечения раствора PPV с ОУНТ (а) и ДУНТ (б). Зависимости максимумов спектров свечения толуольных растворов полифениленвинилена от концентрации одностенных углеродных нанотрубок (1) и тех же растворов с добавками полистирола (2). Сплошные линии — аппроксимирующие кривые. Возбуждение λ = 445 нм.

б

В дальнейшем фотоактивация системы осуществлялась различными источниками оптического излучения. Использовались: твердотельный лазер Nd^{3+} со светодиодной накачкой (длина волны генерации $\lambda_m=532\,$ нм, полуширина линии $10\,$ нм); лазерный диод с длиной волны генерации $\lambda_{max}=460\,$ нм и полушириной линии $30\,$ нм, а также твердотельный лазер с длиной волны генерации $\lambda_m=445\,$ нм и полушириной линии $10\,$ нм. Характеристики люминесценции измерялись спектрометром на базе монохроматора МДР $204\,$ и

ФЭУ-100. Таким образом исследовалось влияние плазмонных наночастиц различных концентраций на собственную люминесценцию полифениленвинилена, растворенного в бензоле или толуоле при различных спектральных режимах фотоактивации.

Было установлено, что при фотовозбуждении раствора каждым из трех использованных световых источников (445, 460 и 532 нм) концентрационные зависимости интенсивности люминесценции полимерного раствора носят немонотонный характер: с увеличением доли растворенных нанотрубок интенсивность люминесценции в максимуме спектра сначала возрастает, а затем наблюдается ее спадание. При этом деформация самого спектра свечения места. Данный эффект наблюдался практически не имеет использовании ОУНТ, так и ДУНТ (рис. 1 и 2). Глубина модуляции интенсивности свечения в случае ДУНТ была выше, чем в случае ОУНТ. Аналогичные результаты были получены и при использовании бензола в качестве растворителя. При возбуждении системы светодиодом с длиной волны излучения 460 нм характер спектров люминесценции изменялся незначительно, но при этом также формировались интервалы концентраций нанотрубок, где интенсивность свечения как увеличивалась, так и спадала. При облучении системы светом с меньшей длиной волны, могут возбуждаться и другие полифениленвинилена, электронно-колебательные уровни затрагиваться дополнительные плазмонные моды углеродной нанотрубки, что характер взаимодействия УНТ способно изменять полимером деформировать спектр наблюдаемой люминесценции. При этом оказалось, что характерные особенности свечения системы сохраняются.

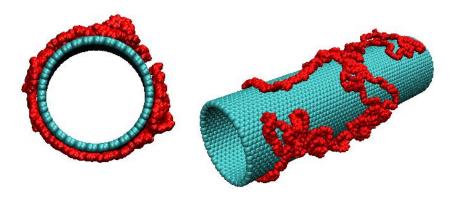


Рис. 3. Адсорбция макроцепи MEH-PPV на углеродной нантрубке

Для объяснения наблюдаемых концентрационных зависимостей параметров люминесценции растворов были предложены несколько вариантов модели концентрационной электродинамической активации-тушения люминесценции MEH-PPV углеродными нанотрубками. В простейшем случае разбавленных по УНТ растворов система представлялась отдельными, не взаимодействующими друг с другом трехслойными наноцилиндрами с заданными диэлектрическими проницаемостями каждого из слоев (Рис. 3). При подходе рассматривается поляризуемость $\alpha(\omega)$ единицы

цилиндра. Для частотной зависимости скорости спонтанного излучения системы «макроцепь- нанотрубка» использовалось выражение [3]

$$w_{sp}(\omega \mid \mathbf{r}) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left[\vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \alpha(\omega) \right] \mathbf{p} \Big|^2 , \qquad (1)$$

где, теперь, в отличие от шаровых частиц $\ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-2} \Big[2r^{-2}\mathbf{r} \otimes \mathbf{r} - \ddot{\mathbf{I}} \Big] -$ двумерная диадическая функция Грина, $\ddot{\mathbf{I}}$ — тензорная единица, r — расстояние от оси трубки до точки локализации экситона на макроцепи, \mathbf{p} — электронный дипольный момент отдельного звена цепи. Конкурирующим процессом для излучательного экситонного перехода является безрадиационный перенос энергии от полимерной цепи к нанотрубке, т.е. гибель экситона с рождением плазмона в УНТ. Для скорости соответствующего элементарного акта такого процесса можно записать [3] (V — объем единицы длины нанотрубки)

$$U(\omega \mid \mathbf{r}) = (2\hbar)^{-1} V \operatorname{Im} \left[\mathbf{p} \ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \alpha(\omega) \ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \mathbf{p} \right].$$
 (2)

Обе скорости (1) и (2) имеют радиальную зависимость вследствие наличия таковой у тензора $\ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \sim r^{-2}$. Однако наличие интерференционного слагаемого $w_{sp}^{int}(\omega|\mathbf{r}) \sim 2 \mathrm{Re}\,\alpha(\omega)\mathbf{p}\ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r})\mathbf{p}$ в (1) обуславливает степенной закон с показателем -2: $w_{sp}^{int}(r) \sim r^{-2}$, тогда как радиальная зависимость скорости (2) носит характер $U(r) \sim r^{-4}$. Это различие скоростей радиационного и безызлучательного переходов в степенных зависимостях от расстояния между частями нанокомпозита по всей видимости и отвечает за доминирование тушения над излучением при сближении нанотрубки и излучающего звена цепи. При наличии большого числа нанотрубок в растворе среднее расстояние между центром свечения и стоком уменьшается, что приводит к подавлению режима плазмонной активации люминесценции и возрастанию эффективности канала тушения.

В более детализированном варианте математической модели учитывается поляризующего поля нанотрубке неоднородность В радиальное распределение плотности звеньев адсорбированной макроцепи. В таком подходе удельная поляризуемость композита не рассматривается, а дипольный момент единицы длины нанотрубки, индуцированный полем экситонного диполя, вычисляется через вектор поляризации УНТ. Рост числа нанотрубок в системе учитывается через уменьшение размеров ячейки эффективной двумерной решетки, образованной паралелльно размещенными нанотрубками. Согласно статистической теории распределения плотности звеньев полимерной цепи на поверхностях адсорбентов [4], плотность звеньев макроцепи $n(\mathbf{r})$ определяется квадратом функции $\psi(\mathbf{r})$:

$$n(\mathbf{r}) = \operatorname{const} \psi^{2}(\mathbf{r}). \tag{3}$$

Ранее была определена радиальная зависимость концентрации звеньев на поверхности цилиндрической наночастицы с δ -функциональной ямой, моделирующей притяжение звеньев полимерной молекулы к поверхности наночастицы [5]:

$$\begin{cases} \psi_{I} = A \left(I_{0}(qr) - K_{0}(qr) \frac{I_{0}(qR)}{K_{0}(qR)} \right), & R < r < r_{0} \\ \psi_{II} = AK_{0}(qr) \left(\frac{I_{0}(qr_{0})}{K_{0}(qr_{0})} - \frac{I_{0}(qR)}{K_{0}(qR)} \right) & r_{0} < r < \infty \end{cases}$$

$$(4)$$

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

$$K_0(qr_0)I_0(qr_0) = \frac{a^2k_BT}{6\alpha r_0} + K_0^2(qr_0)\frac{I_0(qR)}{K_0(qR)},$$
(5)

где a — размер мономера, α — параметр глубины потенциальной ямы. Тогда вектор поляризации $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ макроцепной опушки с экситонным диполем \mathbf{p} может быть записан в виде $\mathbf{P}(\mathbf{r}) \sim \mathbf{p} \psi^2(r)$. Индуцированный дипольный момент P_{NT} нанотрубки определяется интегралом от вектора поляризации в ее слое.

Молекулярно-динамическое моделирование макромолекулы полифенилена между двумя углеродными нанотрубками

Кроме реализации электродинамической модели в работе выполнено молекулярно-динамическое моделирование конфигураций адсорбированной цепи MEH-PPV как на отдельной нанотрубке в различных растворителях [6], так и на двух паралельно расположенных нанотрубках с вариацией расстояния между ними.

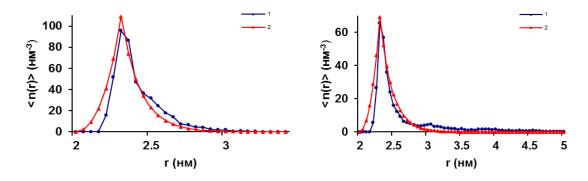


Рис. 4. Радиальные зависимости средней концентрации атомов полифениленвинилена полученные в результате МД-моделирования в воде (а, 1) и толуоле (б, 1), а также аппроксимирующие эти зависимости кривые (A, 2) и (Б, 2) построенные на основе (3)-(5).

На рис. 4 представлены радиальные зависимости средней концентрации атомов полифениленвинилена полученные в результате МД-моделирования в воде (а) и толуоле (b), а также аппроксимирующие эти зависимости кривые, построенные на основе аналитических выражений (3)-(5). Из сравнения рис. 4а и 4б видно, что плотность атомов цепи PPV в воде выше, чем в толуоле, а эффективная толщина опушечного слоя больше в неполярном толуоле. Этот результат представляется очевидным с учетом гидрофобности цепей полимера и УНТ.

Кроме того, было произведено МД-моделирование адсорбции макромолекулы полифениленвинилена между двумя одностенными углеродными нанотрубками в толуоле. Углеродные нанотрубки длиной 15 нм, диаметром 4.05 нм, хиральностью n=30 и m=30 располагалась параллельно: в одном случае расстояние между осями было установлено 6.3 нм, а в другом 8.7 нм. В процессе МД-моделирования атомы нанотрубки фиксировались.

Макромолекула полифениленвинилена размером 250 звеньев в стартовой конфигурации располагалась между углеродными нанотрубками и была предварительно свернута в неравновесную клубковую структуру. Вся молекулярная система была помещена в ячейку с периодическими граничными условиями (размер ячейки по оси х - 26 нм, по осям у и z - 21 нм). Ячейка заполнялась молекулами толуола, при этом количество молекул определялось исходя из плотности толуола в жидком состоянии.

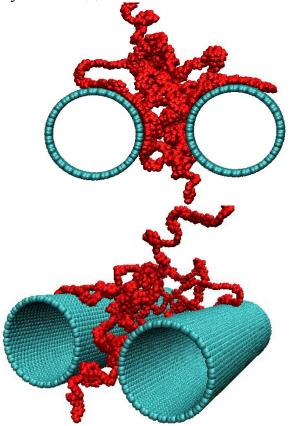


Рис. 5. Результирующая равновесная конформация макромолекулы полифениленвинилена между двумя углеродными нанотрубками, расположенными на расстоянии 6.3 нм, полученная в результате МД-моделирования в толуоле

МД-моделирование выполнено с использованием программного комплекса NAMD 2.12 [7] при постоянной температуре 300 К (термостат Берендсена). Шаг моделирования составлял 0.001 пс, а производилось оно в течение 30 нс. Для полифениленвинилена и толуола использовалось силовое поле CHARMM General Force Field (CGenFF) [8-9]. Параметры для атомов углерода нанотрубки задавались такими же, как и для атомов типа *CA* силового поля CHARMM22 [10], которые используются для описания молекул бензола [11]. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1.2 нм с помощью функции сглаживания между 1.0 и 1.2 нм. Электростатические взаимодействия рассчитывались непосредственно на расстоянии 1.2 нм, для больших дистанций использовался метод частица-сетка Эвальда (РМЕ) [12] с шагом сетки 0.11 нм.

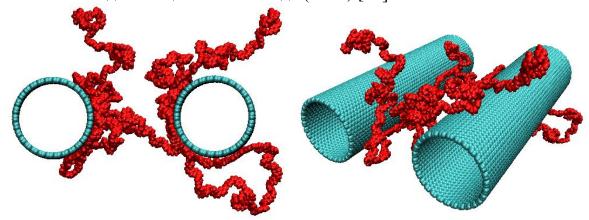


Рис. 6. Результирующая равновесная конформация макромолекулы полифениленвинилена между двумя углеродными нанотрубками, расположенными на расстоянии 8.7 нм, полученная в результате МД-моделирования в толуоле

На рис. 5 изображена макромолекула полифениленвинилена между двумя углеродными нанотрубками, расположенными на расстоянии 6.3 нм друг от друга по результатам МД-моделирования в толуоле спустя 30 нс. На рис. 6 нанотрубки расположены на расстоянии 8.7 нм. Видно, что макромолекула полифениленвинилена частично адсорбируется на поверхностях нанотрубок. Кроме того наблюдается появление значительных по размеру петель макроцепи, которые не адсорбировались на поверхности. Этот результат согласуется с фактом хорошей растворимости PPV в толуоле.

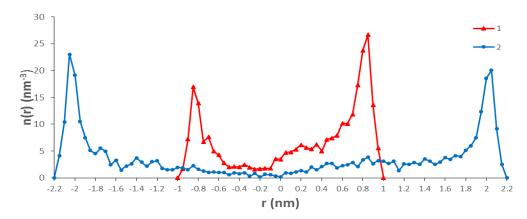


Рис. 7. Радиальные зависимости концентрации атомов полифениленвинилена для расстояния между нанотрубками 6.3 (1) и 8.7 (2) нм, полученные в результате МД-моделирования в толуоле.

По результатам МД-моделирования рассчитывались радиальные распределения концентрации атомов PPV по отдельности на поверхности каждой углеродной нанотрубки, а затем они были объединены в области между нанотрубками (рис. 7). Максимумы радиальных зависимостей концентрации атомов PPV отражают адсорбцию звеньев полимера на поверхности УНТ.

Работа выполнена по Госзаданию № 3.7758.2017/БЧ Министерства образования и науки РФ.

Список литературы

- 1. Беспалов А. В., Буиклиский В. Д. // Химия и химическая технология. 2012. Т. 55. № 3. С. 59-61 Stabilization of nanosize silver particles in an alcohol solution of polyester / Wiklicky, Bespalov // News of higher educational institutions. Chemistry and chemical technology .- 2012 .- №3 .— Р. 57-59
- 2. Kucherenko M. G., Stepanov V.N., Kruchinin N. Yu. Intermolecular nonradiative energy transfer in clusters with plasmonic nanoparticles // Optics and Spectroscopy, 2015. Vol. 118, № 1. P. 103-110.
- 3. Kucherenko M.G., Nalbandyan V.M. Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field // Physics Procedia. **73**. 136-142. (2015) doi: 10.1016/j.phpro. 2015.09.134. Published by Elsevier B.V.
- 4. Гросберг А. Ю., Хохлов А. Р. Статистическая физика макромолекул // М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1989. 344 с.
- 5. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Размещение звеньев полимерной цепи в поле гладкой твердой поверхности и в нанополостях пористого сорбента // Вестник ОГУ. $2008.-№9.-C.\ 177-184.$
- 6. Кручинин Н. Ю., Кучеренко М. Г. Конформационная структура полифениленвинилена на поверхности углеродной нанотрубки // Унив. комплекс как регион. центр образ., науки и культуры [Электрон. ресурс] : Матер. Всеросс. научно-метод. конф. Оренбург: ОГУ, 2018. С. 2503-2507.
- 7. 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. P. 1781-1802.
- 8. Vanommeslaeghe, K. CHARMM General Force Field: A Force field for Drug-Like Molecules Compatible with the CHARMM All-Atom Additive Biological Force Field / K. Vanommes-laeghe, 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. P. 671-690.
- 9. 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. V. 33. P. 2451-2468.
- 10. 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.
- 11. Zhu, F. Water and Proton Conduction through Carbon Nanotubes as Models for Biological Channels / F. Zhu, K. Schulten // Biophysical Journal Volume. 2003. V. 85. P. 236-244.
- 12. Darden, T. Particle mesh ewald: An n log(n) method for ewald sums in large systems / T. Darden, D. York, L. Pedersen // J. Chem. Phys. -1993. V. 98, -P. 10089-10092.

СПЕКТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ БИНАРНЫХ КОМПЛЕКСОВ «КВАНТОВАЯ ТОЧКА – ПЛАЗМОННАЯ НАНОЧАСТИЦА» В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Кучеренко М.Г., доктор физ.-мат. наук, профессор, Налбандян В.М., кандидат физ.-мат. наук Оренбургский государственный университет

На основе специально созданной теоретической модели произведены расчеты частотных зависимостей интенсивности свечения двухкомпонентной системы «экситон - активированная полупроводниковая квантовая точка (КТ) — плазмонная наночастица (НЧ)» в постоянном магнитном поле. В отличие от ранее реализованных моделей в использованном варианте произведен выход за рамки приближения дипольной поляризуемости сферической наночастицы. При расчете индуцированного дипольного момента НЧ учитывался неоднородный характер поля, создаваемого экситонсодержащей КТ. Показано, что с изменением индукции внешнего магнитного поля наблюдается трансформация спектров экситонной люминесценции такой системы в результате экситон-плазмонного взаимодействия и конкуренции радиационных и безызлучательных каналов распада возбужденного состояния.

Типичными объектами, представляющими существенный интерес для наноэлектроники И фотоники, являются проводящие полупроводниковые наночастицы в диэлектрической среде при наличии внешнего магнитного поля [1-2]. Металлические наночастицы и их кластеры существенно изменять радиационные характеристики ΜΟΓΥΤ близкорасположенных квантовых точек [3-5] в результате экситон-плазмонного взаимодействия. Эффективность плазмонного влияния геометрической конфигурации системы, а также внешнего магнитного поля, способного изменять поляризационные характеристики проводящей частицы. Так, например, в [6-7] было обнаружено и исследовано влияние магнитного поля на экситонную люминесценцию и случайную генерацию в ближнем УФдиапазоне пленок ZnO, сформированных из хаотично ориентированных наностержней, покрытых наночастицами Ад при комнатной температуре. При наличии магнитного поля в такой системе наблюдалось ярко выраженное усиление люминесценции, тогда как в отсутствие наночастиц серебра магнитополевое усиление свечения не имело места.

Рассмотрим экситон-активированную сферическую полупроводниковую квантовую точку (КТ) радиуса R_1 с содержащейся в ней электрон-дырочной парой или экситоном Ванье-Мотта, и глобулярную металлическую наночастицу (НЧ) радиуса R_2 на расстоянии $r > R_1, R_2$ от нее. Поле активированной КТ представляет собой поле осциллирующего с частотой ω во времени t дипольного источника с дипольным моментом $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 \exp(-i\omega t)$. Это поле наводит в наночастице дипольный момент \mathbf{p}_2 . Полагаем, что диэлектрическая проницаемость КТ ε_1 не обладает выраженной частотной дисперсией, тогда как

диэлектрическая проницаемость проводящей НЧ ε_2 , наоборот, имеет типичную для металлов сильную дисперсию $\varepsilon_2 = \varepsilon_2(\omega)$ [8] в области частот экситонного перехода. Прозрачная среда характеризуется диэлектрической постоянной ε_3 . Во внешнем магнитном поле индукции \mathbf{B} электронная плазма металла приобретает анизотропные свойства, и диэлектрическая проницаемость ε_2 становится тензором $\ddot{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})$ [1-2].

Приближение однородного поля и дипольной поляризуемости

На достаточно больших расстояниях r_0 от КТ и малых радиусах R наночастиц поле $\mathbf{E}(\omega)$ диполя \mathbf{p} можно приближенно считать однородным и использовать для описания отклика на него понятие электрической дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ НЧ.

Во внешнем магнитном поле **B**, вследствие замагниченности электронной плазмы, электрическая дипольная поляризуемость проводящей частицы в однородном монохроматическом поле $\mathbf{E}(\omega)$ частоты ω становится тензором $\ddot{\alpha}(\omega|\mathbf{B})$ второго ранга [1-2]. Тогда выражение для скорости $w_{sp}(\omega|\mathbf{B},r_0)$ спонтанного рекомбинационного свечения (экситонной люминесценции) полупроводниковой квантовой точки (КТ), расположенной вблизи наночастицы (НЧ), на расстоянии r_0 от ее центра, при наличии внешнего магнитного поля принимает следующий вид [2]

$$w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left[\ddot{\mathbf{I}} + \ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \ddot{\alpha}(\omega \mid \mathbf{B}) \right] \frac{3\varepsilon_3}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_3} \int_0^{R_c} \mathbf{P}(r) 4\pi r^2 dr \right]^2.$$
 (1)

Здесь $\ddot{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3}(3\mathbf{n}\otimes\mathbf{n} - \ddot{\mathbf{I}})$ - квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника; $\ddot{\mathbf{I}}$ - единичная диада; $R_1 = R_c + \Delta$. Вектор поляризации сферической квантовой точки $\mathbf{P}(r)$, возникающей при активации в КТ экситона Ванье-Мотта в условиях сильного и слабого конфайнмента имеет вид [9]

$$\mathbf{P}(r) = \frac{\mathbf{d}_{vc}}{2\pi R_c} \frac{\sin^2(\pi r / R_c)}{r^2}, \qquad \mathbf{P}(r) = \frac{\mathbf{d}_{vc}}{\sqrt{2\pi^2 R_c r_B^3}} \frac{\sin(\pi r / R_c)}{r}, \qquad (2)$$

где \mathbf{d}_{vc} - векторный матричный элемент межзонного электронного дипольного момента перехода; $r_{\rm B}$ –боровский радиус.

Для потенциала $\Phi_1(r,\theta)$ поля внутри шаровой КТ в [10] было получено

$$\Phi_{1}(r,\theta) = \left[\frac{\varepsilon_{1} - \varepsilon_{3}}{(\varepsilon_{1} + 2\varepsilon_{3})}\right] \frac{2r\cos\theta}{\varepsilon_{1}R_{1}^{3}} \int_{0}^{R_{c}} P(r') \cdot 4\pi r'^{2} dr' + \frac{4\pi}{3} P(r) \frac{r\cos\theta}{\varepsilon_{1}} + \frac{\cos\theta}{\varepsilon_{1}r^{2}} \int_{0}^{r} P(r') \cdot 4\pi r'^{2} dr',$$

а для потенциала $\Phi_3(r,\theta)$ поля диполя **р** во внешней среде $(r > R_1)$

$$\Phi_{3}(r,\theta) = \frac{\cos\theta}{\varepsilon_{3}r^{2}} \frac{3\varepsilon_{3}}{(\varepsilon_{1} + 2\varepsilon_{3})} \int_{0}^{R_{c}} P(r') 4\pi r'^{2} dr'.$$

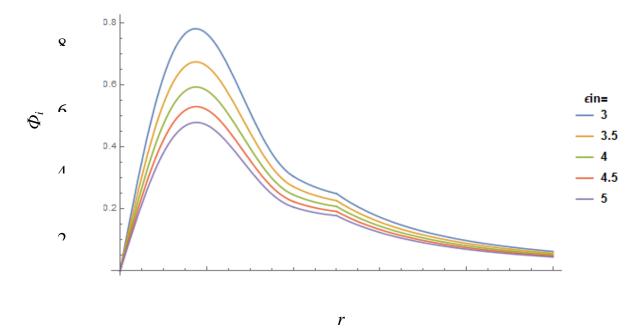


Рис. 1 Радиальная зависимость потенциала поля внутри и вне квантовой точки для ее различных диэлектрических проницаемостей при сильном конфайнменте. $\varepsilon_1 = \varepsilon_{in}$, $\varepsilon_3 = 1$, $R_1 = R_c + \Delta = 5\,\mathrm{HM}$, $R_c = 4\,\mathrm{HM}$, $\theta = \pi/6$.

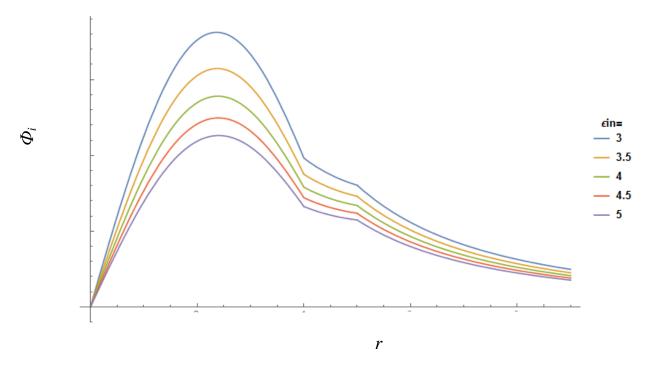


Рис. 2 Радиальная зависимость потенциала поля внутри и вне КТ для ее различных диэлектрических проницаемостей при слабом конфайнменте. $\varepsilon_1 = \varepsilon_{in}, \ \varepsilon_3 = 1, \ R_1 = R_c + \Delta = 5 \, \text{hm}, \ R_c = 4 \, \text{hm}, \ \theta = \pi/6$.

Безызлучательный перенос энергии экситона KT к металлической HЧ во внешнем магнитном поле

Вероятность в единицу времени (скорость) $U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0)$ безызлучательной передачи энергии от КТ к наночастице с поляризуемостью $\ddot{\alpha}(\omega \mid \mathbf{B})$ может быть представлена через характеристики поля $\mathbf{E}(\omega)$ и НЧ в следующем виде [10-11]

$$U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) = \frac{1}{2\hbar} V \operatorname{Im} \left[\mathbf{E}^*(\omega) \ddot{\alpha}(\omega \mid \mathbf{B}) \mathbf{E}(\omega) \right] = \frac{1}{2\hbar} V \operatorname{Im} \left[\mathbf{p} \mathbf{G}(\mathbf{r}) \ddot{\alpha}(\omega \mid \mathbf{B}) \mathbf{G}(\mathbf{r}) \mathbf{p} \right].$$
(3)

Здесь $\mathbf{E}(\omega)$ - напряженность поля, создаваемого возбужденной КТ в области расположения наночастицы, V – объем частицы.

Радиационные спектры объединенной системы «КТ-НЧ»

Спектральная плотность N_{ω} числа фотонов, испущенных объединенной системой «КТ-НЧ» на частоте ω , определяется как произведение вероятности w_{sp} спонтанного перехода (1) на функцию формы линии, которую будем считать лоренцевой, с шириной, определяемой скоростью $U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G})$ диссипации (3) (\mathcal{G} - угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{r}_0)

$$N_{\omega}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{S}) = \frac{1}{2\pi} \cdot \left[\frac{w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{S})}{(\omega - \omega_{if})^2 + U^2(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{S})} \right] \eta(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{S}).$$
(4)

Здесь, в (4), ω_{ij} - резонансная частота лоренцева контура экситонной полосы. Спонтанное испускание и безызлучательный перенос энергии на наночастицу являются конкурирующими процессами дезактивации возбужденного состояния молекулы, и для их совместного учета необходимо определить долю молекул, распавшихся радиационным способом (квантовый выход люминесценции)

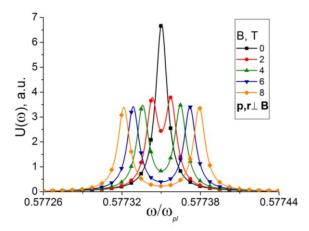
$$\eta(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G}) = \frac{w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0)}{w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) + U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G}) + K},$$
(5)

где K – постоянная скорость безызлучательного распада возбужденной молекулы в отсутствие наночастицы.

Спектральная плотность (4) отражает экспериментально регистрируемые спектры люминесценции систем, содержащих квантовые точки с проводящими и/или металлогибридными наночастицами, а также их кластерами.

На рис. З представлены частотные зависимости скорости $U(\omega | \mathbf{B})$ безызлучательного переноса энергии от квантовой точки к сферической металлической наночастице в магнитном поле различной индукции B. Наблюдаются расщепления кривых частотной зависимости скорости $U(\omega | \mathbf{B})$ на две спектральные компоненты, характерные для спектров поляризуемости проводящей сферической наночастицы в магнитном поле [1-2]. На рис. 4 представлены спектры люминесценции объединенной системы «КТ-НЧ». В области плазмонного резонанса (низкочастотная полоса) при включении магнитного поля $(\mathbf{B} \perp \mathbf{p})$ также наблюдается расщепление спектрального контура на две компоненты.

Для объяснения изменений в электронных спектрах спонтанного свечения двухкомпонентных систем «КТ-НЧ», вызванных внешним магнитным полем, на основе (1)-(2) и (4)-(5) предложена модификация простейшей модели [2] спонтанных электродипольных переходов в комплексах с НЧ.



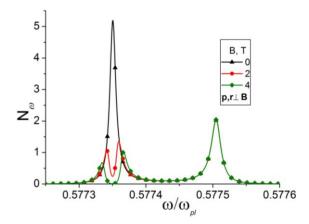


Рис. 3. Частотные зависимости скорости U безызлучательного переноса энергии от КТ к плазмонной наночастице радиуса R=7 nm в магнитном поле различной индукции B.

Рис. 4. Спектральная плотность числа фотонов, испущенных системой «КТ - НЧ» на частоте ω , в магнитном поле различной индукции B. R=7, r=12 nm. $\omega_{pl}=13.87\cdot 10^{15}~{\rm s}^{-1}$.

Скорость диссипации и поляризация наночастицы в неоднородном поле KT

На малых расстояниях r_0 от КТ и/или достаточно больших радиусах R_2 наночастиц поле $\mathbf{E}(\omega)$ диполя \mathbf{p} уже нельзя считать однородным и использование для описания отклика на это поле электрической дипольной поляризуемости $\alpha(\omega)$ НЧ становится некорректным. Ниже мы приводим более общую модель, которая учитывает неоднородность поля $\mathbf{E}(\omega \,|\, \mathbf{r})$ как внутри, так и вне НЧ.

Точечный диполь вне проводящего наношара. Потенциалы $\varphi_j(r,\theta)$ (j=2,3) электрического поля внутри (r < R_2) металлического шара радиуса R_2 и тензором диэлектрической проницаемости $\ddot{\varepsilon}_2(\omega\,|\,{\bf B})$, и снаружи (r > R_2) — в среде с диэлектрической проницаемостью ε_3 , создаваемого точечным зарядом q, помещенным в точку (r_0 ,0) (r_0 > R_2) вне шара могут быть записаны в виде

$$\varphi_{2}(r,\theta;r_{0} | \mathbf{B}) = q \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \mathbf{r}_{0} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{l}^{-1}(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{r} \cdot \frac{r^{l-1}}{r_{0}^{l+2}} \cdot P_{l}(\cos \theta), \qquad r < R,$$

$$(6) \ \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{l}^{-1}(\omega | \mathbf{B}) = [l \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{2}(\omega | \mathbf{B}) + (l+1) \boldsymbol{\varepsilon}_{3} \ddot{\mathbf{I}}]^{-1},$$

$$\varphi_{3}(r,\theta;r_{0}\mid\mathbf{B}) = \frac{q}{\varepsilon_{3}R_{MM_{0}}} + \frac{q}{\varepsilon_{3}}\sum_{l=0}^{\infty}l\mathbf{r}_{0}[\varepsilon_{3} - \varepsilon_{2}(\omega\mid\mathbf{B})]\ddot{\varepsilon}_{l}^{-1}(\omega\mid\mathbf{B})\mathbf{r} \cdot \frac{R_{2}^{2l+1}}{r_{0}^{l+2}r^{l+2}}P_{l}(\cos\theta).$$
(7)

Потенциалы $\delta \varphi_j(r,\theta \mid \mathbf{B})$ (j=2,3) радиально выстроенного точечного диполя $\mathbf{p}_0 = q \delta \mathbf{r}_0$ получаем дифференцированием (6)-(7) по переменной r_0 :

$$\delta\varphi_{j}(r,\theta) = \nabla\varphi_{j}(r,\theta)\delta r_{0}.$$

$$\delta\varphi_{2}(r,\theta;r_{0}|\mathbf{B}) = -\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(l+1)\mathbf{p}_{0}\ddot{\mathbf{\varepsilon}}_{l}^{-1}(\omega|\mathbf{B})\mathbf{r} \cdot \frac{r^{l-1}}{r_{0}^{l+2}} \cdot P_{l}(\cos\theta), \qquad r < R_{2},$$

$$\delta\varphi_{3}(r,\theta;r_{0}|\mathbf{B}) = \frac{p_{0}}{\varepsilon_{3}R_{MM_{0}}^{3}}(r\cos\theta - r_{0}) +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty} l(l+1)\mathbf{p}_{0}[\ddot{\varepsilon}_{2}(\omega|\mathbf{B}) - \varepsilon_{0}\ddot{\mathbf{I}}]\ddot{\varepsilon}_{l}^{-1}(\omega|\mathbf{B})\mathbf{r} \frac{R_{2}^{2l+1}}{\varepsilon_{2}^{2l+1}}P_{l}(\cos\theta), \qquad r > R_{2},$$

$$+\frac{1}{\varepsilon_{3}}\sum_{l=1}^{\infty}l(l+1)\mathbf{p}_{0}[\ddot{\varepsilon}_{2}(\omega\,|\,\mathbf{B})-\varepsilon_{3}\ddot{\mathbf{I}}]\ddot{\varepsilon}_{l}^{-1}(\omega\,|\,\mathbf{B})\mathbf{r}\frac{R_{2}^{2l+1}}{r_{0}^{l+2}r^{l+2}}P_{l}(\cos\theta), \qquad r>R_{2}.$$
(9)

Заметим, что поле с потенциалом $\delta \varphi_3(r,\theta;r_0\,|\,{\bf B})$ (9) определяет безызлучательный перенос энергии экситона КТ вблизи проводящей НЧ к малой частице-акцептору (молекуле или атомно-молекулярному кластеру), находящейся в точке М с координатами (r,θ) в магнитном поле.

Скорость диссипации энергии на частоте ω в малой сферической наночастице радиуса R_A с поляризуемостью $\alpha_A(\omega)$, расположенной в точке (r,θ) от центра НЧ имеет вид [10-11]

$$U_{\omega}(r,\theta \mid \mathbf{B}) = \frac{2}{3} \frac{\pi R_{A}^{3}}{\hbar} \operatorname{Im} \alpha_{A}(\omega) \left| \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} \delta \varphi_{3}(r,\theta \mid \mathbf{B}) \right|^{2}, \tag{10}$$

где $-\vec{\nabla}_{\mathbf{r}} \delta \varphi_3(r,\theta \,|\, \mathbf{B}) = \mathbf{E}_3(r,\theta)$ – напряженность поля, создаваемого экситон-активированной КТ и поляризованной ею НЧ в месте нахождения акцептора, а потенциал $\delta \varphi_3(r,\theta | \mathbf{B})$ определен формулой (9). Выражение (10) справедливо в силу того, что акцептирующая частица (в общем случае композит) имеет радиус $R_{\scriptscriptstyle A}$ нанометрового масштаба величины, а расстояние rНЧ-ретранслятора центром наночастицы-акцептора центром И предполагается достаточно большим: $r \gg R_{\scriptscriptstyle A}$. Тогда, пределах пространственной области занятой наночастицей-акцептором, поле $\mathbf{E}_{3}(r,\theta)$ можно приближенно считать однородным, а его искажения при внесении такой частицы – малым.

В неоднородном поле формула (1) для скорости $w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, \mathbf{r})$ спонтанного излучения объединенной бинарной системой «КТ-НЧ» должна быть модифицирована

$$w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \mathbf{p}_2(r_0 \mid \mathbf{B}) + \frac{3\varepsilon_3}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_3} \int_0^{R_c} \mathbf{P}(r) 4\pi r^2 dr \right|^2, \tag{11}$$

$$\mathbf{p}_{2}(r_{0} \mid \mathbf{B}) = -\frac{1}{2\varepsilon_{3}} \int_{0}^{R_{2}} \int_{0}^{\pi} [\vec{\varepsilon}_{2}(\omega \mid \mathbf{B}) - \varepsilon_{3}\vec{\mathbf{I}}] \vec{\nabla}_{\mathbf{r}} \delta \varphi_{2}(r, \theta \mid \mathbf{B}) r^{2} dr \sin \theta d\theta . \qquad (12)$$

Интеграл $\mathbf{p}_2(r_0 \mid \mathbf{B})$ (12) представляет собой наведенный дипольный момент [12] НЧ в неоднородном поле активированной квантовой точки и магнитном поле \mathbf{B} .

Аналогичной модификации должна быть подвергнута и ранее определенная выражением (3) скорость $U(\omega \,|\, {\bf B}, r_0)$ безызлучательной передачи энергии от КТ к наночастице. В случае неоднородного поля эта скорость может быть представлена интегралом от мнимой части квадратичной формы вектора напряженности локального поля $-\vec{\nabla}_{\bf r} \delta \varphi_2(r,\theta \,|\, {\bf B}) = {\bf E}_2(r,\theta;r_0)$ внутри НЧ

$$U(\omega \mid \mathbf{B}, r_0) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{0}^{R_2} \int_{0}^{\pi} \operatorname{Im} \mathbf{E}_{2}^{*}(r, \theta \mid \omega) \ddot{\varepsilon}_{2}(\omega \mid \mathbf{B}) \mathbf{E}_{2}(r, \theta \mid \omega) \sin \theta d\theta r^{2} dr.$$
 (13)

Эффект влияния металлических наночастиц на радиационные переходы в КТ при наличии внешнего магнитного поля был исследован нами для различных геометрических конфигураций системы как на основе выражений (1-5), так и на основе (8)-(9) и (11)-(13). В обоих случаях в расчетах использовалась формула (4) для интенсивности экситонной эмиссии КТ, полученная с учетом диссипации энергии ее возбужденного состояния на плазмонных модах НЧ. Изучены последствия замены обратного тензора $\ddot{\varepsilon}_l^{-1}(\omega | \mathbf{B}) = [l\ddot{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) + (l+1)\varepsilon_3\ddot{\mathbf{I}}]^{-1}$ его скалярным аналогом $\ddot{\varepsilon}_l^{-1}(\omega | \mathbf{B}) \rightarrow 1/[l\varepsilon_2(\omega | \mathbf{B}) + (l+1)\varepsilon_3]$, в качестве базового элемента $\varepsilon_2(\omega | \mathbf{B})$ которого использовались различные инварианты разного порядка для тензора $\ddot{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})$, от первого: $(1/3)\mathrm{Tr}\,\ddot{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})$ — на основе следа, до третьего: (Det $||\ddot{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})||)^{1/3}$ — на основе детерминанта.

Таким образом, в данной работе исследован эффект влияния металлических наночастиц на спонтанные излучательные переходы в комплексах «экситон-активированная квантовая точка — наночастица» при наличии внешнего магнитного поля, изменяющего диэлектрическую проницаемость электронной плазмы проводящих компонентов.

Работа выполнена по Госзаданию № 3.7758.2017/БЧ Министерства образования и науки РФ.

Список литературы

1. *Kucherenko M. G. Nalbandyan V. M.* Polarizability spectra of magnetized layered nanocomposites with an anisotropic core or cladding and localized surface plasmons // J. Opt. Technol. **85**, 524-530 (2018).

- 2. *Kucherenko M.G.* and *Nalbandyan V.M.* Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field // Physics Procedia. **73**. 136-142. (2015) doi: 10.1016/j.phpro. 2015.09.134. Published by Elsevier B.V.
- 3. Soganci I.M., Nizamoglu S., Mutlugun E., Akin O. Demir H.V. Localized plasmon-engineered spontaneous emission of CdSe/ZnS nanocrystals closely-packed in the proximity of Ag nanoisland films for controlling emission linewidth, peak, and intensity //Opt. Express. 2007. Vol. 15. N 22. P. 14 289-14 298
- 4. Шамилов Р.Р., Нуждин В.И., Валеев В.Ф., Галяметдинов Ю.Г., Степанов А.Л. Усиление фотолюминесценции квантовых точек cdse/cds на кварцевых подложках с наночастицами серебра // Журнал технической физики. 2016. Т. 86. №11. С. 95-100.
- 5. *Матюшкин Л.Б.*, *Перцова А.*, *Мошников В.А*. Усиление люминесценции квантовых точек вблизи слоя наночастиц Ag/SiO2 // Письма в ЖТФ. 2018. –Т. 44. –Вып. 8. –С. 35-41.
- 6. Briskina C.M., Tarasov A.P., Markushev V.M., Shiryaev M.A. Magnetic field influence on the intensity of zno random lasing and exciton luminescence // Journal of Nanophotonics. 2018. T. 12. № 4. C. 043506.
- 7. Брискина Ч.М., Тарасов А.П., Маркушев В.М., Ширяев М.А. Усиление краевого излучения наностержней zno в магнитном поле // Журнал прикладной спектроскопии. 2018. Т. 85. № 6. С. 1018-1020.
 - 8. *Климов В. В.* Наноплазмоника. М.: Физматлит. 2009. 480 с.
- 9. *Агранович В.М., Баско Д.М.* Резонансный перенос энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице // Письма в ЖЭТФ. 1999. **69**. -В.3. 232-235.
- 10. *К* учеренко М.Г., Скуратова С.В. Перенос энергии экситон-активированной квантовой точки к нанокомпозитным частицам в стеклах // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции. Оренбургский гос.ун-т. Электрон. дан. –Оренбург: ОГУ, 2016. С. 1237-1247
- 11. *Кучеренко М.Г.* Экситон-плазмонное взаимодействие в системе «полупроводниковая квантовая нить-сферическая металлокомпозитная наночастица» / М. Г. Кучеренко, Т. М. Чмерева / Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как региональный центр образования науки и культуры. Оренбург гос. ун-т. 2015. С. 1097–1107.
- 12. *Климов В.В., Дюклуа М., Летохов В.С.* Спонтанное излучение атома в присутствии нанотел // Квантовая электроника. 2001. -31. -№7. С. 569- 586.

СПЕКТРЫ МАГНИТОЗАВИСИМОЙ ЭКСИТОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ И МАГНИТНОГО КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, Теренина Л.В. Оренбургский государственный университет

Композитные наносистемы, включающие в себя магнитные, плазмонные и/или экситоногенные компоненты неизменно вызывают повышенный интерес к себе со стороны исследователей. В первую очередь это связано с возможностями их широкого практического использования в магнито- и биосенсорике, в проектировании оптических устройств обработки и хранения информации, создании световых модуляторов и амплификаторов. Реализация экситон- плазмонного взаимодействия в композитах позволяет направленно модифицировать их свойства, и обеспечивает магниточувствительность экситонных полос результирующего спектра.

Простейшим композитным элементом, В котором объединены проводящие и диэлектрические составляющие является слоистая сферическая наночастица со структурой «кор-оболочка» [1-2]. В металлическом коре могут моды, а в кристаллоподобной оболочке из активироваться плазмонные молекулярных агрегатов экситонные моды. К композитам магнитоплазмонного типа многослойные отнести частицы ОНЖОМ плазмоподобными ферромагнитным кором И (сопряженными c экситоногенными) оболочками.

В данной работе аналогично рассмотренному ранее случаю активации люминесценции отдельной молекулы, расположенной вблизи сферического слоистого нанокомпозита [3], исследована экситонная люминесценция шаровых нанооболочек, образованных из молекулярных J-агрегатов (например, молекул псевдоцианиновых красителей), окружающих металлическую сердцевину из Ag или Au.

Вектор $\mathbf{p} = \mathbf{\ddot{A}}(\boldsymbol{\omega} | \mathbf{B})\mathbf{E_0}$ дипольного момента слоистого нанокомпозита, находящегося в монохроматическом внешнем поле с напряженностью $\mathbf{E_0}$ и постоянном магнитном поле с индукцией \mathbf{B} будет определяться тензором $\mathbf{\ddot{A}}$ дипольной динамической поляризуемости [4]. Выражение для тензора $\mathbf{\ddot{A}}$ поляризуемости слоистого сферического композита с внешним радиусом R_2 и замагниченной электронной плазмой сердцевины радиуса R_1 ($\xi = R_1/R_2 < 1$) впервые было получено в [5] строгими методами

$$\ddot{\mathbf{A}}(\ddot{\varepsilon}_{1}(\omega | \mathbf{B}), \varepsilon_{2}(\omega), \varepsilon_{3}) =
= [(\ddot{\varepsilon}_{1}(\omega | \mathbf{B}) + 2\varepsilon_{2}(\omega)\ddot{\mathbf{I}})(\varepsilon_{2}(\omega) - \varepsilon_{3}) + (\ddot{\varepsilon}_{1}(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{2}(\omega)\ddot{\mathbf{I}})(2\varepsilon_{2}(\omega) + \varepsilon_{3})\xi^{3}]\mathbf{r}
\mathbf{r} [(\ddot{\varepsilon}_{1}(\omega | \mathbf{B}) + 2\varepsilon_{2}(\omega)\ddot{\mathbf{I}})(\varepsilon_{2} + 2\varepsilon_{3}) + 2(\ddot{\varepsilon}_{1}(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_{2}(\omega)\ddot{\mathbf{I}})(\varepsilon_{2}(\omega) - \varepsilon_{3})\xi^{3}]^{-1}R_{2}^{3}.$$
(1)

При наличии внешнего магнитного поля даже сферические металлические частицы приобретают анизотропные свойства, которые характеризуются частотнозависящим тензором комплексной диэлектрической проницаемости. Ненулевые компоненты этого тензора имеют вид [6]

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp} = 1 - \frac{\omega_{pl}^{2}(\omega + i\gamma)}{\omega \left[(\omega + i\gamma)^{2} - \Omega_{L}^{2} \right]},$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel} = 1 - \frac{\omega_{pl}^{2}}{\omega^{2} + i\omega\gamma}, \ \varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx} = ig(\omega \mid B)$$
(2)

где $\Omega_{\scriptscriptstyle L}=eB/(mc)$ - ларморовская частота электрона, а модуль вектора гирации $g(\omega\,|\,B)=\omega_{\scriptscriptstyle pl}^2\Omega_{\scriptscriptstyle L}/\omega\,\left[\omega+i\gamma\right)^2-\Omega_{\scriptscriptstyle L}^2$.

Выражение для диэлектрической проницаемости кристалла с учетом наличия в нем экситонных мод записывается в виде [7]

$$\varepsilon(\mathbf{k},\omega) = \varepsilon_0 - \frac{f^2}{\left[\omega + i\Gamma(\omega,\mathbf{k})\right]^2 - \omega_{res}^2(\mathbf{k})},$$
(3)

где $\varepsilon_{\scriptscriptstyle 0}$ – диэлектрическая проницаемость, обусловленная всеми другими кристалла, кроме экситонных электронными состояниями состояний; $\Gamma(\omega, \mathbf{k}) \equiv \gamma(\mathbf{k}, \omega) + \eta$ – скорость релаксации, обусловленная взаимодействием экситонов с фононами; фактор $f^2 \equiv \Omega_p^2 F$ характеризует связь фотонов с экситонами; $\Omega_p^2 \equiv 4\pi e^2/mv$ – квадрат «плазменной частоты»; $F \equiv 2\omega_f m d^2/\hbar e^2$ – сила осциллятора перехода; $\omega_{res}(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k}) + \Delta(\mathbf{k}, \omega)$ – перенормированная взаимодействия с фононами частота экситонов с волновым вследствие Таким образом, вектором диэлектрическая кристаллоподобных молекулярных Ј-агрегатов является комплексной функцией с пространственной и частотной дисперсией. Функция

$$\gamma(\mathbf{k},\omega) = \frac{2\pi}{N\hbar^2} \sum_{s,\mathbf{q}} \left| F_s(\mathbf{k},\mathbf{q}) \right|^2 \cdot \left\{ (\overline{v}_{s\mathbf{q}} + 1)\delta[\omega - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \Omega_s(\mathbf{q})] + \overline{v}_{s\mathbf{q}}\delta[\omega - \omega(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + \Omega_s(\mathbf{q})] \right\}$$

представляет собой скорость поперечной релаксации, которая характеризует уширение экситонных уровней, обусловленное взаимодействием экситонов с фононами и формируется в результате переходов между

подуровнями в экситонной зоне. Далее в расчетах спектров учитывается только частотная дисперсия при \mathbf{k} =0.

Скорость спонтанного излучения на частоте ω экситонов оболочки шарового композита в магнитном поле может быть вычислена на основе (1) с помощью следующего выражения

$$w_{sp}(\omega \mid \mathbf{B}) = \frac{2\omega^3}{3\pi\hbar c^3} \left| \ddot{\mathbf{A}}(\omega \mid \mathbf{B}) \mathbf{E_0} \right|^2. \tag{4}$$

Спектральную плотность числа фотонов, испущенных экситонами, определим на основе (4) следующим соотношением

$$N_{\omega}(\omega \mid \mathbf{B}) = \frac{2\omega^{3}\Gamma_{exc}}{3\pi\hbar c^{3}} \frac{\left|\ddot{\mathbf{A}}(\omega \mid \mathbf{B})\mathbf{E}_{0}\right|^{2}}{(\omega - \omega_{exc})^{2} + \Gamma_{exc}^{2}} \eta(\omega \mid \mathbf{B}), \tag{5}$$

где $\Gamma_{exc} = w_{sp}(\omega | \mathbf{B}) + U(\omega | \mathbf{B})$ — ширина спектральной линии экситонной люминесценции; $U(\omega | \mathbf{B}) = \mathrm{Im} \Big[\mathbf{E}_0^*(\omega) \ddot{\mathbf{A}}(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{E}_0(\omega) \Big] / (2\hbar)$ — скорость поглощения энергии поля с последующей ее диссипацией всем слоистым нанокомпозитом. Ширину спектральной линии Γ_{exc} будет определять тот процесс дезактивации экситонов оболочки, который протекает более интенсивно. Квантовый выход люминесценции определяется традиционным отношением скоростей

$$\eta(\omega \,|\, \mathbf{B}) = \frac{w_{sp}(\omega \,|\, \mathbf{B})}{w_{sp}(\omega \,|\, \mathbf{B}) + U(\omega \,|\, \mathbf{B})}.$$

Расчеты показали, что обычно $w_{_{SP}} \mu \ 10^{^{11}} \text{c}^{^{-1}} > U$, поэтому $\eta(\omega \,|\, \mathbf{B}) \approx 1$.

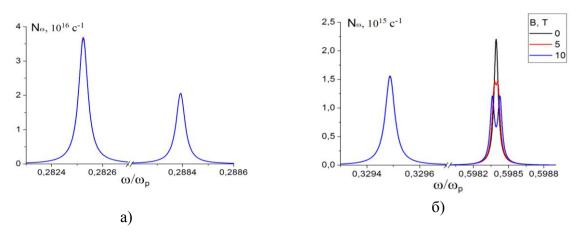


Рис. 1. Частотные зависимости спектральной плотности числа фотонов, испускаемых экситонами при различных значениях индукции магнитного поля *B*. а) экситонные резонансы б) экситонный и плазмонные резонансы. $R_1=60$ нм, $R_2=80$ нм, $\gamma=6\cdot10^{11}\,c^{-1}$, $\Gamma_{exc}=3\cdot10^{11}\,c^{-1}$, $\omega_p=13.87\cdot10^{15}\,c^{-1}$, $\omega_{res}=4\cdot10^{15}\,c^{-1}$

На рис. 1 представлены частотные зависимости спектральной плотности числа фотонов, испущенных экситонами шаровой оболочки композита для различных величин индукции магнитного поля B. Экситонные резонансы рис. 1а и 16 слабо зависят от магнитного поля. Как видно из рис. 16 при наличии внешнего магнитного поля плазмонный резонанс, как и в ранее исследованном случае отдельной молекулы [3], расщепляется на две спектральные компоненты, интервал между которыми увеличивается с ростом значения магнитной индукции B. Кроме того, в спектре рис. 1а появляется третий экситонный резонанс на частоте $\omega/\omega_p = 0,2884$, обусловленный чисто экситонным переходом с частотой ω_{exc} в середину экситонной зоны, что обусловлено наличием разности частот $\omega-\omega_{exc}$ в знаменателе (5). Очевидно, что эта полоса в спектре вообще не зависит от магнитного поля.

С увеличением коэффициентов затухания экситонов и плазмонов, как видно из рис. 2 и 3 соответственно, экситонные и плазмонные резонансы уширяются, при этом уменьшаясь по амплитуде. На резонанс, приходящийся на частоту $\omega/\omega_p=0,2884$, коэффициенты затухания не влияют, т.к. его форма и амплитуда определяются только шириной экситонной спектральной линии Γ_{exc} .

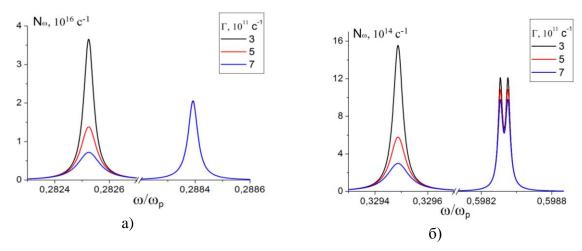


Рис. 2. Частотные зависимости спектральной плотности числа фотонов, испускаемых экситонами для различных значений коэффициента затухания Γ_{exc} экситонов.

а) экситонные резонансы б) экситонный и плазмонные резонансы

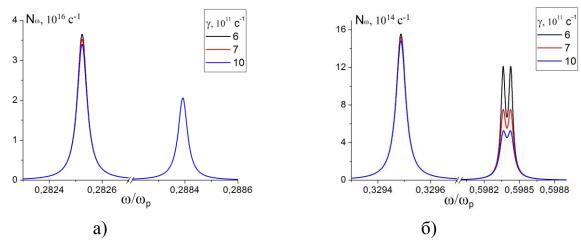


Рис. 3. Частотные зависимости спектральной плотности числа фотонов, испускаемых экситонами для различных значений коэффициента затухания γ плазмонов.

а) экситонные резонансы б) экситонный и плазмонные резонансы

Таким образом, проведенный анализ экситонной люминесценции сферического слоистого нанокомпозита с замагниченной плазмонной сердцевиной, показал, что такая система обладает хорошими радиационными характеристиками и допускает управляемые изменения плазмонной и частично – экситонной полос спектра посредством внешнего магнитного поля.

Магнитный круговой дихроизм спектров поглощения композитных наночастиц с экситоногенными и ферромагнитными компонентами

Кроме спектров магнитозависимой экситонной люминесценции нанокомпозитов в данной работе рассчитаны спектры магнитного кругового дихроизма (МКД) поглощения двуслойных наночастиц и их бинарных кластеров со структурой «кор-оболочка», при условии, что одна из частиц кластера, ее кор или оболочка образованы из экситоногенного материала. В случае слоистых нанокомопозитов со структурой «ферромагнитный кор – диамагнитная оболочка», их спектры оптического поглощения обладают $arepsilon_{mn}^{(1)}(\omega)$ круговым дихроизмом. Тензор диэлектрической проницаемости намагниченного однородно кора может быть записан виде $\varepsilon_{mn}^{(1)}(\omega) = \varepsilon_f(\omega)[\delta_{mn} + iQ(-\delta_{m1}\delta_{n2} + \delta_{m2}\delta_{n1})],$ где Q_ параметр Фохта ферромагнетика, $\varepsilon_f(\omega) = 1 - \omega_{pl}^2 / [\omega(\omega + i\gamma_f)]$, а ω_{pl}, γ_f — его плазменная частота коэффициент диссипации, соответственно. Экситоногенная оболочка композита характеризуется диэлектрической проницаемостью (3). Тогда спектр $W^{(\pm)}(\omega)$ скорости поглощения циркулярно поляризованного света с амплитудой $E_0^{(\pm)}(\omega)$ напряженности $E(i\omega t)$ может быть записан в виде суммы двух интегралов — в области кора ($0 < r < R_1$), и в области экситоногенного слоя $(R_1 < r < R_2)$

$$\omega^{-1}W^{(\pm)}(\omega) \sim \int_{0}^{R_{1}} \operatorname{Im}\left[\mathbf{E}_{1}^{*(\pm)}(\omega)\ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{1}(\omega \mid \mathbf{M})\mathbf{E}_{1}^{(\pm)}(\omega)\right] d^{3}r + \int_{R_{1}}^{R_{2}} \operatorname{Im}\left[\mathbf{E}_{2}^{*(\pm)}(\omega)\boldsymbol{\varepsilon}_{2}(\omega)\mathbf{E}_{2}^{(\pm)}(\omega)\right] d^{3}r.$$

$$(6)$$

Здесь **М** — вектор намагниченности кора. Напряженность \mathbf{E}_1 поля в коре композита записываем как $\mathbf{E}_1^{(\pm)} = \ddot{\mathbf{B}}(\ddot{\mathcal{E}}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3) \mathbf{E}_0^{(\pm)}$, где тензорный фактор Лоренца $\ddot{\mathbf{B}}(\ddot{\mathcal{E}}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3)$ выражается через тензор поляризуемости $\ddot{\mathbf{A}}(\omega \,|\, \mathbf{M})$ композита, определенный формулой (1) с заменой вектора $\mathbf{B} \to \mathbf{M}$

$$\vec{\varepsilon}_1(\omega) + 2\varepsilon_2(\omega) \ \vec{\mathbf{B}} = 2\varepsilon_2(\omega) + \varepsilon_3 \ \vec{\mathbf{I}} - 2 \ \varepsilon_2(\omega) - \varepsilon_3 \ \vec{\mathbf{A}} / R_2^3$$

Напряженность \mathbf{E}_2 поля в оболочке композита утрачивает однородность

$$\mathbf{E}_{2}^{(\pm)}(r,\theta \mid \omega) = -\vec{\nabla} \left[-\ddot{\mathbf{C}}(\ddot{\varepsilon}_{1},\varepsilon_{2},\varepsilon_{3})\mathbf{E}_{0}^{(\pm)}\mathbf{r} + \ddot{\mathbf{D}}(\ddot{\varepsilon}_{1},\varepsilon_{2},\varepsilon_{3})\mathbf{E}_{0}^{(\pm)}\frac{\mathbf{r}}{r^{3}} \right],$$

и выражается через трансформационные тензоры ${\bf C}$ и ${\bf D}$, связанные с тензорами ${\bf A}$ и ${\bf B}$ соотношениями

$$\vec{\mathbf{B}} = \vec{\mathbf{C}} - \vec{\mathbf{D}} / R_1^3, \quad -\vec{\mathbf{C}} + \vec{\mathbf{D}} / R_2^3 = -\vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{A}} / R_2^3, \quad \boxed{1 / R_2^3 - 1 / R_1^3} \vec{\mathbf{D}} = \vec{\mathbf{B}} - \vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{A}} / R_2^3.$$

В альтернативном (6) модельном варианте расчет скорости поглощения производится с использованием только тензора поляризуемости ${\bf A}$ на основе выражения

$$W^{(\pm)}(\omega \mid \mathbf{B}) = \frac{1}{2\hbar} \operatorname{Im} \left[\mathbf{E}_0^{*(\pm)}(\omega) \ddot{\mathbf{A}}(\omega \mid \mathbf{B}) \mathbf{E}_0^{(\pm)}(\omega) \right]. \tag{7}$$

В отличие от варианта (6) в котором учитывается специфическое поглощение в каждом из слоев нанокомпозита, в модельном варианте (7) спектры МКД определяются лишь на основе одного тензора $\ddot{\mathbf{A}}(\omega \,|\, \mathbf{M})$ (или $\ddot{\mathbf{A}}(\omega \,|\, \mathbf{B})$), характеризующего композит как целое.

Расчеты магнитных дихроичных спектров поглощения циркулярнополяризованного света композитными наночастицами со структурами «короболочка» и «бисферический кластер» производились как на основе (6), так и на основе (7). Предварительные результаты, полученные на примере системы «ферромагнитный кор — плазмоподобный оболочечный слой» показали практическую схожесть результатов для спектров МКД, полученных при использовании обеих моделей. В нулевом приближении замагниченность электронной плазмы проводящего слоя не учитывалась.

На рис. 4 представлены МКД-спектры слоистой биметаллической наночастицы с кобальтовым ядром и оболочками из благородного металла (Ag,

Au) при различных толщинах оболочек и неизменном внешнем радиусе частицы R_2 .

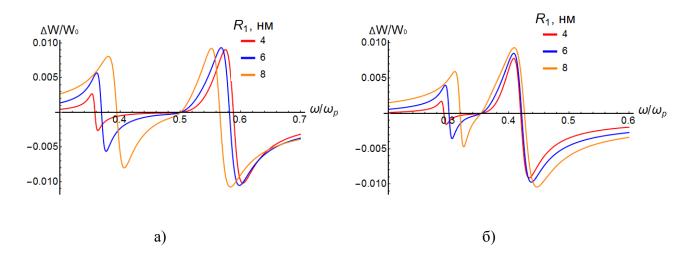


Рис. 4. Спектры МКД двуслойной сферической частицы с ферромагнитным кобальтовым ядром и (а) серебрянной или (б) золотой оболочкой для различных значений радиуса кора R_10 в зависимости от радиуса ядра. Радиус частицы фиксирован и равен R_2 =10 нм, параметр Фохта $Q=10^{-3}$, диэлектрическая проницаемость среды $\varepsilon_3=2$.

Из графиков рис. 4 видно, что смещение полос плазмонного резонанса с увеличением радиуса кора R_1 происходит навстречу друг другу. Такое поведение в корне отличается от случая, когда композит находился в вакууме. Для вакуума наблюдалось смещение спектральных полос в одном направлении частотной шкалы. Амплитуды резонансных полос спектров МКД при этом изменялись незначительно.

Что касается сечений поглощения слоистых композитов, то здесь наблюдалась иная картина. На рис. 5 представлены спектры поглощения слоистых наночастиц с кобальтовым ядром и оболочками из Ag и Au при различных радиусах R_1 кора и фиксированном внешнем радиусе частицы R_2 . Из графиков рис. 5 видно, что с ростом радиуса ядра композита связанная с плазмонным резонансом в слое Ag или Au линия спектра поглощения уменьшается по амплитуде, тогда как в МКД-спектре эта линия растет.

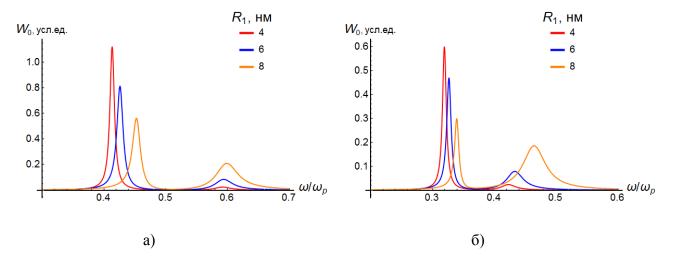


Рис. 5. Спектры сечений поглощения света наночастицами с кобальтовым ядром и оболочками из (а) серебра и (б) золота для различных радиусов R_1 ферромагнитного кора. Радиус частицы R_2 =10 нм фиксирован, параметр Фохта ферромагнетика $Q = 10^{-3}$, диэлектрическая проницаемость среды $\varepsilon_3 = 1$.

Таким образом, расчеты спектров $\Delta W(\omega) = W^{(+)}(\omega) - W^{(-)}(\omega)$ магнитного кругового дихроизма ряда сферических слоистых нанокомпозитов с различными сочетаниями материалов кора и оболочки были произведены на основе базовой модели (6), а также на основе выражения (7), использующего тензорное представление дипольной динамической поляризуемости композита как единой системы. Обнаружены сильные зависимости спектров МКД от сочетаний металлов композита, а также его геометрических параметров и диэлектрической постоянной среды.

В ближайшее время планируется выполнить расчеты МКД-спектров шаровых нанокомпозитов при наличии в них компонентов с экситонными модами. Предполагается обнаружить трансформации МКД-спектров, обусловленные экситон-плазмонным взаимодействием в таких композитах.

Работа выполнена по Госзаданию № 3.7758.2017/БЧ Министерства образования и науки РФ.

Список литературы

- 1 Лебедев В.С., Медведев А.С. Эффекты плазмон-экситонного взаимодействия при поглощении и рассеяния света двухслойными наночастицами металл/Ј-агрегат // Квантовая электроника. 2012. Т. 42. №. 8. С. 701-713.
- 2 Lebedev V.S., Medvedev A.S. Optical properties of three-layer metalorganic nanoparticles with a molecular J-aggregate shell / // Quantum Electronics. 2013. –V. 43 (11) –P. 1065 1077.
- 3 *Кучеренко М.Г.*, *Теренина Л.В.* Поглощение энергии экситоногенным слоем шарового нанокомпозита и люминесценция молекулярно-композитных комплексов // Унив-ский комплекс как регион.

центр образов., науки и культуры: матер. Всеросс. научно-метод. конфер. – Электрон. дан. – Оренбург: ОГУ, 2018. – С. 2532-2541.

- 4 *Kucherenko M.G., Pen'kov S.A.* Magnetic field effect on intermolecular radiationless energy transfer near metallic nanoparticle // Book of Abstract. The 3-rd International Symposium «MOLECULAR PHOTONICS» dedicated to academician A.N. Terenin June 24–29, 2012 Repino. St. Petersburg. RUSSIA P. 64.
- 5 Кучеренко М.Г. Локализованные плазмоны в замагниченном наноцилиндре и сферическом слоистом композите с анизотропной сердцевиной или оболочкой // Унив-ский комплекс как регион. центр образов., науки и культуры: матер. Всеросс. научно-методич. конфер.— Электрон. дан. Оренбург: ОГУ, 2016. С. 1220-1227.
- 6 *Гинзбург В.Л., Рухадзе А.А.* Волны в магнитоактивной плазме. М.: Наука. 1975. --256 с.
- 7 Давыдов А.С. Теория твердого тела / А.С. Давыдов. М.: Наука. 1976 -328 с.

СПИН-СЕЛЕКТИВНАЯ КРОСС-АННИГИЛЯЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ МОБИЛЬНЫХ ТРИПЛЕТНЫХ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ФЕРРОМАГНИТНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Центр лазерной и информационной биофизики, Оренбургский государственный университет, г. Оренбург

Ключевые слова: магнитное поле, триплет-триплетная аннигиляция, поверхностная диффузия

Использование нанореакторных комплексов создает необходимые условия для концентрирования парамагнитных молекул-реагентов вблизи частиц-источников магнитного поля [1-3]. В нашей недавней работе [4] исследована возможность магнитного управления скоростью спин-селективной внедрения в наноструктурированную посредством ферромагнитных частиц, например, оксидов железа: магнетита Fe₃O₄ [5], или обладающих остаточной γ -Fe₂O₃, намагниченностью, приобретающих таковую в результате включения внешнего магнитного поля.

В данной работе рассматриваются особенности спин-селективной кроссаннигиляции возбужденных электронных состояний двух разносортных триплетных (Т) молекул на поверхности сферической ферромагнитной частицы нанометрового радиуса. Для простоты будем считать, что одна из Т-молекул иммобилизована, а другая способна диффузионно перемещаться по поверхности частицы, ощущая, при этом, изменения индукции **B** ее магнитного поля. Описание спиновой динамики системы в анизотропном магнитном поле $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ наночастицы может быть произведено в рамках формализма спингамильтониана $\widehat{H}(\Omega_1,\Omega_2)$ Т-Т-пары молекул [6-7]

$$\widehat{H}(\Omega_1, \Omega_2) = g_1 \mu_B B(\Omega_1) \widehat{S}_{1Z} + g_2 \mu_B B(\Omega_2) \widehat{S}_{2Z} - 2J_{exc}(r_{12}) \widehat{\mathbf{S}}_1 \widehat{\mathbf{S}}_2 - \widehat{\mathbf{S}}_1 \mathbf{\ddot{D}}(\omega_1) \widehat{\mathbf{S}}_1 - \widehat{\mathbf{S}}_2 \mathbf{\ddot{D}}(\omega_2) \widehat{\mathbf{S}}_2$$

Первые два слагаемых в (1) определяют зеемановское взаимодействие одиночных триплетов (с различными g-факторами g_1 и g_2) Т-Т-пары с локальным магнитным полем индукции $B(\Omega_j)$ на сферической поверхности с угловыми координатами $\Omega_j = (\theta_j, \varphi_j)$ (вектор **B** направлен вдоль оси Z), создаваемым ферромагнитной наночастицей в точках размещения молекул 1 и 2, 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 $\widehat{\mathbf{S}}_1$, $\widehat{\mathbf{S}}_2$ — векторные операторы электронных спинов молекул 1 и 2; $\widehat{\mathbf{D}}(\omega_j)$ —

магнитного диполь- дипольного взаимодействия; ω_{i} - угловые параметры, задающие ориентацию молекулы 1 или 2; $\mu_{\scriptscriptstyle B}$ – магнетон Бора. Гамильтониан спин-спинового взаимодействия $\hat{V}_{ss} = -\hat{\mathbf{S}}_1 \ddot{\mathbf{D}}_1 \hat{\mathbf{S}}_1 - \hat{\mathbf{S}}_2 \ddot{\mathbf{D}}_2 \hat{\mathbf{S}}_2$ учитывает внутримолекулярное взаимодействие, магнитодипольное межтриплетное спин-спиновое взаимодействие предполагается малым из-за относительно большого радиуса молекулярной пары. Оператор обменного взаимодействия диагонален в парном базисе $|JM\rangle$ состояний суммарного электронного спина $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ Т-Т-пары реагентов (J, M — квантовые числа Z-проекции). суммарного спинового момента И его межмолекулярных расстояниях r_{12} величина обменного интеграла быстро падает $J_{exc}(r_{12}) \rightarrow 0$.

Наличие молекул двух сортов в системе актуализирует специфический механизм смешивания спиновых состояний $|JM\rangle$ друг с другом в магнитном поле, известный как дельта g-механизм: $\Delta g = g_1 - g_2$. Этот механизм, играющий большую роль в магниточувствительности радикальных реакций, был рассмотрен нами ранее применительно к процессу ТТА в ряде работ [4]. Однако для реакций с участием триплетных молекул более типичным является другой механизм, основанный на проявлении внутримолекулярного спинвзаимодействия [6-8]. B данной работе МЫ произведем одновременный учет действия обоих механизмов, развивая для этого теорию возмущений второго порядка по взаимодействию тонкой структуры триплета вкупе с той частью зеемановского взаимодействия, которая связана с разностью $\Delta g = g_1 - g_2$ и неоднородностью grad $B(\mathbf{r})$ магнитного поля наночастицы.

Теория возмущений второго порядка для спиновой динамики

Введем обозначения $g_1=g$, $g_2=g+\Delta g$, $B_1=B$, $B_2=B+\Delta B$. Тогда гамильтониан (1) можно переписать в виде

$$\hat{H} = g \mu_B B \hat{S}_{1Z} + \hat{S}_{2Z} + g \Delta B + \Delta g (B + \Delta B) \mu_B \hat{S}_{2Z} - J_{exc}(r_{12}) \hat{S}^2 - 4 + \hat{V}_{SS},$$
(2)

или

$$\begin{split} \widehat{H} &= \widehat{H}_0 + V_{SS}, \ \widehat{H}_0 = \widehat{H}_0^{(1)} + \widehat{H}_0^{(2)}, \\ \widehat{H}_0^{(1)} &= g \, \mu_B B \widehat{S}_Z - J_{exc} (\widehat{\mathbf{S}}^2 - 4), \ \widehat{H}_0^{(2)} = [g \Delta B + \Delta g (B + \Delta B)] \mu_B \widehat{S}_{2Z}. \end{split}$$

Члены гамильтониана (2) целесообразно сгруппировать следующим образом: $\hat{H}=\hat{H}_0^{(1)}+[\hat{H}_0^{(2)}+\hat{V}_{SS}]=\hat{H}_0^{(1)}+\hat{V}$. Нетрудно заметить, что состояния парного базиса $\left|JM\right>$ являются собственными для гамильтониана $\hat{H}_0^{(1)}$, а для $\hat{H}_0^{(2)}$ – нет. Таким образом,

$$\widehat{H}_0^{(1)} | JM \rangle = \left[g \mu_B BM - J_{exc} J(J+1) - 4 \right] | JM \rangle, M = m_1 + m_2, \tag{3}$$

в то время как операторы $\widehat{H}_0^{(2)},\widehat{V}_{SS}$ будут индуцировать переходы между состояниями парного базиса $|JM\rangle$. Ниже будем использовать гамильтониан $\widehat{H}_0^{(1)}$ в представлении взаимодействия, а оператор $\widehat{V}=\widehat{H}_0^{(2)}+\widehat{V}_{SS}$ рассматривать как возмущение.

Спиновой оператор плотности $\hat{\rho}(t)$ Т-Т-пары в представлении взаимодействия

$$\widehat{\rho}_{I}(t) = \exp\left[i\hbar^{-1}\widehat{H}_{0}^{(1)}t\right]\widehat{\rho}(t)\exp\left[-i\hbar^{-1}\widehat{H}_{0}^{(1)}t\right]$$
(4)

удовлетворяет уравнению с нелинейностью второго порядка по возмущению $\widehat{V} = \widehat{H}_0^{(2)} + \widehat{V}_{SS}$

$$\frac{d}{dt}\widehat{\rho}_{I}(t) = -\frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{t} \left[V_{I}(t), V_{I}(t'), \widehat{\rho}_{I}(t')\right] dt', \qquad (5)$$

$$\widehat{V}_{I}(t) = \exp\left[i\hbar^{-1}\widehat{H}_{0}^{(1)}t\right] \widehat{V} \exp\left[-i\hbar^{-1}\widehat{H}_{0}^{(1)}t\right].$$

Тогда приближенное решение уравнения (5) можно представить в виде

$$\hat{\rho}_{I}(t) = -\frac{1}{\hbar^{2}} \int_{0}^{t} \int_{0}^{t'} V_{I}(t'), \ V_{I}(t''), \ \hat{\rho}_{I}(0) \ dt'' dt'.$$
 (6)

Начальная матрица плотности $\langle JM \, | \, \widehat{\rho}(0) | J'M' \rangle$ может быть выбрана в диагональной форме $\langle JM \, | \, \widehat{\rho}(0) | J'M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} (1 - \delta_{J0}) \, / \, 9$, с опустошенной населенностью синглетного состояния $|00\rangle$. Тогда для синглетного матричного элемента $\langle 00 \, | \, \widehat{\rho}(t) \, | \, 00 \rangle = \rho_{00}(t)$ из (6) получаем

$$\rho_{00}(t) = \frac{2}{9} \sum_{J \neq 0, M} \left| \left\langle 00 \middle| V \middle| JM \right\rangle \right|^2 \frac{\left[1 - \cos \left(E_{JM} - E_{00} \right) t \middle/ \hbar \right]}{\left(E_{JM} - E_{00} \right)^2}, \tag{7}$$

где энергия нулевого приближения состояний $| JM \rangle$ определяется из (3):

$$E_{IM} = g \mu_B BM - J_{avg} J(J+1) - 4$$
, (8)

а матричные элементы оператора возмущения

(9)

$$\left|\left\langle 00 \middle| \widehat{V} \middle| JM \right\rangle \right|^{2} = \left|\left\langle 00 \middle| \widehat{H}_{0}^{(2)} \middle| JM \right\rangle \right|^{2} + \left|\left\langle 00 \middle| \widehat{V}_{SS} \middle| JM \right\rangle \right|^{2} + 2 \operatorname{Re} \left\langle 00 \middle| \widehat{H}_{0}^{(2)} \middle| JM \right\rangle \left\langle 00 \middle| \widehat{V}_{SS} \middle| JM \right\rangle$$

Входящие в (9) ненулевые матричные элементы это $\langle 00|\hat{V}_{SS}|2M\rangle$ с $M=0,\pm 2$ и $\langle 00|\hat{H}_0^{(2)}|10\rangle = -6^{-1/2}2\mu_B[\Delta gB+(g+\Delta g)\Delta B]$. Таким образом, во втором порядке по возмущению $\hat{V}=\hat{H}_0^{(2)}+\hat{V}_{SS}$ вклад от третьего – интерференционного слагаемого с удвоенной реальной частью отсутствует. Перемешивание спин-спинового и Δg -механизмов будет иметь место в теории возмущений более высокого порядка, или в общей теории, не предполагающей малости рассматриваемых типов магнитных взаимодействий по сравнению друг с другом. Следует отметить, что возмущение $\hat{H}_0^{(2)}$ перемешивает между собой и состояния $|10\rangle$ и $|20\rangle$: $\langle 10|\hat{H}_0^{(2)}|20\rangle = -(3^{-1/2}/6)\mu_B[\Delta gB+(g+\Delta g)\Delta B]$, однако в рамках принятой модели прямого вклада в (9) это не дает, но может играть роль при включении дополнительного взаимодействия между состояниями $|JM\rangle$. В общем случае оператор $\hat{H}_0^{(2)}$ перемешивает лишь состояния с одинаковой проекцией спина M, но различными J,J':

$$\langle J'M | \hat{H}_{0}^{(2)} | JM \rangle = -\hbar \delta\omega \sum_{m} \left[C_{1m,11}^{J'M} C_{1m,11}^{JM} - C_{1m,1-1}^{J'M} C_{1m,1-1}^{JM} \right],$$

где $C^{JM}_{j_1m_1,j_2m_2}$ — коэффициенты Клебша-Гордона, $\delta\omega=\mu_B[g\Delta B+\Delta g(B+\Delta B)]/\hbar$.

Общее решение спиновой задачи в операторной форме известно даже в случае явного учета [4] актов аннигиляции в спиновой динамике

$$\widehat{\rho}(t) = \exp(-K_{-1}t)\exp(\widehat{K}t)\widehat{\rho}(0)\exp(\widehat{K}^*t), \qquad (10)$$

где неэрмитовы операторы \hat{K} и \hat{K}^* определены выражениями

$$\widehat{K} = -\frac{i}{\hbar} \left(\widehat{H} - i \frac{\hbar}{2} \widehat{\Lambda} \right), \quad \widehat{K}^* = \frac{i}{\hbar} \left(\widehat{H} + i \frac{\hbar}{2} \widehat{\Lambda} \right),$$

а $\widehat{\Lambda} = K_{S} |00\rangle\langle 00|$ — оператор Т-Т-аннигиляции, K_{S} — скорость ее элементарного акта, K_{-1} — скорость неаннигиляционного распада когерентной Т-Т-пары. Скорость распада K_{-1} может быть отождествлена со скоростью десорбции Т-молекулы в объем вне наночастицы, либо со скоростью ее спиновой релаксации — в зависимости от того, какая из этих двух скоростей больше. Однако практическая реализация операторной формы (10) в полном базисе $|JM\rangle$ спиновых состояний Т-Т-пары может быть осуществлена, в

отличие от [4], лишь численными методами, по причине большого размера матрицы $\langle J'M'|\rho|JM\rangle$. Использование теории возмущений различного порядка по взаимодействию $\hat{V}=\hat{H}_0^{(2)}+\hat{V}_{SS}$ удобно еще и потому, что позволяет представить в явном виде и проследить вклад различных механизмов в общую спиновую динамику Т-Т-пары, а также выявить эффекты интерференции между ними, как, например, это было сделано на основе выражения (9). Последовательный переход от (10) к (7), по-видимому, возможен, и может быть осуществлен, например, в результате частичного разложения операторных экспонент (10) с учетом всех коммутационных соотношений между операторами.

Кросс-аннигиляция с двумерной диффузией на сферической поверхности

Одночастичная функция Грина $G(\theta, \phi, t \,|\, \theta', \phi', \tau)$ уравнения диффузии на поверхности сферы радиуса R с коэффициентом диффузии $D_\Omega = D_R \,/\, R^2$ в угловом пространстве $\Omega = (\theta, \phi)$ и начальным условием в момент τ

$$G(\theta, \varphi, \tau \mid \theta', \varphi', \tau) = (1/2\pi)\delta(\cos\theta - \cos\theta')\delta(\varphi - \varphi'). \tag{11}$$

имеет вид [9]

$$G(\theta, \varphi, t \mid \theta', \varphi', \tau) = \frac{1}{4\pi R^2} \sum_{l} (2l+1) \exp -D_{\Omega} l(l+1)(t-\tau) P_{l}(\cos \beta_{1}), \quad (12)$$

где $\cos\beta_1=\cos\theta\cos\theta'+\sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')$, а $P_l(\cos\beta_1)$ — полином Лежандра степени l.

В условиях диффузии обеих Т-молекул на сфере S_R для аддитивной магниточувствительной части $K(\Omega_1',\Omega_2')$ константы скорости бимолекулярной реакции Т-Т-аннигиляции можем записать [9]

$$K(\Omega'_1,\Omega'_2) =$$

$$\int_{0}^{\infty} dt \iint_{S_{R}} U(l(\Omega_{1}, \Omega_{2})) \rho_{00}(\Omega_{1}, \Omega_{2}, t) G(\Omega_{1}, t \mid \Omega_{1}') G(\Omega_{2}, t \mid \Omega_{2}') \exp(-(K_{S} + K_{-1})t) R^{4} d^{2} \Omega_{1} d^{2} \Omega_{2}$$

где $d^2\Omega_j=\sin\theta_jd\theta_jd\varphi_j$, $l(\Omega_1,\Omega_2)=R\sqrt{2(1-\cos\beta_2)}$ — расстояние между двумя точками на сфере радиуса R; $\cos\beta_2=\cos\theta_1\cos\theta_2+\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)$; $U(l)=U_0\exp(-2l/l_0)$ - скорость элементарного акта TTA.

В случае, когда одна из Т-молекул неподвижна (локализована на магнитном полюсе наночастицы, например), угол $\beta_2 = \theta$, а выражение (13) значительно упрощается

$$K(B(0) | \Omega') = \int_{0}^{\infty} dt \int_{4\pi} U(l(\Omega)) \rho_{00}(B(\Omega), t) G(\Omega, t | \Omega') \exp(-(K_S + K_{-1})t) R^2 d^2 \Omega.$$
 (14)

На рис. 1-2 представлены результаты расчетов относительных изменений $\gamma = K(B(0)) - K(0) / K(0)$) магнитозависимой части $K(B(0) | \Omega')$ скорости Т-Т-аннигиляции, выполненных на основе (12), (14) для различных значений коэффициента диффузии мобильной триплетной молекулы (рис.1) и радиусов ферромагнитной наночастицы (рис. 2). Предполагалось, что gфакторы Т-молекул имели близкие значения, но неоднородность магнитного поля на поверхности наночастицы учитывалась в явном виде посредством выражения: $\mathbf{B}(\theta) = \mathbf{B}(0)(3\cos^2\theta - 1)$, где $\mathbf{B}(0) = \mu_B / R^3$. Таким образом, во внимание принимались как взаимодействия тонкой энергетической структуры связанные c оператором спин-спинового взаимодействия $\hat{V}_{cc} = -\hat{\mathbf{S}}_1 \ddot{\mathbf{D}}_1 \hat{\mathbf{S}}_1 - \hat{\mathbf{S}}_2 \ddot{\mathbf{D}}_2 \hat{\mathbf{S}}_2$, так и своеобразный дельта В-механизм (или grad $B(\mathbf{r})$ полевой механизм) влияния неоднородности на спиновую молекулярной Т-Т-пары.

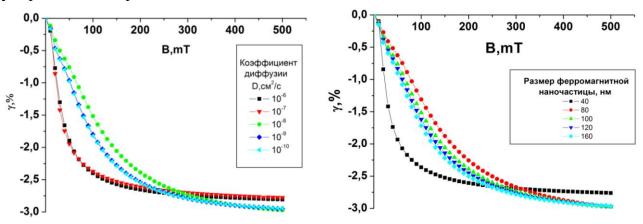


Рис. 1. Относительные изменения магнитозависимой части константы скорости аннигиляции Тсостояний молекул на поверхности ферромагнитной наночастицы радиуса R=10 нм ДЛЯ различных значений коэффициента поверхностной диффузии D (на врезке). Расчеты на основе формул (12) и (14). Значение частоты обменного взаимодействия $\omega_{exc} = |J_{exc}| J(J+1) - 4|/\hbar = 3.5 \Gamma \Gamma$ ц.

Рис. 2. Относительные магнитозависимой части изменения константы скорости аннигиляции Тсостояний молекул на поверхности ферромагнитной наночастицы различных значений ее радиуса R (на врезке). Коэффициент поверхностной диффузии мобильной молекулы $D = 10^{-}$ 6 см 2 /с. Расчеты на основе выражений (12)(14).Значение И частоты обменного взаимодействия $\omega_{avc} = 3.5$ ГГи.

При значениях обменной частоты $\omega_{exc} = |J_{exc}| J(J+1) - 4|/\hbar > 5$ ГГц и коэффициенте поверхностной диффузии мобильной молекулы $D=10^{-6}$ см 2 /с в области малых значений индукции B(0) магнитного поля наблюдался положительный эффект — рост константы K (около 1%) с увеличением поля B(0) на полюсе наночастицы.

Работа выполнена по Госзаданию № 3.7758.2017/БЧ Министерства образования и науки РФ.

Список литературы

- 1. *Krishnan K. M.* Nanomagnetism and spin electronics: materials, microstructure and novel properties / Krishnan K. M., Pakhomov A. B., Bao Y., Blomqvist P., Chun Y., Gonzales M., Griffin K., Ji X., Roberts B. K. // J. Mater. Sci. 2006. V. 41. P. 793–815.
- 2. *Roca A. G.* Magnetite nanoparticles with no surface spin canting / Roca A. G., Niznansky D., Poltierova-Vejpravova J., Bittova B., Gonzalez-Fernandez M.A., Serna C. J., Morales M. P. // J. Appl. Phys. 2009. V. 105. P. 114-309.
- 3. *Губин С.П.* Магнитные наночастицы: метод получения, строения и свойства / Губин С.П., Кокшаров Ю.А., Хомутов Г.Б., Юрков Г.Ю. // Успехи химии. 2005. Т. 74. С. 539-574.
- 4. *Кучеренко М. Г., Неясов П. П.* Особенности спиновой динамики и аннигиляции триплетных молекулярных возбуждений в нанореакторах с ферромагнитными частицами // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20, N 1. С. 33-48.
- 5. Неясов П.П., Алимбеков И.Р. Синтез и стабилизация магнитных наночастиц магнетита для нанореакторов на основе Al_2O_3 и силохрома С-80 / Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Универс-ий комплекс как регион. центр образов. науки и культуры. Оренбург гос. ун-т. 2018. С. 2585-2593.
- 6. Atkins P.W., Evans G. T. Magnetic field effects on chemiluminescent fluid solutions. Molecular Physics. 1975. Vol. 29. -№ 3. P. 921-935.
- 7. *Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.* RYDMR спектры когерентных пар триплетных молекул, участвующих в аннигиляции электронных возбуждений // Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Универ-ий комплекс как регион. центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2014. С. 1431-1438.
- 8. *Johnson R.C., Merrifield R.E.* Effects of magnetic fields on the mutual annihilation of triplet excitons in anthracene crystals // Phys. Rev. B. 1970. -V.1. -N2. -P. 896-902.
- 9. *Кучеренко М.Г.* Спин-селективная кросс-аннигиляция диффузионно- подвижных квазичастиц в оболочке намагниченного нанокора // Вестник ОГУ. 2019.-№2. (В печати).

СРЕДА ДНК – ОРГАНИЧЕСКИЙ КРАСИТЕЛЬ ДЛЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗАПИСИ

Лантух Ю. Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Пашкевич С. Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Летута С. Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алиджанов Э. К., канд. физ.-мат. наук, доцент, Тихонов Г.А.

Оренбургский государственный университет

Молекулы ДНК, содержащие множество водородных связей между комплементарными составляющими, являются одними из перспективных и удобных конструктивных блоков в «программируемой» архитектуре нанометрового масштаба для создания органических и гибридных сред с использованием *bottom ир* подхода. Разработке новых наноструктурных материалов на основе ДНК и другим применениям в нанотехнологиях посвящено в последнее время значительное число работ [1-4].

Способность ДНК формировать устойчивые комплексы с противоионами различной природы, в частности с молекулами органических красителей, может быть использована при создании новых регистрирующих сред для голографии и оптической обработки информации. Нуклеиновые кислоты не обладают светочувствительностью в видимой области спектра (максимум поглощения оснований ДНК находится в районе 260 нм), поэтому создание материалов для оптоэлектронных приложений требует введения в их состав спектральных сенсибилизаторов. В качестве таковых могут быть использованы катионные красители различных классов, которые образуют с ДНК два типа комплексов: интеркалирование в двойную спираль ДНК и внешнее связывание.

В настоящей работе представлены результаты голографической записи в регистрирующей среде на основе пленочных форм ДНК, активированной молекулами красителей, характеризующихся различной способностью к образованию комплексов с ДНК. Ранее нами сообщалось о получении образцов пленок ДНК - краситель оптического качества и записи голографических решеток различных типов в такой системе [5]. Целью данной работы являлось выявление особенностей записи в пленочных образцах ДНК, содержащих два красителя: Родамин 6Ж (Р6Ж) и Акридиновый оранжевый (АО).

Материалы и методы исследования

Родамин 6Ж — катионный краситель ксантенового ряда, не способный к интеркаляции между основаниями ДНК вследствие стерических затруднений. Молекулы Р6Ж взаимодействуют с ДНК по типу внешнего связывания и обладают при этом способностью к ассоциации. Акридиновый оранжевый — известный интеркалятор по отношению к нуклеиновым кислотам, который, тем не менее, вследствие чрезвычайно высокой способности к димеризации,

образует с ДНК также и комплексы внешнего типа, в которых краситель присутствует в основном в виде димеров.

Структурные формулы красителей, используемых в работе, приведены на рисунках 1 и 2.

Пленки ДНК с красителями на стеклянных и кварцевых подложках получали исключением растворителя из исходного раствора. Соотношение содержания ДНК и красителя в растворе, выражаемое отношением r концентрации нуклеотидов к концентрации красителя, изменялось в пределах от 5 до 200.

Электронные спектры поглощения пленочных образцов ДНК-краситель регистрировали на спектрофлуориметре «Флюорат-02-Панорама» (С.Петербург, ООО Люмэкс) и оптоволоконном спектрометре «AvaSpec 2048» (Avantes, Holland). Спектры приведены на рисунках 1 и 2.

Исследование структуры пленок методами ИК-спектроскопии [6] показало, что при комнатной влажности ДНК в пленке денатурирована, а при относительной влажности 95% имеет форму двойной спирали.

Из рисунка 1 видно, что значительная часть Р6Ж в пленке связана с ДНК в виде димеров (полоса с максимумом в области 500 нм). Спектр поглощения пленки АО-ДНК (рисунок 2) при комнатной влажности (40%) свидетельствует о существенной доле димеров, связанных с ДНК по внешнему типу. Однако при увлажнении такой пленки форма спектра изменяется – димерный максимум исчезает, а мономерный растет. Это свидетельствует о том, что димеры начинают разрушаться и мономерные молекулы интеркалируют внутрь двойной спирали.

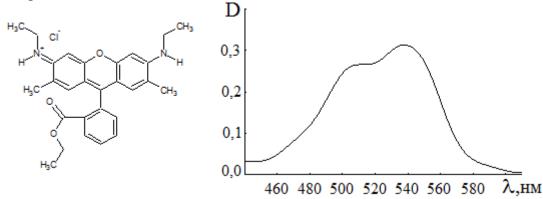


Рисунок 1 — Структурная формула Р6Ж и спектр поглощения пленки ДНК-Р6Ж, r = 20

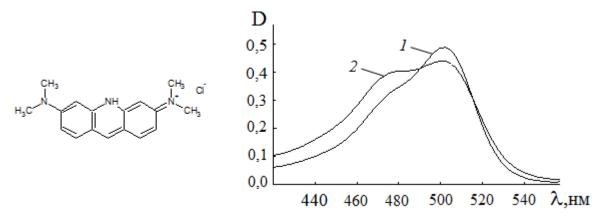


Рисунок 2 – Структурная формула AO и спектр поглощения пленки ДНК-AO,

r = 50 при различных уровнях о.в.: 1 - 95%, 2 - 40%

Голографические эксперименты проводили на установке, которая описана в [5]. Установка позволяла в качестве записывающего лазера использовать следующие источники:

- импульсный YAG-Nd лазер LQ-129 ($\tau=15$ нс), основная частота и три гармоники (1064 266 нм);
- непрерывный YAG-Nd лазер с диодной накачкой $KLM-532 \backslash SLN$ (532 нм, 100 мВт);
- Ar-ion лазер с перестройкой в диапазоне 514-473 нм, с эталоном Фабри-Перо.

Считывание голографических решеток осуществляли He-Ne лазером (λ = 633 нм, P = 20 мВт) в первом порядке дифракции.

Вследствие наличия в сигнале дифракции когерентной шумовой составляющей применялась оптическая схема с гетеродинным детектированием. Период голографических решеток составлял 2 – 3 мкм.

Сигналы дифракции регистрировались фотоэлектронным умножителем, поступали в электронную схему обработки (усиление, аналого-цифровое преобразование, накопление и усреднение) и выводились на компьютер. Временное разрешение установки составляло 1,5 мкс.

Результаты и обсуждение

Установлено, что в пленках ДНК-Р6Ж и ДНК-АО при импульсной записи в полосе поглощения красителя возможна реализация нескольких типов голографической записи. Регистрировались динамические голографические решетки на триплетных состояниях красителя, тепловые и рельефно-фазовые голограммы-решетки (РФГ) недеструктивного типа. Эффективность и другие параметры этих решеток существенно зависят от концентрации красителясенсибилизатора, типа связывания его с биополимером, влагосодержания пленки ДНК и энергии записывающих импульсов.

Особенностью пленок ДНК – Р6Ж как голографического материала чувствительность записи повышенная К самостирающихся РФГ высокоэффективных (c ДЭ 20%) вследствие до структурных преобразований биополимерной матрицы. Подробная характеристика этого типа записи была дана в работах [5] и [7]. Причиной такого поведения образцов ДНК-Р6Ж являются на наш взгляд два фактора. Во-первых, это возможность создавать большие концентрации агрегатов красителя, связанных с молекулой ДНК. Во-вторых, Р6Ж в пленках ДНК-Р6Ж (как мономеры, так и агрегаты) не обладает способностью к люминесценции. Отсюда следует, что канал безызлучательной (тепловой) дезактивации энергии электронного возбуждения является преобладающим. Но, как было показано в [7], именно тепловыделение ответственно за формирование рельефно-фазовых решеток в пленках ДНК с выступающим в качестве теплового сенсибилизатора, при красителем, соответствующей плотности мощности записи.

Другой особенностью пленок Р6Ж как среды для голографической записи является большое (свыше 1 секунды) время жизни динамических голограмм на триплетных состояниях красителя. Эта особенность объясняется малым (порядка 1%) квантовым выходом в триплетное состояние для Р6Ж и ограниченной проницаемостью для кислорода (тушителя триплетов) пленки ДНК. В этом случае предпочтительным источником для записи является непрерывный (Ar-ion или YAG-Nd) лазер.

Как отмечалось выше, в образцах ДНК-АО краситель образует два типа комплексов с ДНК: I - интеркаляционного типа (мономеры) и II – с внешним связыванием (димеры). Соотношение N между долями AO, связанного с ДНК типу зависит OT концентрации красителя каждому (приготовленном для образования пленки) растворе. Пленки ДНК-АО являются средой, чувствительной для записи динамических голограмм на триплетных состояниях красителя. На рисунке 3 представлены кинетические кривые затухания триплетных голограмм для образцов ДНК-АО-І и ДНК-АО-ІІ, состоящих преимущественно из комплексов I и II, кривые 1 и соответственно, из которых видно, что «димерные» образцы демонстрируют более высокую скорость релаксации.

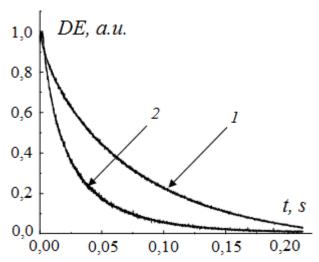


Рисунок 3 — Кинетика релаксации триплетных голограмм на образцах ДНК-AO-I (1) и ДНК-AO-II (2)

Как следует из рисунка 2, соотношение N может изменяться при изменении относительной влажности воздуха в окружении образца. При увеличении о.в. комплексы II разрушаются, и мономерные молекулы AO переходят в комплексы I.

Из рисунка 3 видно, что время жизни триплетных голографических решеток в среде АО – ДНК может служить мерой соотношения между комплексами I и II в образце. На основе такой зависимости нами предлагается реализация голографического датчика влажности окружающей образец воздушной среды.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, проект № 3.6358.2017/БЧ.

Список литературы

- 1. Ohya, Y. Dye molecular arrangement based on hybridization of DNA / Yuichi Ohya // Proc. of SPIE, 2008. Vol. 7040. P. 70400G-1 –13
- 2. Mysliwiec, J. Applications of the DNA-based material for lasing and dynamic holography / J. Mysliwiec L. Sznitko, B. Smoczynska, et al // Proc. of SPIE, $2009. Vol.\ 7213. P.\ 72130I-1 7$.
- 3. Mihaly, M. Biomaterials based on DNA embedded in silica matrix / M. Mihaly, A. Comanescua, et al // Proc. of SPIE, 2009. Vol. 7403 P. 740308-1 9.
- 4. Ogata, N. Novel Applications of DNA Materials / N. Ogata, K. Yamaoka, J. Yoshida // Proc. of SPIE, 2009. Vol. 7403. P. 740305-1 15.
- 5. Лантух, Ю.Д. Формирование и релаксация голографических решеток в пленках нуклеиновых кислот с органическими красителями / Ю.Д. Лантух, С.Н. Пашкевич, С.Н. Летута, Э.К. Алиджанов, А.А. Кульсарин // Труды 5-й Международной конференции ГОЛОЭКСПО-2008, Санкт-Петербург, 2008. С. 241—244.

- 6. Lantukh, Yu. Investigation of DNA acridine orange biopolymer films by holographic and spectroscopic techniques / Yu. Lantukh, S. Paschkevich, S. Letuta, G. Ketsle, E. Alidjanov, A. Kulsarin // Proc. of SPIE, 2008. Vol. 7006. P. 700614-1-8.
- 7. Lantukh, Yu. D. Holographic investigation of DNA activated by organic dyes / Yu. D. Lantukh, G. A. Ketsle, S. N. Letuta, S. N. Pashkevitch, E. K. Alidzhanov, I. V. Ipatov // Proc. of SPIE, 2004. Vol. 5447. P. 375 380.

ФОТОИНАКТИВАЦИЯ МИКРООРГАНИЗМОВ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ

Летута С.Н., д.ф.-м.н., проф., Пашкевич С.Н., к.ф.-м.н., доц., Летута У.Г., к.ф.-м.н., доц., Ишемгулов А.Т., Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е., Дорошкевич А.В. Оренбургский государственный университет

Рассматривается механизм фототермической инактивации бактерий, основанный на формировании ударных волн в локально разогретых областях среды. Локальный разогрев возникает в результате тепловыделения при высоких релаксаиии электронных возбужденных фотосенсибилизаторов (ΦC) , или группы рядом расположенных Выделившегося тепла достаточно для испарения воды и образования пузырьков, возникновение и схлопывание которых порождает ударные волны. Распространяясь в среде, ударные волны механически повреждают мембраны клеток.

Количество штаммов, устойчивых к действию традиционных антимикробных препаратов, непрерывно увеличивается (см. обзор [1] и приведенные там ссылки). Поэтому требуются новые безопасные противомикробные стратегии, действующие быстро и эффективно, и к которым микробные агенты не смогут легко вырабатывать резистентность.

Разрабатываются различные способы воздействия на бактерии и грибы. Известны применения пробиотиков, различных ферментов и бактериофагов для борьбы с патогенными микроорганизмами. Для предотвращения формирования биопленок (БП) на твердых поверхностях снижают адгезию бактерий к поверхности путем ее химической модификации или наносят частицы, обладающие бактерицидными свойствами. Предпринимаются попытки блокирования синтеза или разрушения полимерного матрикса, нарушения обмена информацией между клетками, называемого «чувством кворума». Приведенные отдельные примеры – лишь малая доля находящихся в разработке методов борьбы с бактериями. Однако необходимо признать, что единого способа, которым специфически и полностью уничтожаются бактерии, пока не разработано. По-видимому, такого способа не существует вообще. альтернативные разработки инактивации патогенных микроорганизмов актуальны и востребованы.

Один из эффективных способов воздействия на живые микроорганизмы — фотодинамическая обработка. В настоящее время установлены механизмы фотодинамического действия и определена роль в них активных форм кислорода (АФК). Однако исследования далеко не завершены, особенно для сред с ограниченным содержанием кислорода. К таким средам относятся,

например, БП, в которых аэрирован только поверхностный слой и внутри пленки практически не формируются АФК.

Для повышения эффективности фотодеструкции бактерий в настоящей работе предложено наряду с окислением субстрата АФК дополнительно «включить» реакции с участием высоких электронно-возбужденных состояний (ВЭВС) фотосенсибилизаторов. Для этого, вместо традиционного возбуждения ФС непрерывным светом низкой интенсивности, воздействие на ФС производилось короткими импульсами высокой интенсивности. При этом значительная доля поглощаемой энергии неизбежно трансформируется через их ВЭВС. Энергообмен с окружением в ходе дезактивации ВЭВС молекул, в свою очередь, инициирует первичные физико-химические процессы, которые влияют на жизнеспособность бактерий.

Некоторые результаты фотоинактивации микроорганизмов с участием ВЭВС молекул ФС представлены в настоящей статье.

Исследованы культуры клеток *Escherichia coli* в физрастворе при нормальных условиях. Выживание бактерий после облучения видимым светом в присутствие ФС определялось посредством подсчёта колониеобразующих единиц (КОЕ). В качестве ФС использовались органические красители—анионы эритрозин и эозин, а также краситель-катион родамин 6Ж.

Фотосенсибилизаторы облучались излучением второй гармоники твердотельного лазера на YAG:Nd, работающего в импульсно-периодическом режиме. Параметры возбуждения: длина волны $\lambda = 532$ нм, длительность импульса 15 нс, плотность мощности излучения (1-50) MBT/см².

Информацию о релаксации возбужденных состояний ФС получали по кинетике их замедленной флуоресценции и фосфоресценции, которые регистрировались с помощью ФЭУ-84 через монохроматор МДР-41.

Дополнительные сведения о процессах в растворах, содержащих бактерии и Φ C, при воздействии на них интенсивным (свыше 10 MBT/cm^2) возбуждающим светом, получали по рассеянию зондирующего излучения гелий-неонового (He-Ne) лазера. С помощью цилиндрической линзы в кювете с исследуемым раствором формировалась узкая протяженная ($0.3 \times 10 \text{ мм}^2$) зона возбуждения. Вдоль нее пропускался зондирующий луч He-Ne лазера диаметром 1 мм. Нерассеянная часть этого луча блокировалась 3 мм экраном в непосредственной близости от линзы, которая собирала рассеянное излучение на входной щели монохроматора. Кинетика изменения интенсивности рассеянного света измерялась с помощью Φ ЭУ.

Синхронизация запуска лазера и регистрирующей системы, а также сбор, накопление и обработка сигналов производились в автоматизированном режиме.

Существование эффективной интеркомбинационной конверсии (ИКК) из высоких синглетных S_n состояний многоатомных молекул экспериментально доказано и теоретически обосновано [2]. Показано, что квантовый выход ИКК из S_n состояний, примерно на 25 - 30 % превышает выход в триплетное состояние с нижних S_1 возбужденных уровней.

На рисунке 1 представлена зависимость интенсивности 3Φ эозина (c=0.1 мM) в физрастворе от плотности мощности возбуждающего излучения длины волны $\lambda=532$ нм. При увеличении мощности возбуждающего света интенсивность 3Φ красителей очень быстро нарастает (участок в диапазоне $1\div 5 \text{ MBt/cm}^2$), достигая насыщения, что связано с выходом на насыщение заселенности T_1 состояний молекул, образовавшихся в результате $S_1 \rightarrow T_1$ ИКК. При дальнейшем повышении плотности мощности возбуждающего излучения интенсивность 3Φ эозина начинает вновь заметно увеличиваться. Это указывает на двухквантовый характер образования триплетных состояний молекул в результате последовательности переходов $S_1 \rightarrow S_n \rightarrow T_m \rightarrow T_1$.

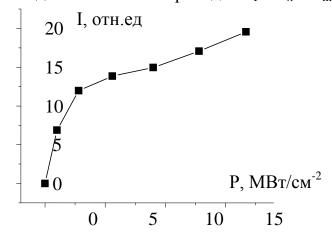


Рисунок 1 — Зависимость интенсивности ЗФ эозина (c = 0.1 мM) в физрастворе от плотности мощности возбуждающего излучения длины волны $\lambda = 532 \ \mathrm{HM}$

На рисунке 2 представлены гистограммы КОЕ клеток *Escherichia coli* после облучения светом длины волны $\lambda = 532$ нм и плотности мощности $20~\mathrm{MBt/cm^2}$.

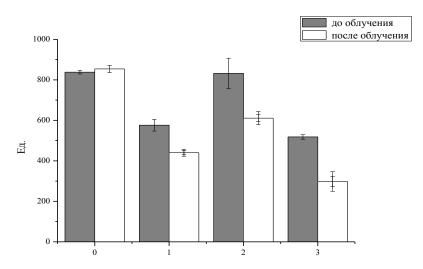


Рисунок 2 — Гистограммы КОЕ клеток *Escherichia coli* до и после облучения растворов светом длины волны $\lambda = 532$ нм и плотности мощности 20 MBт/см² без красителей (0) и в присутствие красителей концентрации 0.1 мМ:

1 – эритрозин, 2 – эозин, 3 – родамин 6Ж

Видно, что и ксантеновые красители, и родамин 6Ж проявляют высокую фотодинамическую активность. Между тем, эти красители существенно различаются и по-разному взаимодействуют с бактериями. Известно, что в фотодинамических процессах основная функция ФС — генерация АФК, индуцирующих окислительные деструктивные процессы в среде. Ксантеновые сенсибилизаторы обладают большим квантовым выходом в триплетное состояние и с высокой эффективностью генерируют синглетный кислород [3-5]. Однако обращает на себя внимание то, что эозин, имея выход в триплетное состояние почти на 30% меньше, чем эритрозин, в условиях наших экспериментов оказывает ФДД не меньше, а даже больше, чем эритрозин. Родамин 6Ж в физрастворе имеет выход в триплетное состояние только 0,01 и практически не производит АФК, но его ФДД больше, чем у ксантеновых красителей. Таким образом, фотоинактивация бактерий в условиях наших экспериментов преимущественно осуществлялась не через АФК, а по другим механизмам.

Мы полагаем, что процессы фотоинактивации идут с участием ВЭВС молекул ФС. Релаксация высоковозбужденных синглетных состояний молекул возможна по одному из следующих каналов [2]:

- излучение (флуоресценция $S_n \rightarrow S_i$ или $T_m \rightarrow T_i$);
- интеркомбинационная синглет-триплетная $S_n \to T_m$ или обратная триплет-синглетная $T_m \to S_k$ конверсия;
 - безызлучательная внутренняя конверсия;
 - фотохимическая реакция;
 - перенос энергии на молекулы окружения.

Как видно, энергообмен ФС с биообъектами может осуществляться при фотохимических реакциях, в результате прямой безызлучательной передачи энергии фотовозбуждения или посредством тепловыделения.

Безызлучательная релаксация S_n состояний ΦC в среде сопровождается выделением тепла. Учитывая крайне малое время жизни (<<1 нс) S_n состояний молекул, ΦC можно рассматривать как мгновенные точечные источники. Ввиду большой удельной теплоемкости среды маловероятно ожидать, что при релаксации S_n состояния одной молекулы ΦC заметно изменится локальная температура среды. Однако с учетом неравномерного распределения ΦC в пространстве между бактериями или на поверхности клеточных стенок могут быть сосредоточены группы молекул. При близком расположении групп ΦC можно ожидать существенного локального разогрева микрообластей растворов.

При локальном разогреве среды возможны два основных канала деструкции бактерий:

- гибель клеток в результате локальной гипертермии;
- разрушение мембран клеток или внутриклеточных объектов ударными волнами, возникающими при образовании и схлопывании пузырьков при испарении воды в локально разогретых микрообластях.

В результате безызлучательной релаксации ВВЭС каждый ФС при однократном поглощении кванта света длиной волны 532 нм будет выделять количество теплоты, равное энергии hv этого кванта. Если принять, что это тепло мгновенно усваивается сферой среды радиуса r, то можно оценить изменение температуры этой сферы: $hv = \frac{4}{3}\pi r^3 C\rho\Delta T$.

Мы использовали растворы концентрацией $c=0.01\,\mathrm{mM}$. Поскольку количество квантов возбуждающего излучения примерно в 10^6 раз больше, чем количество молекул ΦC в облучаемом объеме, то можно считать, что возбуждаются все облучаемые ΦC . При плотности мощности выше $20\,\mathrm{MBt/cm^2}$ с высокой эффективностью заселяются S_n состояния молекул ΦC (см. комментарий к рис. 1). Кроме того, каждая молекула ΦC за время τ , равное длительности возбуждающего импульса ($\tau=15\,\mathrm{hc}$) может неоднократно поглотить квант hv, совершая переходы $S_I {\leftrightarrow} S_n$ (а также $S_I {\to} S_n {\to} T_\mathrm{m} {\to} S_I,$ или $T_1 {\leftrightarrow} T_\mathrm{m},$ или $T_1 {\to} T_\mathrm{m} {\to} S_I {\to} T_I).$

Оценка времени остывания локально разогретых областей и величины ΔT для сфер различного радиуса произведена в [2, 6]. Реальный физический размер зоны разогрева зависит от конкретных каналов релаксации энергии, присущих данной среде. Используя типичные значения термодинамических параметров $C \sim 4\cdot 10^3~\rm{Дж/(kr\cdot K)}$ и $\rho \sim 10^3~\rm{kr/m^3}$), можно провести оценку уровня локального нагрева среды. Если принять радиус разогреваемой сферы равным 10 нм, то одиночные ΦC остывают за время около $10^{-8}~\rm{c}$. Если увеличить r до 100 нм, время остывания существенно увеличивается, но не превышает $10^{-6}~\rm{c}$. Для сферы радиуса 10 нм величина ΔT не выше 10 К. Однако уже для радиуса втрое меньше ΔT достигает почти 100 К. Выделившегося тепла вполне достаточно для испарения воды и возникновения пузырьков, образование и схлопывание которых порождает ударные волны. Распространяясь в среде, ударные волны механически повреждают белки, нуклеиновые кислоты или мембраны клеток.

Кинетика возникновения и исчезновения пузырьков в растворах исследована по рассеянию света He-Ne лазера. На рисунке 3 представлены типичные кинетические кривые изменения интенсивности света He-Ne лазера, прошедшего через кювету с эритрозином концентрацией 0.1 мМ в физрастворе при различной интенсивности возбуждения красителя. При малой плотности мощности (менее 10 MBt/cm^2) возбуждения интенсивность рассеянного света после возбуждения ΦC убывает. Это обусловлено тем, что при одноквантовом возбуждении в результате $S_I \rightarrow T_I$ ИКК образуются T_I состояния и появляется триплет-триплетное $T_1 \rightarrow T_{\rm m}$ поглощение. Этот сигнал убывает за несколько микросекунд, что соответствует времени жизни T_I состояний ΦC .

При высокой плотности мощности (15 MBт/см² и выше) возбуждения характер рассеяния кардинально меняется. Интенсивность рассеянного света увеличивается, а время релаксации возрастает до десятков миллисекунд, что существенно превышает время тепловой релаксации. Увеличение интенсивности рассеяния, по нашему мнению, обусловлено возникновением

пузырьков в локально разогретых областях среды при релаксации ВЭВС молекул красителей.

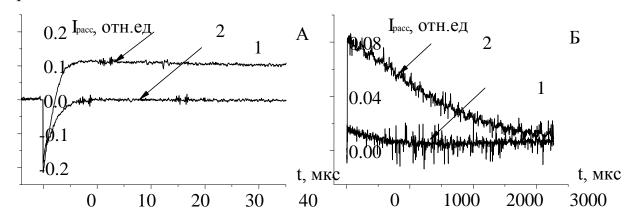


Рисунок 3 — Кинетические кривые изменения интенсивности рассеянного света от луча *He-Ne* лазера, проходящего через кювету с эритрозином концентрацией 0.1 мМ в физрастворе при различной интенсивности возбуждения красителя:

- a) 1-4.7 MBT/cm²; 2 42.2 MBT/cm²;
- б) 1 9.3 MBT/cm^2 ; 2 15.1 MBT/cm^2

Наряду с разрушением бактерий ударными волнами для родамина 6Ж возможны еще два механизма фотодеструкции микроорганизмов. Первый основан на прямой гипертермии бактерий в результате тепловыделения при релаксации ВЭВС красителя. В основе другого механизма фотодеструкции микроорганизмов лежит безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения с ВЭВС красителя на молекулы мембраны. При заселении ВЭВС молекул путем ступенчатого возбуждения двумя квантами света через нижнее синглетное состояние по схеме $S_0 \xrightarrow{h\nu} S_1 \xrightarrow{h\nu} S_n$. достигается энергия Φ С около 5 эВ. Такой энергии достаточно для разрыва любой химической связи.

Для определения вклада каждого из перечисленных альтернативных механизмов фотоинактивации микроорганизмов требуются дополнительные исследования.

Наконец, еще один возможный канал фотодеструкции бактерий — фотохимические реакции с участием ВЭВС молекул ФС. Фотохимические реакции сопровождаются изменениями кинетики затухания длительной люминесценции ФС, а также появлением новых полос в спектрах люминесценции и поглощения Нам не удалось обнаружить новых полос в спектрах люминесценции и поглощения, а также изменений кинетики затухания длительной люминесценции ФС.

Список литературы

1. Kashef, N. Advances in antimicrobial photodynamic inactivation at the nanoscale. Review article. / N. Kashef, Y. Huang, M.R. Hamblin // Nanophotonics. -2017.-V.6(5).-P.1-27.

- 2. Летута, С.Н. Фотопроцессы с участием высоких электронновозбужденных состояний многоатомных молекул. Автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук / С.Н. Летута. / Москва: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2003.
- 3. 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 // Journal of Photochemistry & Photobiology B. 2016. V. 163. P. 232–236.
- 4. Летута, С.Н. Кинетика длительной люминесценции молекулярных зондов в клетках биологических тканей / С.Н. Летута, В.С. Маряхина, С.Н. Пашкевич, Р.Р. Рахматуллин // Вестник Оренбургского государственного университета. 2011. N 1 (120). C. 183-187.
- 5. Ишемгулов, А.Т. Длительная люминесценция сенсибилизаторов в условиях дефицита кислорода в тканях при фотодинамическом эффекте / А.Т. Ишемгулов, С.Н. Летута, С.Н. Пашкевич, Э.К. Алиджанов, Ю.Д. Лантух // Оптика и спектроскопия. 2017. Т. 123. № 5. С. 818–824.
- 6. Кучеренко, М.Г. Кинетика нелинейных фотопроцессов в конденсированных молекулярных системах. / М.Г. Кучеренко. Оренбург: Изд-во ОГУ, 1997.

РАСЧЕТ ПОСТОЯННОЙ МАДЕЛУНГА ДЛЯ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА, АЛЛЮМИНИЯ И КАЛИЯ С КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИЕЙ

Макаров В.Н., Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор Оренбургский государственный университет

Рассмотрена специфика расчета постоянной Маделунга с помощью метода Харрисона, дополненным матричной моделью кристаллических решеток. Расчет постоянной Маделунга проведен для оксида железа, алюминия и кремния.

Ключевые слова: постоянная Маделунга, оксиды, кубическая сингония, метод Харрисона.

Полиморфизм характерен для большинства оксидов [1,2]. Далеким до завершения считается описание процессов полиморфных превращений простых оксидов под воздействием электромагнитных полей. Вопрос описания процессов полиморфного превращения оксидов актуален, поскольку из оксида кремния и оксидов металлов состоят природные алюмосиликаты, представляющих собой перспективное сырье для керамических технологий [3]. Воздействие электромагнитных полей на керамические материалы, состоящие преимущественно из оксидов кремния, железа, алюминия и небольшой доли оксида калия, были частично описаны в работах [4,5].

В элементарных ячейках оксидов алюминия, железа, и калия существуют ионное, ковалентные и незначительная доля металлического взаимодействия [6]. Для описания полиморфных превращений оксидов при воздействии микроволновых электромагнитных полей применяется подход энергетического формализма, т.е. рассчитываются величины ионной энергии в кристаллической решетке до и после полиморфных превращений. Диссипация энергии в кристалле определяет изменение ковалентной и металлической связи и структурные превращения в нем.

Для определения энергии ионной связи в оксидах Al, Fe, и K необходимо рассчитать постоянную Маделунга. В работе [7], где представлена наиболее обширная база значений постоянных Маделунга для различных кристаллических структур, отсутствуют указанные оксиды.

Существует множество методов расчета величины ионной связи в элементарной ячейке (метод прямого суммирования, методы Эвьена, Эвальда, и Харрисона). Метод Харрисона является одним из наиболее простых и точных способов вычисления кулоновской энергии в кристаллах. В работе [8] метод Харрисона дополнен матричной моделью кристаллических решеток, результаты апробации дополненного метода приведены в работах [8-10].

В настоящей работе при расчете постоянных Маделунга для указанных оксидов использован метод Харрисона дополненный матричной моделью кристаллических решеток. Подробнее опишем данный метод:

1. Задаются структурные матрицы местоположения частиц и матрицы электрических зарядов узлов ячейки, однозначно характеризующие рассматриваемую кристаллическую структуру и ее ионную модель.

Для задания структурных матриц местоположения частиц и матриц электрических зарядов вводится понятие универсальной количественной матрицы. Универсальная количественная матрица – однозначно характеризующая кристаллическую структуру называемой базовой кристаллической структурой. Базовая кристаллическая структура - это вспомогательная геометрическая структура, имеющая форму куба, с правильно расположенными и периодически повторяющимися узлами. В работе [8] данное понятие обозначается термином «трехмерный координационный слой». Мы считаем, что данный термин не отражает физическую составляющую модели и противоречия. Каждый следующий способен вызывать кристаллическая структура увеличивается в размерах во все стороны, на половину длины ребра (или на всю длину ребра в зависимости от геометрии решетки) первой базовой кристаллической структуры, а узлы транслируются поверхности. Универсальная количественная матрица кристаллической структуры имеет вид:

$$K_{l} = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 24 & 24 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 24 & 48 & 24 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 24 & 48 & 48 & 24 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 24 & 48 & 48 & 48 & \dots & 24 & 0 \\ 12 & 24 & 24 & 24 & \dots & 24 & 8 \end{bmatrix}$$

Структурные матрицы местоположения частиц - это матрицы, однозначно описывающие геометрическую структуру кристалла, которые содержат информацию о расположении частиц в узлах универсальной количественной матрицы (базовой кристаллической структуры). Обозначается как:

$$M = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1j} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{i1} & b_{i2} & \dots & b_{ij} \end{vmatrix}$$

Значение элемента структурной матрицы лежит в приделах от 0 (когда в узле нет частицы), до 1 - находится частица, заданная универсальной количественной матрицей.

При описания кристаллических структур необходим учет зарядов частиц, расположенных в узлах. Введем новый вид матрицы — матрица электрический зарядов, которая описывает электрические заряды узлов элементарной ячейки (или трехмерной координационной решетки), при этом элементами матрицы являются значения зарядов частиц кристаллической структуры:

$$C = \begin{vmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1j} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{i1} & c_{i2} & \dots & c_{ij} \end{vmatrix}.$$

Значения элементов (в зависимости от заряда узлов решетки) могут быть как отрицательными, так и положительными целыми числами. Если значение равно нулю – узел не содержит частиц.

- 2. Вводится значение L ($L \in N$) номера внешней базовой кристаллической структуры т.е. крайней учтенной при расчетах базовой кристаллической структуры. Расчет будет вестись от первой базовой кристаллической структуры до структуры базовой кристаллической структуры L.
- 3. Формируются матрицы, описывающие все базовые кристаллические структуры от 1 до L, при помощи трансляции.
- 4. Поэлементное умножение матриц K, M, C рассматриваемой базовой кристаллической структуры формирует матрицы для компактного описания кристаллической структуры S.

Матрица компактного описания кристаллической структуры - математическая модель, содержащая информацию о геометрическом расположении частиц и их зарядах, в виде элементов матрицы.

Матрица компактного описания кристаллической структуры:

$$D_{i,j} = \P \circ M_{\lambda,j}$$

Матрица компактного описания кристаллической структуры и распределения зарядов частиц:

$$S_{i,j} = \mathbf{\Phi} \circ C_{\mathbf{j},j}$$

5. Определяются граничные условия метода Харрисона (радиус R граничной тонкой оболочки) с помощью формулы $R = L \cdot k$,

где k - коэффициент перевода линейных величин. Для расчета k рассматривается расположение связей в элементарной ячейке (минимальное расстояние между катионом и анионом). Для этого производится перевод условной линейной величины межъядерного расстояния кристаллической структуры к значению длины ребра а элементарной ячейки.

6. Вычисляются суммы (2) для каждой из заданных базовых кристаллических структур, начиная с первой. Применяется граничное условие метода Харрисона, проверяющее соотношение:

$$R \ge k\sqrt{i-1^2 + j-1^2 + l^2} \,. \tag{1}$$

При выполнении граничного условия метода Харрисона (1) элементы матриц участвуют в расчете предварительного значения постоянной Маделунга:

$$A = \sum_{l=1}^{L} \sum_{j=1}^{l} \sum_{i=1}^{l} \frac{S_{i,j}}{k\sqrt{i-1^{2} + j-1^{2} + l^{2}}}.$$
 (2)

- 7. Суммируются полученные предварительные значения постоянной Маделунга. После суммируются величин зарядов, находящихся внутри сферы радиуса R, включая заряд центрального иона, вычисляется величина компенсирующего заряда Q.
 - 8. Рассчитывается конечное значение постоянной Маделунга по формуле:

$$A_{M} = A - \frac{Q}{R}$$

Метод Харрисона можно применять лишь для кубических сингоний. Для расчета выбраны оксиды железа, алюминия и калия кубической сингонии, параметры элементарных ячеек которых приведены в таблице 1.

Таблица 1 - Параметры кристаллических решеток для оксидов

| Оксид | Параметр элементарной ячейки a, Å | | |
|--|-----------------------------------|--|--|
| Al_2O_3 | 7,952 [11] | | |
| FeO | 4,357 [12] | | |
| γ -Fe ₂ O ₃ | 8,339 [12] | | |
| K_2O | 6,436 [13] | | |

Кристаллическая структура двухвалентного оксида железа задается с помощью тех структурного матриц местоположения частиц и трех матриц электрических зарядов. Их поэлементное умножение дает следующий результат:

$$\boldsymbol{M}_{1} \circ \boldsymbol{C}_{1} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & 2 \end{pmatrix}; \boldsymbol{M}_{2} \circ \boldsymbol{C}_{2} = \begin{pmatrix} -2 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -2 \end{pmatrix}; \boldsymbol{M}_{3} \circ \boldsymbol{C}_{3} = \boldsymbol{M}_{1} \circ \boldsymbol{C}_{1}.$$

Кристаллическая структура оксида калия задается с помощью пяти структурных матриц местоположения частиц и пяти матриц электрических зарядов. Их поэлементное умножение дает следующий результат:

$$M_4 \circ C_4 = M_2 \circ C_2;$$

 $M_5 \circ C_5 = M_1 \circ C_1.$

Кристаллическая структура трехвалентного оксида железа и трехвалентного оксида алюминия задается с помощью тех структурного матриц местоположения частиц и трех матриц электрических зарядов, которые имеют одинаковый вид из-за одинаковых пространственных групп кристаллов. поэлементное умножение матриц, описывающие эти кристаллы дает следующий результат:

Вычисление постоянной Маделунга для каждого оксида производилось с использованием 10 000 базовых кристаллических структур. Результаты сведены в таблицу 2.

Таблица 2 – Результаты расчетов постоянной Маделунга для оксидов

| Оксид | Постоянная Маделунга |
|----------------------------------|----------------------|
| Al_2O_3 | 4,6279785207111 |
| FeO | 3,4952096907570 |
| γ-Fe ₂ O ₃ | 4,6279785207111 |
| K ₂ O | 2,6747494729005 |

Результаты расчета будут использованы для оценок изменения энергии ионной связи с ионной энергией в ромбической и тетрагональной сингониях оксидов алюминия, железа и калия образующихся при воздействии микроволновых электромагнитных полей.

Авторы выражают благодарность магистранту Российского технического университета МИРЭА Чернышеву Максиму Александровичу за помощь в создании программного обеспечения.

Список литературы

- 1. Бернштейн, Д. Полиморфизм молекулярных кристаллов / Д. Бернштейн. Москва: Наука, 2007. 511 с.
- 2. Разницкий, Л.А. Химическая связь и превращение оксидов. М.: Издво МГУ, 1999, С. 168.
- 3. Каныгина, О.Н. Высокотемпературные фазовые превращения в железосодержащих глинах Оренбуржья / О.Н. Каныгина, А.Г. Четверикова, Д.А. Лазарев, Е.В. Сальникова // Вестник Оренбургского государственного университета. Оренбург, 2010. С. 113-118.
- 4. Красников, А.С. Структура, свойства и лазерное разрушение стеклокристаллических материалов и керамики / А.С. Красников, Л.И. Миркин. Москва: Светоч Плюс, 2009. 138 с.
- 5. Анненков, Ю.М. Физическая модель спекания и модифицирования керамики в высокочастотных и сверхвысокочастотных полях / Анненков Ю.М., Ивашутенко // Известия Томского политехнического университета. Т. 308, N 7, 2005. С. 30-35.
- 6. Сироткин, О.С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строения химических соединений / О.С. Сироткин. НИЦ ИНФА-М, 2013.
- 7. Glasser, L. Solid-State Energetics and Electrostatics: Madelung Constants and Madelung Energies // *Inorganic Chemistry*, 2012, 51 (4) P. 2420–2424.
- 8. Сычев, М.С. Моделирование структурных параметров кубических кристаллических решеток: Дис. ... кандидат технических наук. Благовещенск. 2014.
- 9. Еремин, И.Е. Модифицированный алгоритм расчета постоянный Маделунга / И.Е. Еремин, Сычев М.С. // Информатика и системы управления. Благовещенск, 2010, 3 (25). С. 27-34.
- 10. Сычев, М.С. Проблема сходимости рядов Маделунга для кристаллических решеток с некомпенсированным зарядом // В мире научных открытий. Красноярск, 2010, 6-1(12). С.102-105.
- 11. Paglia, G.: Tetragonal structure model for boehmite-derived γ -alumina / G. Paglia , C.E. Buckley, A.L. Rohl, B.A. // Physical Review B: Condensed Matter 68:144110, 2003. P. 1-11.
- 12. Химическая технология неорганических веществ: В 2 кн. Кн. 2. Учебное пособие / Т.Г. Ахметов, Р.Т. Порфирьева, Л.Г. Гайсин и др. М.: Высшая школа, 2002. С. 533.

13. Touzain, P., Brisse F., Caillet M. Systèmes métaux alcalins-oxygène: Polymorphisme du monooxyde de potassium K_2O / P. Touzain, F. Brisse, M. Caillet // Canadian Journal of Chemistry. T. 48, 1970. – P 3358-3361.

МЕСТО ФИЗИЧЕСКОГО ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА В СИСТЕМЕ ПОДГОТОВКИ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ КАДРОВ

Манаков Н.А. д-р. физ.-мат. наук, профессор, Цветкова Е.В. Оренбургский государственный университет

Изучение физики как общеобразовательного предмета в школе и вузе имеет важное значение в подготовке учащихся к жизни в современном мире техники в условиях быстрого научно-технического прогресса [1,2]. Полноценное изучение физики предполагает овладение модельным подходом к анализу явлений, процессов и систем; освоение экспериментальных методов исследования объектов природы и техники; приобретение навыков решения не только идеализированных, но и реальных физических задач. И важнейшую роль в целостном процессе изучения физики играет выполнение лабораторных работ - физический лабораторный практикум (ФЛП). Для студентов инженерно-технических направлений подготовки ФЛП, как и физика в целом, является базовой основой профессионального становления.

Обычно школьники и студенты с удовольствием выполняют лабораторные работы. В процессе их выполнения и подготовки по ним отчетов они знакомятся с измерительными приборами и принципами их работы, с методами измерений, с методикой обработки, анализа и систематизации результатов измерений. Выполнение лабораторных работ повышает интерес учащихся к физике и помогает им преодолевать часто возникающее психологическое неприятие дисциплины, связанное с трудностью понимания и усвоения курса физики, требующего абстрактного мышления и определенной математической подготовки.

Выполнение ФЛП играет очень важную роль в осознании учащимися абсолютных законов (например, законов сохранения массы и энергии, импульса, момента импульса, электрического заряда и т.д.) - всеобщих и универсальных законов материального мира, действие которых проявляется во всех областях действительности, и законов - запретов (например, запрета на существование вечного двигателя первого и второго рода).

Но самое важное методологическое значение ФЛП имеет в связи с тем, что физика в основе своей - наука экспериментальная, то есть экспериментальные исследования и наблюдения являются, как правило, единственным источником знаний о природе физических явлений. Учащиеся при прохождении ФЛП постепенно осознают, что опыт является средством проверки любой физической теории, основным критерием истины, что справедливость любого закона проверяется экспериментом. Физика является первым учебным предметом и для школьников, и для студентов, главным инструментом которого является эксперимент.

Несомненная важность ФЛП для учебного процесса обусловлена высокой степенью активности и самостоятельности учащихся при выполнении лабораторных работ. При этом устраняется промежуточное звено между

учеником и изучаемым им процессом, явлением, устройством и т.п. Выполнение лабораторных работ способствует не только формированию естественнонаучного мировоззрения учащегося, но и воспитывает навыки планирования и проведения эксперимента, что является краеугольным камнем любой научно-исследовательской и инженерно-технической деятельности. Причём следует иметь в виду, что самое сложное для учащегося в процессе выполнения лабораторных работ — это оценка достоверности полученных в ходе эксперимента данных, их осознание и формулировка выводов, соответствующих цели проводимого эксперимента.

работы Реальные лабораторные следует активно дополнять виртуальными. Выполнение виртуальных лабораторных работ позволяет наиболее детально и наглядно изучить закономерности физических процессов и явлений. Выполнение виртуальных работ способствует усвоению модельного подхода к изучаемым системам, процессам и явлениям, развивает навыки их моделирования. Следует заметить, что виртуальные работы можно выполнять фронтально по мере изучения теоретического материала на лекционных и практических занятиях, в отличие от реальных лабораторных работ. Причем параллельное выполнение реальных и виртуальных лабораторных работ на одну и ту же тему позволяет полнее осознать детали реального физического процесса, ускользающие при моделировании.

В ФЛП полезно включить и проведение мысленных экспериментов [3]. Предположения и допущения не только позволяют наметить новый подход к изучаемой проблеме, но как показывает история науки часто приводят к новым, весьма неожиданным и революционным, теориям и практическим решениям. Одним из наиболее ярких тому примеров служит развитие специальной теории относительности. Мысленный эксперимент пожалуй самый сложный и для школьника, и для студента. Но овладение способностью мысленного проектирования и "прокручивания" той или иной ситуации является немаловажным для учащегося не только для изучения каких либо процессов и явлений, но и для повседневной жизни.

Цели освоения дисциплины:

Сформировать у студентов целостное представление о фундаментальных физических законах и их проявлениях в природе. Показать взаимосвязь естественнонаучных и технических дисциплин, базовой основой которых является физика. Продемонстрировать возможности применения основных физических законов при решении научно-технических задач.

Залачи:

Сформировать основу физических знаний студента, необходимую для успешного освоения специальных технических и естественных дисциплин.

Развить у студентов умения и навыки использования законов физики при решении профессиональных научно-практических задач.

Заложить основы становления гармоничной личности студента с широким естественнонаучным и научно-техническим кругозором.

Физический 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; благо достижений физики на развития человеческой цивилизации; необходимости сотрудничества В процессе совместного выполнения задач, уважительного отношения к мнению оппонента при обсуждении проблем естественнонаучного содержания; готовности к моральнодостижений, этической оценке использования научных 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 [4].

Подводя итоги вышесказанному, следует отметить, что при выполнении лабораторных работ у учащихся вырабатываются умения самостоятельной постановки эксперимента и оценки реальности его результатов, развиваются исследовательские способности и инженерно-техническое мышление. Успешное решение учащимися всех проблем, возникающих перед ними в процессе выполнения физического лабораторного практикума, вооружает их системой навыков проведения измерений, обработки результатов измерений, оценки их достоверности и точности. Более того, выполнение ФЛП способствует формированию умения сознательно строить свою жизнь, ставить цели и планировать их достижение.

Список литературы

- 1. Манаков, Н.А. Место физики в системе общего и специального образования [Текст] / Н.А. Манаков, А.С. Вдовин, Р.С. Вдовин // Педагог. 2001. № 2 (11). С. 48-51.
- 2. Манаков, Н.А. Место физики в системе образования и воспитания / Н.А. Манаков, А.А. Чакак // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры [Электронный ресурс]: материалы Всероссийской научно-методической конференции; Оренбург. гос. ун-т. Электрон. дан. Оренбург: ОГУ, 2017, с. 1837-1843.
- 3. Разумовский, B. Γ . Развитие творческих способностей учащихся ε процессе обучения физике [Teкcm] / B. Γ . Разумовский; Hayu.-uccned. uh-m codepж. u memodosобучения Akad. пед. наук СССР. Москва : Просвещение, 1975. 272 с., 2 л. ил. : ил.; 22 см. (Пособие для учителей).
- 4. E.B. Использование Цветкова, методических указаний В организации лабораторного практикума по физике в условиях современного образования / Цветкова Е.В., Белокопытова О.Г. - Материалы Всерос. науч.региональный «Университетский комплекс метод. конф. как образования, науки и культуры» [Электронный ресурс] – Оренбург: ОГУ, 2017. - ISBN 978-5-7410-1639-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ СВЧ ПОЛЯ НА ЧАГАНСКИЕ СУГЛИНКИ

Нургалиева К.К., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Сокабаева С.С.

Западно-Казахстанский аграрно-технический университет имени Жангир хана, Уральск, Республика Казахстан, Оренбургский государственный университет

Основным направлением современного развития отечественной керамической промышленности является переход на ресурсо- и энергосберегающее производство керамики нового поколения, отличающихся высоким уровнем собственных эксплуатационных свойств и обеспечивающих повышение качества продукции потребляющих отраслей.

Несмотря на увеличение в общем объеме современных керамических материалов доли керамики из синтетического сырья, до сих пор для ряда таких традиционных керамических материалов важнейшее значение имеет глинистое сырье. Особенностью современной отечественной базы керамического сырья является истощение общих запасов высококачественных глин и каолинов, что обусловливает вынужденное вовлечение в производство низкосортных местных глинистых пород, достаточная обеспеченность которыми определяет, в целом, их важность для развития производства керамики.

Особую актуальность приобретают вопросы расширения областей использования природного силикатного сырья в производстве керамических материалов.

Решение указанных проблем может быть обеспечено в результате внедрения новых технологий синтеза керамических материалов.

Одним из перспективных технологических направлений, как отмечает бюро по наилучшим доступным технологиям при Федеральном агентстве по техническому регулированию и метрологии, является СВЧ технология.

В качестве исследуемого материала было выбрано два вида сырья: Чаганский суглинок и стеклопорошок с химическими составами, представленными в таблицах 1 и 2. Суглинок Чаганский - почва с преимущественным содержанием глины и значительным количеством песка из реки Чаган, которая протекает в Оренбургской области России и в Западно-Казахстанской области. Стеклопорошок, представляющий собой полученный методом измельчением боя тарных стекол или стеклоотходов следующего состава.

Таблица 1 – Химические составы глинистых материалов

| Наименов | Содержание оксидов, мас% | | | | | | | | | | | | |
|-----------------------|--------------------------|----------|--------|-----|------|----------|---------|--|-------|-------|--------|--------|-------|
| ание | | | | | | | | | | | | | |
| сырья | iO_2 | l_2O_3 | iO_2 | aO | gO | e_2O_3 | $_2O_5$ | | O_3 | O_2 | a_2O | $_2$ O | .П.П. |
| Суглинок Чаганский | 1.29 | 2.1 | | 1.9 | .08 | .8 | | | .4 | | .57 | | 1.6 |
| Стекло- порошок | 67- | 3.2- | | 6.5 | 4.3- | 0.1- | | | | | 14-14 | 4.3 | |

Таблица 2 - Пластичность глинистых компонентов

| Наименование глин | Число пластичности | Классификация по ГОСТ 9169-75 |
|-----------------------------------|-----------------------|----------------------------------|
| Суглинок Чаганского месторождения | 11,5 | умеренно-пластичный |

Из таблицы 1 следует, что исследуемые суглинки не содержат диоксида титана ${\rm TiO_2}$, способного образовывать широкозонный полупроводник, но содержат значительное количество парамагнитных окислов железа ${\rm Fe_2O_3}$, способных поглощать энергию CBЧ поля.

Сырьевые материалы для эксперимента сначала высушивались и размалывались в лабораторной шаровой мельнице до удельной поверхности 1300-1500 г/см². Затем компоненты отвешивались в нужных количествах и насухо перемешивались. После чего в сухую смесь добавлялась вода. Из полученной смеси изготовлялись гранулы 20-30 мм. Исходный вес образцов 125-150 грамм.

Для эксперимента использовалось микроволновая печь марки Samsung M1712NR, мощностью 600 Вт. В объеме СВЧ печи создавалось неоднородное электромагнитное поле с частотой 2,450 ГГц. Для устранения эффектов неоднородности поле использовалось вращение стеклянного диска с диаметром 27см. В различных экспериментах время обработки составляло 5,10 и 20 минут.

За время происходило уменьшение массы образцов. Результаты экспериментов приведены в таблице 3.

Таблица 3- Результаты эксперимента

| Образец | t, мин | N, Bt | m _{1,} гр | т2, гр | Δт, гр | % |
|---------|--------|-------|--------------------|--------|--------|-------|
| | 5 | | 133 | 116,8 | 16,2 | 12,18 |
| Глина | 10 | 600 | 152,4 | 130,4 | 22 | 14,43 |
| | 20 | | 126,4 | 107,3 | 19,1 | 15,11 |

В дальнейшем обработке изменение массы не происходило, однако температура образцов повышалось и достигало значений $T > 800^{0}\mathrm{C}$. Доказательством высокой температуры образцов служит плавление стеклянного диска, на котором находились образцы.

Результаты эксперимента, свидетельствуют принципиальной 0 возможности сушки керамических изделий СВЧ излучением. Полученные данные, подтверждают, что существует принципиальная возможность сушки СВЧ которое значительнее излучением, менее энергозатратное, $SCBH/STP=0.75\times10^{-2}$. Процесс спекания не происходит, что потому температура не поднимается выше 180 °C.

В результате проведения экспериментальных исследований по взаимодействию СВЧ излучения сырья: суглинка Чаганская и стеклопорошка, где получены оригинальные эксклюзивные результаты, для анализа и интерпретации которых потребуется комплекс новых экспериментальных исследований.

Список литературы

- 1. Ашмарин, Г.Д. Влияние порового пространства на прочностные характеристики керамики / Г.Д. Ашмарин., А.М. Салахов., Н.В.Болтакова., В.П. Морозов., В.Н. Геращенко., Р.А. Салахова // Стекло и керамика. 2012 г. № 8 С. 23—25.
- 2. Воловичева, Н.А. Сорбционные свойства литиевых форм монтмориллонит содержащих глин :диссертация ... кандидата технических наук : 02.00.11 / Н.А Воловичева; [Место защиты: Белгород.гос. технол. ун-т им. В.Г. Шухова].- Белгород, 2009.- 147 с.: ил. РГБ ОД, 61 10-5/89
- 3. Илхомжонович, Т. Ж. Получение композиционных материалов на основе акриловой кислоты и исследование/ Т. Ж. Илхомжонович// СПб Наука.-2011.-№5-С. 122-133
- 4. Каныгина, О.Н. Дисперсионный анализ монтмориллонит содержащей глины Оренбужья/ О.Н. Каныгина., О.С. Кравцова., И.Н. Анисина., А.Г. Четверикова., Е.В. Сальникова., Т.М. Достова., А.А. Ткаченко// Вестник ОГУ. − 2012 г.-№12.-С.393-395
- 5. Анисина, И.Н. Аспекты активирования кремнеземистой керамики из монтмориллонит содержащей глины/ И.Н. Анисина., А.Г. Четверикова., О.Н. Каныгина// Вестник ОГУ. 2012. № 4. С. 170-174.
- 6. Горшков, В. С. Физическая химия силикатов и других тугоплавких соединений/В.С Горшков В.С., Федоров Н.Ф.,//М.: Высш. шк. 1988. 400 с: ил.
- 7. Каныгина, О.Н. Высокотемпературные фазовые превращения в железосодержащих глинах/ О.Н. Каныгина., А.Г. Четверикова., Д.А. Лазарев., Е.В.Сальникова//Вестник ОГУ.-2011. № 12.- С.393-395
- 8. Бобкова, Н.М. Физическая химия тугоплавких неметаллических и силикатных материалов/ Н.М. Бобкова//Минск : Высшая школа, 1987. 288 с
- 9. Покидько, Б. В. Адсорбционное модифицирование слоистых силикатов для получения полимер-силикатных нанокомпозитов Дис. канд. хим. наук: 02.00.11 Москва, 2004 117 с. РГБ ОД, 61:05-2/54

10. Камалов С.А., Ли К.А. География размещения месторождений природных ископаемых Уральской области и их народнохозяйственной применение. - Уральск, 1992. - 139 с.

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ МАГНИТНОГО ОТКЛИКА ФОТОРЕАКЦИЙ В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Пеньков С.А. Центр лазерной и информационной биофизики, Оренбургский государственный университет

Органические полупроводники на основе сопряженных полимеров являются важным и интересным объектом исследования, поскольку для них характерны такие характерные особенности как квази-1D кристаллическая структура, электролюминесценция и электропроводность [1]. Поли [2-метокси, 5- (2'-этилгексокси) -1,4- фениленвинилен] (МЕН-РРV), часто использующийся как активный элемент в органических светодиодах и солнечных батареях, является типичным полимером с сопряженными двойными связями. Кроме этого, данный класс полимеров интересен целым спектром спин-селективных реакций [2], присущих этой системе и являющихся причиной таких процессов как фото- и электролюминесценция, фотопроводимость. Детальное описание вышеперечисленных магнитозависящих процессов невозможно без учета наличия молекулярного кислорода, присутствующего в разных количествах в экспериментальных образцах и устройствах оптоэлектроники на основе электропроводящих полимеров. Известно, что молекулярный кислород в состоянии является эффективным основном триплетном возбужденных триплетных состояний органических молекул [1], а молекула MEH-PPV характеризующаяся первым возбужденным синглетным состоянием с энергией ~ 2,5 эВ и триплетным состоянием с энергией ~ 1,3 эВ [2,3], является донором энергии в системе MEH-PPV-O₂.

В литературе освещены различные механизмы, ответственные за магнитозависимые эффекты в органических светоизлучающих диодах. Некоторые модели подчеркивают влияние магнитного поля на подвижность носителей заряда в устройстве [4], в то время как другие — учитывают влияние магнитного поля на плотность носителей заряда, участвующих в спинзависимых микроскопических поляронных и экситонных процессах. [5]. В этих моделях предлагаются различные механизмы, приводящие к перемешиванию спиновых состояний. Были предложены, например, такие, которые включают в себя сверхтонкое взаимодействие (СТВ) [4], дельта g механизм и спинорбитальную связь (СОВ) в малых молекулах, содержащих тяжелые атомы [6-8]. Таким образом, совокупность спин-селективных процессов, происходящих в органическом полупроводнике, можно описать следующими реакциями:

$$T_1+T_1 \leftrightarrow^{1,3,5} (T_1...T_1) \leftrightarrow S_1+S_0$$

 $T_1+^3(O_2) \leftrightarrow^{1,3,5} (T_1...^3(O_2)) \leftrightarrow^1(O_2)+S_0$
 $^{1,3}(PP) \leftrightarrow S_0$

$$\uparrow$$
 $1,3,5$ (PP...³(O₂)) \leftrightarrow ¹(O₂)+S₀,

где T_1 — первое возбужденное триплетное состояние экситона, S_1 , S_0 — соответственно первое возбужденное и основное состояния экситона, PP — поляронная пара.

В данной работе были получены магнитополевые зависимости фотолюминесценции пленок и наночастиц органического полупроводника МЕН-РРV, произведено их сравнение друг другом. Экспериментальная установка представлена на рисунке 1. Полимер использовался без очистки и дополнительной обработки. Для получения пленок приготавливался раствор полимера МЕН-РРV, с массовой долей 0,1 %, в бензоле. Полученный раствор наносился на стеклянные подложки размером 10х25 мм. Образцы подвергались сушке.

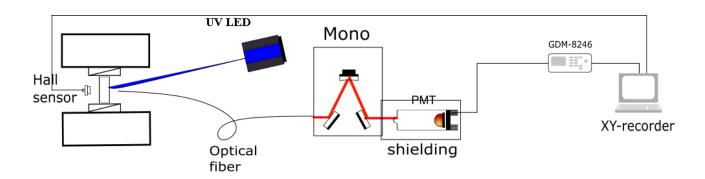


Рис. 1 Экспериментальная установка по наблюдению магнитополевого эффекта фотолюминесценции.

MEH-PPV Наночастицы создавали использованием c методики, описанной в литературе [9]. Приготавливали 0.001 % раствор MEH-PPV в бензоле и 20 мл спиртовой раствор ПВБ (поливинилбутираль). В спиртовой добавляли каплям раствор MEH-PPV при постоянном ПО перемешивании. Полученная коллоидная смесь наносилась на стеклянные подложки размером 10х25 мм. Образцы подвергались сушке.

Магнитополевой эффект определялся выражением MFE = I(B)/I(0), где I(B) и I(0) интенсивности фотолюминесценции образцов в максимуме спектра (600 нм) в магнитном поле и без магнитного поля соответственно.

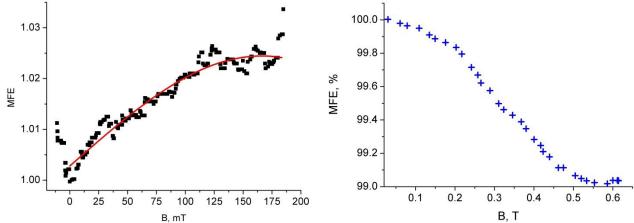


Рис. 2 Магнитополевая зависимость относительной интенсивности люминесценции пленок MEH-PPV.

Рис. 3 Магнитополевая зависимость относительной интенсивности люминесценции наночастиц МЕН-РРV, в матрице ПВБ (поливинилбутираль).

На рисунках 2 и 3 представлены магнитополевые зависимости относительной интенсивности люминесценции однородных пленок МЕН-РРV и наночастиц МЕН-РРV внедренных в матрицу на основе ПВБ. Из рисунков видно, что знак эффекта меняется с положительного в случае неограниченной среды, на отрицательный в случае пленки с наночастицами. Предполагается, что отрицательный эффект магнитного поля происходит за счет возврата парамагнитных возбужденных состояний в реакционную зону, которые будучи в сплошной пленке, разбегаются с последующей дезактивацией, формируя положительный эффект. Данная ситуация схематически проиллюстрирована на рисунках ниже.

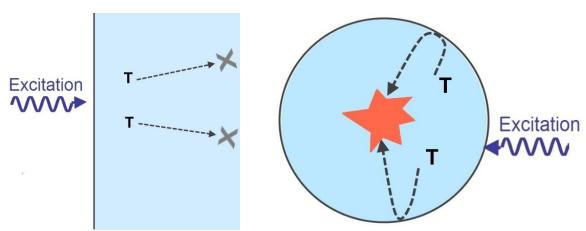


Рис. 4 Дезактивация триплетных экситонов в неограниченной среде.

Рис. 5 Возврат триплетных экситонов в нанообъеме.

Список литературы

1. Kucherenko, M.G. Spectral transformations of hybrid nanostructures with exciton-plasmon coupling in magnetic field // Proc. IX Russian-Japanese Confer. Chem. Physics of Molecules and Polyfunc. Mater. Orenburg. OSU. 2018. -P. 18-21.

- 2. Kucherenko, M.G. Positive magnetic field effect on mutual triplet triplet annihilation of mixed molecular pairs: Magnetosensitive geterofusion induced by difference of g-factors / M.G. Kucherenko, R.N. Dusembaev // Chem. Phys. Lett. 2010. –V. 487. P. 58-61.
- 3. Tachikawa, H. Magnetic field effects on oxygen quenching of delayed fluorescence of anthracene and pyrene in fluid solution / H. Tachikawa, A.J. Bard. // J. Am. Chem. Soc., 1973. V. 95. –N.5. P. 1672-1673.
- 4. Monkman, A. P. Triplet Energies of π -Conjugated Polymers / A. P. Monkman, H. D. Burrows, L. J. Hartwell, L. E. Horsburgh, I. Hamblett and S. Navaratnam // Phys. Rev. Lett., 2001. V.86. N.71. P. 1358.
- 5. Kohler, A. Triplet states in organic semiconductors /A. Kohler, H. Bassler // Materials Science and Engineering R, 2009. V.66. P.71
- 6. Bergeson, J.D. Inversion of Magnetoresistance in Organic Semiconductors / J.D. Bergeson, V.N. Prigodin, D.M. Lincoln, and A.J. Epstein // Phys. Rev. Lett., 2008. V.100. N.6. P. 7201.
- 7. Desai, P. Magnetoresistance and efficiency measurements of Alq₃ -based OLEDs / P. Desai, P. Shakya, T. Kreouzis, W. P. Gillin, N. A. Morley, and M. R. J. Gibbs //Phys. Rev. B, 2007. –V.75. N.9. P. 4423.
- 8. Nguyen, T.D. Isotope effect in spin response of π -conjugated polymer films and devices / T.D. Nguyen, G. Hukic-Markosian, F.J. Wang, L. Wojcik, X.G. Li, E. Ehrenfreund, and Z. Valy Vardeny // Nat. Mater., 2010. V.9. P. 345.
- 9. Gautam, Bhoj R. Magnetic field effect on excited-state spectroscopies of π -conjugated polymer films / Bhoj R. Gautam, Tho D. Nguyen, Eitan Ehrenfreund and Z. Valy Vardeny // Phys. Rev. B, 2012. V.85. N.20. P.5207.
- 10. Gautam, Bhoj R. Magnetic field effect spectroscopy of C60-based films and devices / Bhoj R. Gautam, Tho D. Nguyen, Eitan Ehrenfreund, and Z. Valy Vardeny // J. Appl. Phys., 2013. V.113. N14. P.3102.
- 11. Pecher, J. Nanoparticles of Conjugated Polymers / J. Pecher, S. Mecking // Chem. Rev., 2010. V.110. P. 6260.

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА Z-СКАНИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ СВОЙСТВ ОПТИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Русинов¹ А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент, Олейник² И.О.

¹Оренбургский государственный университет, ²Казанский федеральный университет

Введение

Нелинейные свойства материалов, c оптических связанные некогерентным насыщением поглощения, многофотонными процессами, тепловой или керровской нелинейностью представляют несомненный интерес для современной фундаментальной физики [1-2]. В прикладном смысле материалы с высокими оптическими нелинейностями привлекательны точки зрения их использования в качестве оптических ограничителей, оптических переключателей, систем управления формой и длительностью лазерных импульсов и т.д. [3-4]

Для исследования нелинейных характеристик оптических материалов используются различные экспериментальные Одним методики. ИЗ эффективных **Z**сравнительно простых И методов, является метол сканирования. Он заключается в перемещении исследуемого образца вдоль оси сфокусированного лазерного пучка вблизи его фокуса при одновременной регистрации интенсивности падающего и проходящего через него излучения. Это позволяет режиме открытой апертуры измерять зависимость коэффициента нелинейного пропускания образца от плотности мощности падающего излучения, а в режиме ограниченной (закрытой) апертуры определять знак и степень самофокусировки света в материале [5].

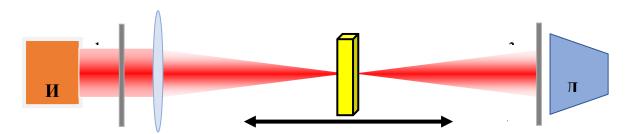


Рисунок 1. Схема Z-сканирования [3]. Здесь z – положение образца относительно фокуса линзы. ИИ-источник излучения, Д₁-диафрагма, ограничивающая ширину пучка накачки; Д₂-диафрагма, регулирующая апертуру; Л-линза, Φ Д – фотодетектор регистрирующий конечный сигнал, Ообразец

В рамках Государственного задания на 2017-2019 годы по теме «Плазмонные характеристики слоистых нанокомпозитных частиц со

структурой «ядро-оболочка», многочастичных кластеров и пространственных решеток на их основе», (научный руководитель, профессор Кучеренко М.Г.) на базе лаборатории ЦЛИБФ была реализована автоматизированная установка Z-сканирования для исследования нелинейных свойств оптических материалов. Была разработана механическая, оптическая и электронная схемы установки, написана программа управления установкой Z-сканирования с компьютера, обеспечивающая регулировку всех ее параметров, считывание экспериментальных данных, их обработку и сохранение. Также была проведена апробация экспериментальной установки Z-сканирования на модельном растворе органического красителя.

1. Электронно-механическая часть установки

Несущая часть установки взята от сканера EPSON, в ней сохранён корпус, шаговый двигатель и направляющая штанга, на которой закреплен подвижный столик с образцом. Механическая часть установки дополнена рельсом, обеспечивающим движение образца только вдоль оси сканирования и дополнительной штангой на которой закреплены оптические элементы установки: лазер, линзы, диафрагмы входной и выходной апертуры, ослабители светового пучка и фотоприемник.

Для высокоточного позиционирования образца на оси сканирования использован биполярный шаговый двигатель rh7-1319 управляемый через Н-мост реализованный на микросхеме L298. Использование шагового двигателя позволяет легко изменять направление и скорость движения подвижного столика с образцом вдоль оси сканирования. Это дает возможность быстрого старта, остановки и реверсирования с точностью позиционирования до 0.05 мм.

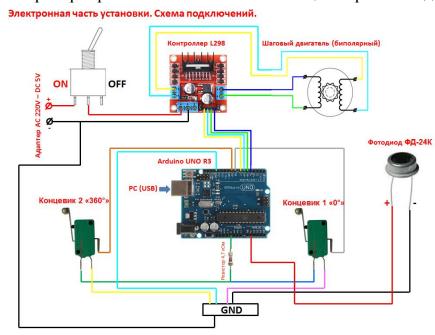


Рисунок 2.- Электронная схема установки для исследования нелинейно-оптических сред методом Z-сканирования

Сигнал с фотодиода поступает на операционный усилитель, собранный на микросхеме LM358 по неинвертирующей схеме. Важными характеристиками усилителя является высокое входное сопротивление порядка гигаом, варьируемый коэффициент усиления от 1 до 25 и ограничение максимального выходного напряжения.

Модуль, управляющий режимами работы установки и поддерживающий протокол связи с компьютером, реализован на плате Arduino UNO R3 с микроконтроллером ATmega328, схема его подключения приведена на рисунке 2. Микроконтроллер по четырем цифровым выходам через Н-мост управляет обмотками шагового двигателя, через два цифровых входа осуществляет контроль границ диапазона сканирования, считывает через аналоговый вход с разрядностью АЦП 10 бит (1024 дискретных уровня) сигнал с фотоприемника прошедший через усилитель и передает их на компьютер. Питание электронной платы и связь с персональным компьютером осуществляется по протоколу USB 2.0.

2. Программная часть установки

Программный пакет, обеспечивающий регулировку всех параметров установки, считывание экспериментальных данных, их обработку и сохранение на диск функционально разделен на две части:

- драйвер микроконтроллера Arduino, интегрирован в экспериментальную установку, осуществляет самодиагностику узлов прибора, контролирует положение подвижной части установки и считывает данные с фотоприемника;
- 2) пользовательская программа, взаимодействует с микроконтроллером через USB-порт, позволяет задавать режимы сканирования (диапазон сканирования, скорость, направление сканирования и т.д.), получать данные с прибора, отображать их в графическом окне и сохранять в удобном для дальнейшей обработки формате. Программа разработана под операционную систему Microsoft Windows XP (и выше) и не требует предварительной инсталляции на компьютер, однако для корректной работы требуется установка библиотеки NET Framework не ниже версии 4.0 и драйвера CR340 для загрузчика микроконтроллера ATmega328.

Прикладная программа представляет собой Windows-приложение разработанное в среде Visual Studio 2017 на языке программирования С#. Окно программы функционально разделено две части (см. рис. 3): слева – рабочая область, позволяющая задавать параметры и диапазон сканирования, а также сохранять полученные данные в текстовом формате, совместимом с MS Exel и Origin. В правой части окна размещена графическая область, где отображаются результаты измерений в декартовых координатах в относительных осях с автоматическим масштабированием.

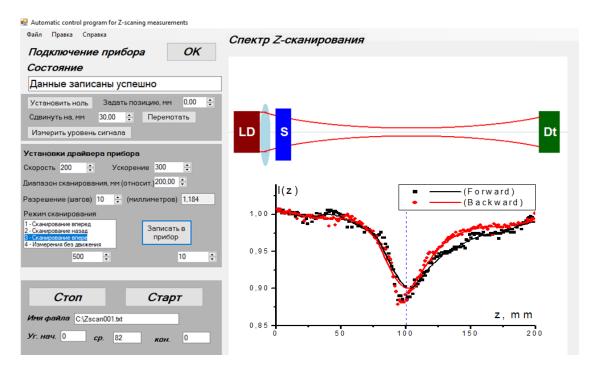


Рисунок 3. Вид рабочего окна программы по завершению измерений.

Оптическая схема установки состоит из лазера, с длинной волны 650 нм. Для измерений в других спектральных диапазонах вместо модуля красного лазера могут использоваться модули зелёного (532 нм) или синего (405 нм) лазеров. Для изменения диаметра лазерного пучка накачки используется диафрагма, увеличивающая или уменьшающая диаметр пучка накачки. Фокусировка лазерного пучка происходит за счёт линзы с фокусным расстоянием 20 см. Для регистрации сигнала используется фотодиод ФД24-К, ослабляется ЭТОМ оптический пучок помощью стеклянных при светофильтров уровня обеспечивающего линейный ДО режим чувствительности фотодиода используются.

началом сканирования с помощью входной диафрагмы устанавливается диаметр пучка накачки для регулировки его интенсивности. Далее выходной диафрагмой устанавливается режим сканирования: открытая или закрытая апертура фотоприемника. Для ослабления входного оптического сигнала до уровня, обеспечивающего линейный режим чувствительности фотодиода, используются стеклянные светофильтры, ослабляющие лазерный пучок в 2 или в 10 раз. Линейному участку чувствительности фотоприемника отвечает выходное напряжение в 100-150 мВ, при полностью убавленном операционном усилителе К=1, этому отвечает уровень сигнала 110-170 ед. Однако при работе в таком режиме сказывается малая разрядность АЦП микроконтроллера, зарегистрированный сигнал сильно дискретизированает их качество. Для совмещения рабочего диапазона фотодетектора и АЦП микроконтроллера используется операционный усилитель, с его помощью сигнал с фотоприемника усиливается до уровня 700-900 ед. (700-900 мВ), что обеспечивает достаточно качественный сигнал Z-сканирования.

3. Апробация установки на модельном водном растворе метиленового голубого

Для апробации установки Z-сканирования в качестве модельной системы был выбран водный раствор органического красителя — метиленового голубого в концентрации 1 мМ. Выбор данного красителя определяется его хорошим поглощением в диапазоне 650 нм и высокой эффективностью преобразования энергии излучения в тепло.

Далее приведены результаты экспериментальных измерений спектров Zсканирования в режиме открытой апертуры. В этом режиме через образец проходит пучок накачки при различных плотностях мощности излучения (в перетяжке – больше, вдали от нее – меньше). В линейном случае бугеровского поглощения зависимости от плотности мощности накачки не наблюдается. При некогерентном насыщении поглощения наблюдается усиление сигнала на фотоприемнике при нахождении образца в перетяжке пучка накачки. При нелинейном усилении поглощения наблюдается ослабление сигнала (усиление поглощения) в области перетяжки. Как видно из эксперимента в водных голубого растворах метиленового имеет место нелинейное усиление поглощения.

Экспериментальная установка позволяет регулировать мощность пучка накачки с помощью входной диафрагмы. Как видно из рисунка 4, от мощности пучка накачки зависит амплитуда эффекта нелинейного усиления поглощения на спектрах Z-сканирования.

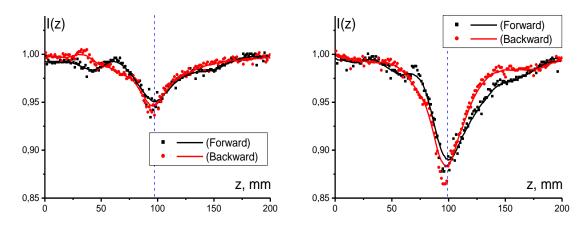


Рисунок 4. Спектр Z-сканирования водного раствора метиленового голубого ($C=10^{-3}~{\rm M}$) в режиме открытой апертуры при мощности пучка накачки а) 50 мВт и б) 200 мВт.

Регулировкой мощности пучка накачки можно менять плотность мощности лазерного излучения в перетяжке от 0.5 кВт/см² до 2,5 кВт/ см². При этом величина эффекта (усиление поглощения) также возрастает с 5% до 14%.

Раствор красителя является изотропной средой с центром инверсии, следовательно, в нем принципиально отсутствуют нелинейности четных порядков по напряженности поля **E**. Главным механизмом нелинейности, в

этом случае, выступает керровская нелинейность кубичная по Е. Тогда для коэффициента поглощения среды можно записать

$$\alpha E = \alpha_0 + \frac{3c\kappa}{8\pi} E^2 \Leftrightarrow \alpha I = \alpha_0 + \kappa I,$$

где I — интенсивность светового потока, α_0 — линейная составляющая коэффициента поглощения, κ — нелинейная.

Так как нелинейность поглощения проявляет себя, главным образом, в области перетяжки пучка накачки, то зная отношение интенсивностей сигнала Z-сканирования в перетяжке и в крайних точках I_2/I_1 =0,86 для рис. 46 и логарифмируя его, можно определить вклад нелинейного поглощения для раствора метиленового голубого $\kappa I_{\rm max}=\ln I_1/I_2$, где $I_{\rm max}$ - интенсивность пучка накачки в перетяжке, откуда $\kappa\approx6~10^{-5}~{\rm cm}^2/{\rm Bt}$.

В режиме закрытой апертуры фотоприемника экспериментальная установка регистрирует искривление волнового фронта пучка накачки на наведенной этим же пучком в образце оптической неоднородности (тепловой, фоторефрактивной или др. линзы). В зависимости от знака наведенной линзы может наблюдаться как дополнительная самофокусировка пучка накачки вблизи его перетяжки, как и дефокусировка.

Вид сигнала Z-сканирования в режиме закрытой апертуры при самодефокусировке можно пояснить следующей схемой. При нахождении образца (O) вдали от перетяжки наведенная линза в нем отсутствует, и ход луча накачки не искажается, фотоприемник (Φ), при этом, регистрирует некоторую часть светового потока прошедшего через диафрагму (Π ₁).

При приближении образца к перетяжке наведенная линза в нем дефокусирует луч. При этом на диафрагме пучок накачки имеет большую площадь, следовательно, через отверстие на фотоприемник поступает меньше света и сигнал уменьшается, как показано на рисунке 5а.

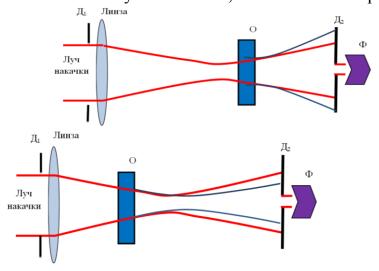
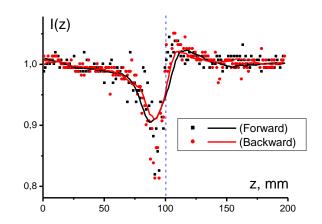


Рисунок 5. Схема формирования сигнала Z-сканирования в режиме закрытой аппертуры

При прохождении перетяжки дополнительная дефокусировка приводит к смещению перетяжки вправо и уменьшению площади пучка на диафрагме, следовательно, и к увеличению сигнала на фотоприемнике (рисунок 5б).

В случае наведения в образце положительной линзы экспериментальный сигнал будет инвертирован, при нахождении образца между перетяжкой и линзой будет иметь место ослабление сигнала, а между перетяжкой и диафрагмой – усиление.

Как видно из рисунков 6а-6б в водном растворе метиленового голубого имеет место именно самодефокусировка пучка, т.е. знак наведенной линзы отрицательный.



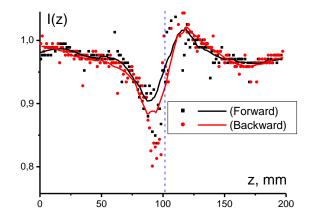


Рисунок 6. Спектр Z-сканирования водного раствора метиленового голубого (C= 10^{-3} M) в режиме закрытой апертуры при мощности пучка накачки а) 50 мВт и б) 200 мВт.

Как видно из рисунков ба и бб амплитуда сигнала Z-сканирования в режиме закрытой апертуры от мощности входного пучка практически не зависит, что может свидетельствовать о том, что нелинейная рефракция наводится именно центральным участком пучка накачки.

Заключение

Итогом проделанной работы стала реализация экспериментальной установки Z-сканирования для изучения нелинейно-оптических характеристик растворов и пленок со следующими функциональными параметрами:

- Рабочий диапазон хода образца 300 мм;
- Длины волн лазера накачки 650 нм, 532 нм или 405 нм;
- Мощность лазера накачки 100 150 мВт;
- Плотность мощности в перетяжке $\sim 2-5 \text{ кBt/cm}^2$;
- Комплект светофильтров, обеспечивающих ослабление светового потока на рабочей длине волны в 2 раза и в 10 раз;
- Максимальное усиление входного сигнала с фотоприемника К=25;
- − Разрядность АЦП для входного сигнала с фотоприемника 8 бит (1024 ед.);
- Регулировка апертуры источника излучения и фотоприемника.

Управление установкой осуществляется с компьютера, посредством специализированной программы, обеспечивающей регулировку всех ее параметров, считывание экспериментальных данных, их обработку и сохранение на диск.

Проведена апробация установки Z-сканирования на модельной системе – водном растворе метиленового голубого в концентрации 1 мМ. В режиме открытой апертуры выявлено нелинейное усиление поглощения в данном растворе и определена константа нелинейного поглощения. В режиме закрытой апертуры показано, что растворе в метиленового голубого в области перетяжки имеет место дефокусировка лазерного пучка.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках Госзадания № 3.7758.2017/БЧ.

Список литературы

- 1. И.Р. Шен. Принципы нелинейной оптики. М., Физматлит, 1989.
- 2. R.W. Boyd. Nonlinear Optics. San Diego, Acad. Press, 1992.
- 3. Ганеев, Р.А. Исследование нелинейно-оптических характеристик различных сред методами Z-сканирования и генерации третьей гармоники лазерного излучения / Р.А. Ганеев, И.В. Каманина, И.А. Кулагин, А.И. Рясненский, Р.И. Тугушев, Т.Х. Усманов.//Квантовая электроника, 2002. 788с.
- 4. Stryland E.W., Sheik-Bahae M. Z-scan measurements of optical nonlinearities // Charact. Tech. Tabul. Org. Nonlinear Mater. 1998. № 3. P. 655-692.
- 5. Sheik-Bahae M., Said A.A., Wei T.-H., Hagan D.J., Stryland E.W. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam // IEEE J. Quantum Electron. 1990. V. 26, № 4. P. 760-769.

СИНТЕЗ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CDSE С РЕГУЛИРУЕМЫМИ СПЕКТРАЛЬНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент, Вострикова И.В. Оренбургский государственный университет

При наличии в полупроводниковых материалах структурных неоднородностей, ограничивающих движение носителей заряда в области с размерами порядка или менее длины волны де Бройля, энергия электронов может принимать только определенные дискретные значения из-за эффекта размерного квантования [1]. Система, в которой движение электронов ограничено в одном измерении (2D структура), называется квантовой ямой, при ограничении движения электронов в двух измерениях (1D структура) – квантовой нитью, при ограничении в трех измерениях (0D структура) – квантовой точкой. Фактически квантовая точка (КТ) это полупроводниковый нанокристалл с размерами порядка единиц или десятков нанометров (10³-108 атомов) покрытых некоторым «переходным слоем» [2].

Для квантовых точек характерна зависимость ее энергетического спектра от размеров КТ [3], это позволяет управлять ее оптическими характеристиками: спектральным диапазоном поглощения и люминесценции. При этом КТ отличаются высокой химической и оптической стабильностью, что выгодно отличает их, например, от молекул органических красителей. Последнее приводит к активному использованию КТ в светоизлучающих устройствах, фотовольтаических солнечных ячейках, биосенсорах, а также в активных лазерных средах и в качестве элементов нано- и квантовой электроники [2, 4-6].

На сегодняшний момент предложено множество методов синтеза КТ, все их можно условно разделить на физические и химические. К физическим методам можно отнести вакуумную молекулярно-лучевую эпитаксию или парофазное осаждение на подложку [6]. Эпитаксиальные методы отличает высокое качество синтезируемых структур, но они технически сложны и имеют невысокую производительность. При этом область применения данных КТ ограничена, в основном, вакуумной и газовой фазой [7].

Значительно шире используются химические жидкофазные методы за счет большей доступности: высокотемпературный синтез В водной органических растворителях, синтез В среде И др. Высокотемпературные методы [8] позволяют получать коллоидные растворы бездефектных и стабильных КТ, что существенно упрощает их последующее применение. При этом важной проблемой является значительная дисперсия полупроводниковых наноструктур как по форме, так и по размерам. Однако ряд подходов, например размерно-селективное осаждение, позволяют уменьшить дисперсию до уровня \pm 5% .

Альтернативой высокотемпературной методике получения КТ является синтез в водной среде [9-11]. В данных методиках не требуется нагрев до значительных температур, используемые реагенты сравнительно малотоксичны, получаемые наночастицы хорошо растворимы в водных средах. Последнее, в частности, позволяет использовать их в различных биологических системах.

В нашей работе для синтеза КТ CdSe использовались водные растворы $Cd(NO_3)_2$ — в качестве источника атомов кадмия и Na_2SeO_3 — в качестве источника атомов селена. В качестве хелатирующего агента поверхности квантовых точек добавлялась тиогликолевая (меркаптоуксусная) кислота, для полного растворения ее в воде рН раствора доводился до 9-10 добавлением NaOH. Образование КТ происходит при повышении температуры раствора выше 50-60 0 C, в этом случае химическая реакция с осаждением CdSe активируется и начинается стадия нуклеации (зародышеобразования) КТ. В дальнейшем, при уменьшении концентрации реагентов растворе, образование новых центров прекращается и процесс переходит в стадию Освальдовского созревания, в котором и происходит рост размеров квантовых точек.

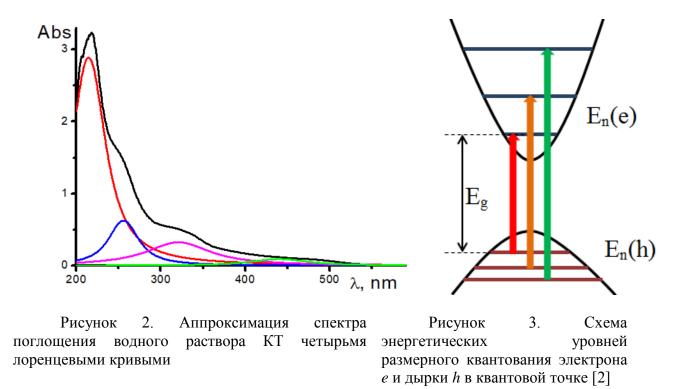
При более высоких температурах раствора реакция протекает интенсивнее, и квантовые точки, соответственно, получаются другого размера. Для уменьшения дисперсии частиц по размерам важен быстрый нагрев раствора до требуемой температуры и устранение градиента температур в реакционной зоне, этого можно достичь с помощью СВЧ активации образцов [11]. В нашем случае экспозиция образца в СВЧ поле в течение 10 секунд соответствовала температуре порядка 55 0 C, для экспозиции 15 секунд - 70 0 C, 20 секунд – 85 0 C, 25 секунд – 95 0 C.



Рисунок 1. Водные растворы квантовых точек CdSe, полученные при различном времени активации CBЧ полем на этапе синтеза. 1) 10 секунд ($t\sim55$ 0 C), 2) 15 секунд ($t\sim70$ 0 C), 3) 20 секунд ($t\sim85$ 0 C), 4) 25 секунд ($t\sim95$ 0 C)

Внешний вид полученных коллоидных растворов КТ представлен на рисунке 1. Все образцы отличаются высокой оптической и химической стабильностью, что крайне важно для использования последних в различных приложениях нанофотоники, биоанализа и пр.

Абсорбционные характеристики растворов КТ регистрировались на спектрофотометре T70 с кварцевой кюветой. Типичный спектр поглощения КТ в растворе показан на рисунке 2, в нем хорошо различимы несколько полос поглощения различной интенсивности, которые хорошо аппроксимируются четырьмя лоренцевыми кривыми.



Данное разложение позволяет оценить разность энергий между различными уровнями размерного квантования в КТ, уширение линии и относительную силу осциллятора данного перехода.

Таблица 1 2 Номер линии 1 3 Параметр Длина волны линии, нм 440 320 255 215 70 80 40 40 Ширина линии, нм Сила 4,5 20 осциллятора, отн.ед. 2,7 3,7 5.5 Разность энергий, эВ 4,6

Как видно из рисунков 4-5 время экспозиции образцов в СВЧ поле (температура реакции) существенно влияет на адсорбционные характеристики итоговых растворов КТ. У образцов, приготовленных при более высоких температурах, спектры поглощения сдвигаются в длинноволновую область и амплитуде. При этом структура ПО спектров аналогична представленному на рисунке 2, только технические возможности спектрофотометра не позволяют надежно разделить высокочастотные линии, поэтому дальнейший анализ спектров проводился по низкочастотным линиям.

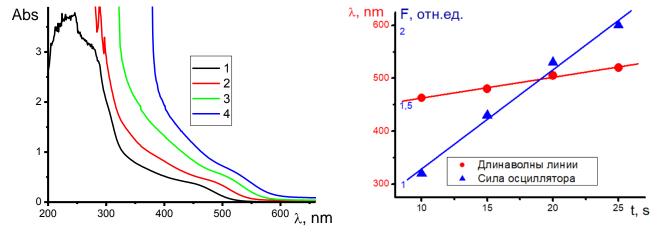


Рисунок 4. Спектры поглощения Рисунок 5. Зависимость длины водных растворов КТ при различном волны и относительной силы осциллятора времени активации СВЧ полем на этапе перехода для длинноволновых линий в синтеза. 1) 10 секунд ($t\sim55~^{0}$ C), 2) 15 спектре поглощения КТ от времени секунд ($t\sim70~^{0}$ C), 3) 20 секунд ($t\sim85~^{0}$ C), 4) активации СВЧ полем на этапе синтеза 25 секунд ($t\sim95~^{0}$ C)

Спектры люминесценции образцов снимались на флуорометрической установке, реализованной на базе монохроматора МДР 206. Оптическое возбуждение растворов осуществлялось и УФ диодом на длине волны 360 нм с шириной спектра 20 нм. Как видно из рисунков 6-7, у образцов, приготовленных при более высоких температурах, максимум линии свечения сдвигается в длинноволновую область. В литературных данных этот сдвиг (как линий поглощения, так и люминесценции) связывается с увеличением средних размеров КТ в растворе.

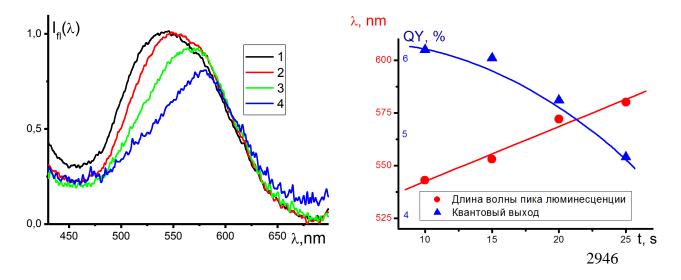


Рисунок 6. Спектры люминесценции водных растворов КТ при различном времени активации СВЧ полем на этапе синтеза. 1) 10 секунд ($t\sim55~^{0}$ C), 2) 15 секунд ($t\sim70~^{0}$ C), 3) 20 секунд ($t\sim85~^{0}$ C), 4) 25 секунд ($t\sim95~^{0}$ C). Возбуждение на лине волны 360 нм

Рисунок 7. Зависимость длины волны пика и квантового выхода люминесценции КТ от времени активации СВЧ полем на этапе синтеза

Также можно отметить снижение квантового выхода люминесценции у образцов, приготовленных при более высоких температурах. Последнее может быть связано с концентрационным эффектом, так как в более разогретых растворах в реакции синтеза КТ участвует большая доля реагентов и концентрация нанокристалов в них выше. Происходящее при этом сужение спектра люминесценции свидетельствует о повышении монодисперсности в распределении КТ по размерам.

Абсолютный квантовый выход люминесценции полученных растворов КТ, приведенный на рисунке 7, оценивался сравнением с известным квантовым выходом люминесценции флуоресцеина.

Заключение

Реализована методика синтеза квантовых точек CdSe в водном растворе с возможностью контроля размеров полупроводниковых частиц, позволяющая, тем самым, изменять их оптические характеристики. Данную методику отличает использование сравнительно малотоксичных химических реактивов и выращивание полупроводниковых кристаллов при небольших (55-95 °C) температурах, что существенно упрощает схему установки синтеза и ускоряет сам процесс.

Работа поддержана Министерством образования и науки РФ. Проект № 3.7758. 2017/БЧ.

Список литературы

- 1. Екимов А. И., Онущенко А. А. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 34. С. 363-366.
- 2. Васильев Р., Дирин Д. Квантовые точки: синтез, свойства, применение // М. МГУ. ФНМ. 2007.
- 3. Semiconductor and metal nanocrystals. Edited by V. Klimov $/\!/$ New York, Marcel Dekker Inc., 2004.
- 4. Medintz I.L., Uyeda H.T., Goldman E.R., Mattuosi H. Quantum dot bioconjugates for imaging, labelling and sensing. Nature Materials, 2005, Vol.4, 435-446.
- 5. Tsukanov A.V. Quantum operations in the optically driven two-electron double-dot structure // Proc. of SPIE. 2006. V. 6264. P. 62640J.

- 6. Баранов А.В., Маслов В.Г., Орлова А.О., Федоров А.В. Практическое использование наноструктур. Учебное пособие. СПб: НИУ ИТМО, $2014.-102~\rm c.$
- 7. Zhu J., Li J., Huang H., Cheng F. Quantum Dots for DNA Biosensing // Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013.
- 8. Murray C. B., Norris D. J., Bawendi M. G. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites // Journal of the American Chemical Society. 1993. V. 115. P. 8706-8715.
- 9. Wang J., Han H. Hydrothermal synthesis of high-quality type-II CdTe/CdSe quantum dots with near-infrared fluorescence // Journal of Colloid and Interface Science. 2010. V. 351. P. 83–87.
- 10. Hodlur R.M., Rabinal M.K. A new selenium precursor for the aqueous synthesis of luminescent CdSe quantum dots // Chemical Engineering Journal. 2014. V. 244. P. 82–88.
- 11. Wada Y., Kuramoto H., Anand J., Kitamura T., Sakata T., Mori H., Yanagida S. Microwave-assisted size control of CdS nanocrystallites // Journal of Materials Chemistry. 2001. V. 11. P. 1936-1940.

ДИФФЕРЕНЦИРОВАННЫЙ ПОДХОД ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ФИЗИКЕ

Сидоров А.В.

Бузулукский гуманитарно-технологический институт (филиал) ОГУ

Лабораторные работы по физике являются одной из форм организации учебной деятельности студентов. Лабораторные занятия позволяют закрепить знания, полученные на лекционных занятиях, практических (семинарских) занятиях. Наряду с наглядностью, которая повышает эффективность такого рода занятий, происходит обобщение результатов проделанной работы, что ведет к появлению возможности осуществления анализа.

Применение дифференцированного подхода позволяет не только разнообразить формы организации учебного процесса, но и повысить эффективность лабораторных работ.

Несмотря на то, что в настоящее время применяется балльно-рейтинговая система оценивания знаний учащихся, до сих пор не разработана система проведения дифференцированных фронтальных лабораторных работ.

При проведении лабораторных занятий не учитываются индивидуальные особенности учащихся, учитывается лишь общая оценка, выраженная в баллах.

Тем не менее, достаточно просто можно организовать на лабораторных занятиях по физике возможность выбора определенного варианта действий, предоставление различных вариантов заданий.

Одним студентам будет достаточно лишь выполнить определенное количество заданий, следуя методическим указаниям. Другим — можно предложить провести определенное исследование. В данном случае выбор методов, определение последовательности действий могут осуществлять сами учащиеся.

Лабораторные занятия в классическом виде, когда после сдачи курса теоретического материала, знакомства с порядком выполняемых действий и непосредственно проведения самих лабораторных работ, формирования выводов по проделанной работе студент получает отметку о выполнении работы, приводят к тому, что происходит замедление процесса формирования у студентов умений и навыков к проведению исследований. Работа представляет собой алгоритм, следуя которому студенты получают результаты. В лучшем случае, происходит осмысление проделанной работы и формирование выводов.

Для формирования дифференцированного подхода к изучению дисциплины следует курс лабораторных работ разбить на уровни:

- базовый;
- продвинутый;
- расширенный.

Если с базовым уровнем изучения дисциплины преподаватели работают постоянно, то два других практически на занятиях не используются.

Продвинутый уровень предполагает наличие у студента желания продолжать исследования. При проведении лабораторных работ на данном уровне можно предложить учащимся определить абсолютную и относительную погрешности результатов полученных в результате выполнения лабораторных работ. Провести оценку возможных границ применимости исследуемых процессов, выявленных закономерностей и т.д.

На расширенном уровне студентам можно предложить обратиться к первоисточникам. Рассматривать не лабораторные работы, которые можно выполнить на имеющемся оборудовании, тем более не использовать виртуальные лабораторные работы, а изучить с исторической точки зрения, какими были первые исследования в данной области, описываемые в литературе. Обращаясь к первоисточникам, студент научится самостоятельно работать с информацией, осуществлять её поиск, обобщать полученный материал, делать определенные выводы.

Результаты исследования студентов могут быть представлены в виде сообщения на занятиях, доклада на конференции, либо сданы в виде реферата на проверку преподавателю.

Организация лабораторных занятий с использованием элементов научных исследований может принести намного большую пользу, чем проведение обычных «классических» лабораторных работ [1].

К сожалению, проводить научные исследования наиболее просто не на первых курсах, так как вначале студенты должны приобрести навыки определения целей лабораторных работ, научиться формировать и оформлять отчеты, иметь навыки работы с определенными приборами, осваивать методы исследования, проводить точные измерения и определять их погрешности, делать выводы.

При проведении занятий преподаватели чаще стремятся ориентироваться на слабых студентов, чтобы подтянуть их к среднему уровню [2]. При этом более сильные студенты (не только с точки зрения знаний, но и по любознательности, склонности к проведению исследовательской работы) быстрее выполняют среднюю учебную программу и не поднимаются над средним уровнем, необходимо давать им средства для приобретения больших знаний и умений.

На лабораторных занятиях по физике дифференцированный подход может быть реализован при использовании:

- лабораторных работ различной степени сложности;
- методов обработки результатов измерений;
- фронтального проведения лабораторных работ.

Если выполнение лабораторной работы происходит фронтально — то в этом случае вся группа выполняет одну и ту же работу под общим руководством преподавателя. Особенно это удобно при большой численности учащихся и малом количестве лабораторного оборудования. Выполнять работы можно и индивидуально. В этом случае возможно разделение на микрогруппы.

В лаборатории физики при изучении определенных тем можно проводить лабораторные работы различной степени сложности [1].

Например, при проведении лабораторных работ по разделу «Механика жидкостей и газов» более простая работа — определение коэффициента вязкости жидкости вискозиметром.

Кинематическая вязкость жидкости равна произведению истечения жидкости через капилляр определенного объема на постоянную Постоянная вискозиметра не зависит от температуры вискозиметра. геометрическими определяется только размерами вискозиметра. определения постоянной вискозиметра используют эталонные жидкости с известной кинематической вязкостью. В лабораторной работе измеряя время истечения определенного объема эталонной жидкости определяют постоянную вискозиметра и далее – коэффициент вязкости жидкости.

Более сложной работой, с точки зрения проведения измерений, является работа «Определение вязкости жидкости методом Стокса».

Данный метод определения вязкости основан на измерении скорости медленно движущегося в жидкости небольшого тела сферической формы (шарика). В работе предлагается определить сначала участок с установившейся (постоянной) скоростью. Затем измерить среднюю скорость движения шарика на данном участке. Далее определяется плотность материала шарика. Более сложным с точки зрения измерений, и более интересным является измерение плотности жидкости в которой «падает» шарик. Затем записывается условие равенства сил, действующих на шарик нулю, и определяется вязкость жидкости. Работа требует большого числа различных измерений и позволяет осуществлять творческий подход к проведению таких измерений.

При проведении лабораторных работ по разделу «Молекулярная физика и термодинамика» в качестве традиционной работы можно предложить «Определение коэффициента поверхностного натяжения воды методом капель».

В данной работе, когда жидкость вытекает из трубочки каплями, то отрыв капли возможен, если ее вес будет равен или начнет превосходить силу поверхностного натяжения. Используя воду как эталонную жидкость с известной известным коэффициентом плотностью И поверхностного вычислить коэффициент поверхностного натяжения, ОНЖОМ соляного раствора, мыльного раствора, глицерина, этилового спирта и других соединений. требует проведения измерений. Работа не сложных Рассчитывается количество капель в заданном объеме жидкости. количество капель и плотность жидкости можно определить коэффициент поверхностного натяжения жидкости составив простейшую пропорцию.

Более сложной является работа «Определение коэффициента поверхностного натяжения воды методом отрыва кольца».

В этой работе тонкое металлическое кольцо подвешено так, что нижним основанием оно касается жидкости. Для отрыва кольца от поверхности надо приложить силу, равную по величине силе поверхностного натяжения. Сила

поверхностного натяжения действует как по границе внешней поверхности кольца, так и по границе внутренней поверхности.

Работа требует проведения большого числа измерений:

- измерить штангенциркулем внешний диаметр и толщину стенки кольца;
- к коромыслу весов подвесить кольцо, весы уравновесить. Коромысло весов с кольцом осторожно опустить, чтобы кольцо коснулось жидкости. На свободную чашку весов медленно сыпать песок, чтобы кольцо оторвалось, и весы снова пришли в равновесие;
- определить массу насыпанного песка, вес которого равен силе поверхностного натяжения.

Видно, что изучая один и тот же раздел, выполняя одну и ту же работу можно выбирать различной степени сложности варианты заданий.

Выбор формы проведения лабораторной работы, ответственность за результативность целиком лежит на преподавателе. Но не следует забывать о возможности выявления талантливых студентов, которые при классическом проведении занятий могут быть и не выявлены.

Список литературы

1 Серюкова, И.В. Методика проведения лабораторных занятий по физике в вузе на основе дифференцированного подхода / И.В. Серюкова, О.И. Наслузова // Вестник Красноярского государственного педагогического университета им. В.П. Астафьева — 2017. — № 3 (41). — С. 89-95. — ISSN 1995-0861. — Режим доступа: http://www.kspu.ru/upload/documents/2017/10/25/f32f6f13af9173a21bc 97с4722b9f170/nauchnyij-zhurnal-vestnik-kgpu-im-vp-astafeva-2017--3-41.pdf

2 Арганы, Н.Ф. Дифференцированный подход в обучении физике [Электронный ресурс]. / Н.Ф. Арганы. – Режим доступа: http://открытыйурок.

ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ В УНИВЕРСИТЕТАХ США

Сокабаева С.С., Бердинский В.Л. д-р физ.-мат. наук, доцент Оренбургский государственный университет

В университетах Соединённых Штатов Америки большое внимание уделяется методам преподавания классической и современной физики, а также результатам применения как традиционных, так и новых методов. Широким теоретические фундаментальные фронтом ведутся И педагогические исследования. Результаты этих исследований публикуются в престижных журналах Американского физического общества (American Physical Society, APS) и Американской ассоциации преподавателей физики. В серии журналов «Physical Review» с высокими импакт-факторами Американское физическое общество издает специальный журнал «Physical Review. Physical Educational Research» (PRPER) [1]. На сайте этого журнала [https://journals.aps.org/prper/] цели задачи. PRPER распространяется указаны И финансируется за счет сборов за публикацию для авторов или учреждений авторов. Журнал имеет высокий импакт-фактор 2,582, что свидетельствует о значимости опубликованных статей и внимании научной общественности.

Критерии для принятия статей в PRPER такие же, как и в других журналах. Авторы ΜΟΓΥΤ представить физических обзорные исследования по тиражированию, описания разработок и использования новых инструментов оценки, презентации методов исследования и методологические сравнения, также критические замечания. Опубликованные краткими описаниями сопровождаются (тизерами) ключевыми изображениями в Интернете. PRPER публикует специальные подборки статей (Focused Collections), которые собираются для работы над конкретными темами, представляющими интерес для исследовательского сообщества по физическому образованию. Особое внимание в работах, опубликованных в PRPER, уделяется объективным методам оценки усвоения и понимания изучаемых физических дисциплин.

За время существования журнала PRPER (2005 - 2018 г.г.) в нем статей, авторами более 800 которых были преподаватели из США и разных стран Азии и Европы. Поскольку в одной работе невозможно описать все темы и проблемы работ, опубликованных в PRPER, то далее в качестве примеров будут приведены представляющих российских краткие обзоры статей, интерес ДЛЯ преподавателей физики в высших учебных заведениях Российской Федерации.

В качестве примера можно привести публикацию «Понимание студентами понятий наклон кривой и площадь под кривой: сравнение студентов физических и нефизических специальностей» («Student understanding of graph slope and area under a graph: A comparison of physics and nonphysics students», Phys. Rev. Phys. Educ. Res. 14, 020109 – Published 18 September 2018),

авторы Ana Susac, Andreja Bubic, Elizabeta Kazotti, Maja Planinic, and Marijan Palmovic [2].

Предыдущие исследования выявили трудности студентов-физиков с пониманием понятий наклон кривой и площадью под кривой, используемыми в разных контекстах. В данном исследовании дано сравнение понимание этих понятий студентами физиками и студентами психологических специальностей.. Все студенты решали вопросы о наклоне кривой лучше, чем вопросы о площади под кривой. Студенты-психологи набрали довольно мало баллов по вопросам о площади под кривой, а студенты-физики потратили больше времени на вопросы о площади под кривой, чем на вопросы о наклоне, что указывает на то, что понимание области под кривой является довольно сложным понятием, которое вряд ли будет изучаться самостоятельно. Как правило, студенты-физики имели сопоставимые оценки по качественным и количественным вопросам, в то время как студенты-психологи гораздо лучше решали качественные вопросы. Как и ожидалось, оценки студентов и эксперименты по отслеживанию движения глаз показали, что проблемы, связанные с физическим контекстом, были проще для студентов-физиков. Анализ стратегий студентов показал, что студенты-физики в основном полагались на стратегии, изучаемые на курсах физики, с сильным акцентом на использование формул, в то время как студенты-психологи в основном использовали стратегии здравого смысла, поскольку они не знали формул физики.

Вторым характерном примером является работа «Отношение и интерес к курсу общей физики и успеваемость студентов, специализирующихся в науках о живых системах; предварительные исследования» («Students 'attitudes, interest and academic performance in primary physics for life Sciences: a preliminary study», Phys. Rev. Phys. Educ. Res., 14, 010111 – Published 5 March 2018), авторы: Catherine H. Crouch, Panchenko Viittaavat, Ming Kai and K. Ann Reininger [3].

общенациональные К призывы совершенствованию образования в области физических наук для студентов, специализирующихся в науках о жизни и медицины, разрабатываются новые реформированные вводные курсы по физике. Это предварительное исследование одним из первых оценивает влияние специализированного курса общей физики (IPLS) на отношение, интерес и успеваемость студентов. Изученный курс IPLS был во втором семестре после стандартного курса первого семестра, позволяющего сравнивать результаты одних и тех же студентов в стандартном курсе и в курсе IPLS. В курсе IPLS каждая тема по физике была представлена и проработана в контексте примера из области естественных наук, а развитие навыков студентов по применению физики в ситуациях, связанных с наукой о жизни, было четко заявленной целью курса. Элементы из опроса «Изучение естествознания в Колорадо» были использованы для оценки изменений в отношении студентов и их интереса к физике. Принимая во внимание, что отношение тех же студентов ухудшилось во время стандартного курса первого семестра, было обнаружено, что отношение студентов к физике остается неизменным или улучшается в курсе IPLS. В частности, студенты с низким начальным интересом к физике показали большее улучшение как отношения, так и интереса к изучаемому предмету во время курса IPLS, чем в предыдущем стандартном курсе. Также обнаружили, что в курсе IPLS интерес студентов к примерам в области наук о жизни является лучшим показателем их эффективности, чем их интерес к физике до IPLS. Данная работа предполагает, что примеры из области естественных наук в курсе IPLS могут способствовать развитию у студентов интереса к физике и положительно влиять на их успеваемость.

В качестве третьего примера можно привести работу «Оценка обучения на кратких курсах физики» («Assessing learning in small sized physics courses», Phys. Rev. Phys. Educ. Res. 14, 010102 – Published 18 January 2018) авторы: Ene and Bruce J. Ackerson [4]

В Техасском университете и Стейшен Колледж (Техас) для студентов специальностей проводили тестирование ПО «Введение в физику полупроводников». По своему замыслу этот тест учитывал как знания контента, так и способность интерпретировать контент с помощью различных когнитивных процессов. Основная проблема была связана с небольшим количеством тестируемых. В другом исследовании приняли участие 101 студент из Университета Оклахомы и четырнадцать преподавателей или исследователей в области физики полупроводников в семи университетах. В формате теста были написаны с четырьмя множественного выбора. Результаты теста использовались для адаптирования учебной работы для каждой группы. Образец теста можно использовать в качестве основы для тестов по другим дисциплинам, из которой экзаменаторы могут извлекать короткие тестлеты.

Примеры методических и педагогических исследований, проведенных на физических факультетах различных университетов США, а также их результаты представляют несомненный интерес для преподавателей физики в высших учебных заведениях Российской Федерации. Они должны учитываться при написании учебной литературы и подготовке лекционных курсов по физике и астрономии для студентов физических и иных специальностей и направлений подготовки.

- 1. Physical Review. Physical Educational Research» (PRPER). Режим доступа: https://journals.aps.org/prper/.
- 2. Ana Susac, Andreja Bubic, Elizabeta Kazotti, Maja Planinic, and Marijan Palmovic. «Student understanding of graph slope and area under a graph: A comparison of physics and nonphysics students», Phys. Rev. Phys. Educ. Res. 14, 020109 Published 18 September 2018.
- 3. Catherine H. Crouch, Panchenko Viittaavat, Ming Kai and K. Ann Reininger. Students 'attitudes, interest and academic performance in primary physics

for life Sciences: a preliminary study. Phys. Reverend physical Image. Residence 14, 010111-Published 5 March 2018

4. Ene and Bruce J. Ackerson. Assessing learning in small sized physics courses. Phys. Rev. Phys. Educ. Res. 14, 010102 – Published 18 January 2018

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ПЛАЗМОНЫ В ПЛАНАРНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ С ФЕРРОМАГНИТНЫМ СЛОЕМ

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Назаренкова А.А. Оренбургский государственный университет

В настоящее время к наноструктурам, в состав которых входят слои ферромагнитных благородных металлов И материалов, наблюдается повышенный интерес исследователей в связи с широким спектром их возможных практических приложений. Такие наноструктуры могут быть использованы в устройствах записи, хранения, передачи и считывания информации, сенсорах магнитного поля, магнитооптических модуляторах света [1]. В основе работы этих приборов лежат магнитооптические эффекты, с помощью которых можно управлять поляризацией или интенсивностью светового излучения с помощью магнитного поля. Поскольку магнитное поле оказывает на свет слабое воздействие, возникает важная с практической точки зрения проблема усиления магнитооптических эффектов. Использование магнитоплазмонных наноструктур, содержащих слои благородных металлов и ферромагнитных материалов, может стать одним из возможных решений этой проблемы. Об этом сообщается в появившихся в последние годы теоретических и экспериментальных работах, в которых обнаружено усиление эффекта Керра в планарных наноструктурах [2, 3], усиление фарадеевского вращения [4, 5] и увеличение эффекта магнитного кругового дихроизма в средах, содержащих магнитоплазмонные наночастицы [6, 7].

В данной работе рассмотрена трехслойная планарная наноструктура «ферромагнетик – благородный металл – диэлектрик», изображенная на рисунке 1. Если намагниченность ферромагнетика направлена параллельно оси у, то тензор его диэлектрической проницаемости имеет вид [1, 8]

$$\ddot{\varepsilon}_f = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & \pm ig \\ 0 & \varepsilon_1 & 0 \\ \mp ig & 0 & \varepsilon_1 \end{pmatrix},$$

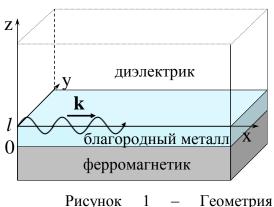


Рисунок 1 – Геометрия трехслойной планарной

где ε_1 — диэлектрическая проницаемость ферромагнетика в отсутствии намагниченности, которая зависит от частоты для металлов и является не зависящей от частоты для ферромагнитных диэлектриков, $g = \varepsilon_1 Q$ — модуль вектора гирации, который выражается через магнитооптический параметр Фохта Q. Верхний знак перед мнимой единицей соответствует случаю, когда

намагниченность направлена по оси у, нижний – в противоположную сторону.

Диэлектрическая проницаемость благородного металла определяется в рамках обобщенной модели Друде $\varepsilon_m \, \bigoplus \varepsilon_\infty - \omega_{pl}^2 / \omega^2$, где ε_∞ и ω_{pl} - высокочастотная диэлектрическая постоянная и плазменная частота металла соответственно. Диэлектрическая проницаемость ε_d среды над металлом предполагается не зависящей от частоты.

В линейном по g приближении решения уравнений Максвелла для поверхностной волны, распространяющейся в направлении оси x, записываются в следующем виде:

в ферромагнетике (z<0)

$$E_{x}^{f} (x,z,t) \neq Ae^{k_{zf}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$E_{z}^{f} (x,z,t) \neq -\frac{i}{k_{zf}}\left(k \pm \frac{\omega^{2}}{c^{2}}\frac{g}{k_{zf}}\right)Ae^{k_{zf}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$H_{y}^{f} (x,z,t) \neq \frac{i}{k_{zf}}\frac{\omega}{c}\left(\epsilon_{1} \pm \frac{kg}{k_{zf}}\right)Ae^{k_{zf}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$(1)$$

в благородном металле (0 < z < l)

$$E_{x}^{m} (x, z, t) \neq (e^{-k_{zm}z} + Ce^{k_{zm}z}) e^{i(x-\omega t)},$$

$$E_{z}^{m} (x, z, t) \neq -\frac{ik}{k_{zm}} (e^{-k_{zm}z} - Ce^{k_{zm}z}) e^{i(x-\omega t)},$$

$$H_{y}^{m} (x, z, t) \neq \frac{i\varepsilon_{m}}{k_{zm}} (e^{-k_{zm}z} + Ce^{k_{zm}z}) e^{i(x-\omega t)},$$

$$(2)$$

в диэлектрике (z>l)

$$E_{x}^{d} (z, z, t) \neq De^{-k_{zd}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$E_{z}^{d} (z, z, t) \neq \frac{ik}{k_{zd}}De^{-k_{zd}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$H_{y}^{d} (z, z, t) \neq -\frac{i\epsilon_{d}}{k_{zd}}\frac{\omega}{c}De^{-k_{zd}z}e^{i(x-\omega t)},$$

$$(3)$$

где коэффициенты $k_{zj} = \sqrt{k^2 - \epsilon_j \, \omega^2/c^2}$ **(**j = 1, m, d) определяют быстроту спадания поля по мере удаления от границ раздела сред.

Из условий непрерывности тангенциальных компонент напряженности электрического и магнитного полей на границах раздела сред

$$E_{x}^{f} (x,0,t) = E_{x}^{m} (x,0,t), \quad H_{y}^{f} (x,0,t) = H_{y}^{m} (x,0,t),$$

$$E_{x}^{m} (x,l,t) = E_{x}^{d} (x,l,t), \quad H_{y}^{m} (x,l,t) = H_{y}^{d} (x,l,t)$$

следует уравнение, определяющее связь волнового числа поверхностного плазмона с его частотой

$$\left[\frac{\varepsilon_d}{k_{zf}k_{zd}}\left(\varepsilon_1 \pm \frac{kg}{k_{zf}}\right) + \left(\frac{\varepsilon_m}{k_{zm}}\right)^2\right] \tanh \left(\frac{m}{z}l\right) + \frac{\varepsilon_m}{k_{zm}}\left[\frac{1}{k_{zf}}\left(\varepsilon_1 \pm \frac{kg}{k_{zf}}\right) + \frac{\varepsilon_d}{k_{zd}}\right] = 0. \quad (4)$$

На рисунке 2 представлены законы дисперсии (4) при нулевой намагниченности ферромагнетика (кривая 1) и для разных направлений намагниченности (кривые 2 и 3). В качестве ферромагнетика предполагался материал с ε_1 = 5 и Q = 0.1. Следует отметить, что такими большими значениями параметра Фохта обладают силициды железа Fe₃Si и Fe₅Si₃ [9],

которые являются металлами, хотя и имеют меньшую проводимость, чем чистое железо. Магнитные характеризуются диэлектрики параметрами Фохта ~ 10⁻³, например, для гадолиний - висмутового феррита $2.6 \cdot 10^{-3}$ граната Характеристики благородного металла, использованные расчетах, соответствовали серебру $\hbar \omega_{pl} = 9.1$ в В, $\varepsilon_{\infty} = 3.7$. Толщина серебряной пленки lДиэлектрическая проницаемость ε_d принималась равной 2. Из рисунка видна существенная зависимость дисперсионной кривой от направления намагниченности. Однако при уменьшении параметра Фохта на

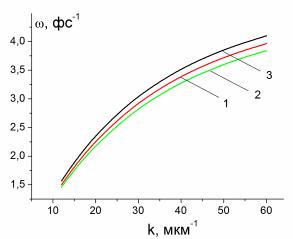


Рисунок 2 – Дисперсионные кривые поверхностного плазмона при нулевой намагниченности ферромагнетика (1), при намагниченности против (2) и вдоль

порядок влияние намагниченности становится пренебрежимо малым.

При решении задач о взаимодействии рассматриваемых плазмонов с экситонами двумерных молекулярных агрегатов удобно представить напряженность электрического поля поверхностных плазмонов в формализме вторичного квантования. Тогда коэффициенты, входящие в формулы (1) - (3), будут иметь следующий вид

$$A = \frac{2\varepsilon_m/k_{zm}}{\varepsilon_m/k_{zm} - \varepsilon_1/k_{zf} \pm kg/k_{zf}^2} B, \qquad B = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{SL}} a_k,$$

$$C = \frac{\{\epsilon_{m}k_{zd} - \epsilon_{d}k_{zm}\}^{-2k_{zm}l}}{\epsilon_{m}k_{zd} + \epsilon_{d}k_{zm}}B, \qquad D = \frac{2\epsilon_{m}k_{zd}e^{\{\epsilon_{zd}-k_{zm}\}}}{\epsilon_{m}k_{zd} + \epsilon_{d}k_{zm}}B,$$

где S — площадь границ раздела сред, a_k — оператор уничтожения плазмона, L(k) — фактор, возникающий при приведении оператора энергии электромагнитного поля плазмона к вторично-квантованному виду

$$\begin{split} &2L \blacktriangleleft \underbrace{\frac{1}{2k_{zf}} \left(\frac{2\varepsilon_{m}/k_{zm}}{\varepsilon_{m}/k_{zm} - \varepsilon_{1}/k_{zf} \pm kg/k_{zf}^{2}} \right)^{2} \left[\varepsilon_{1} \pm 2\frac{g}{k_{zf}} \left(k \mp \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \frac{g}{k_{zf}} \right) + \\ &+ \frac{\varepsilon_{1}}{k_{zf}^{2}} \left(k \mp \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \frac{g}{k_{zf}} \right)^{2} + \frac{\omega^{2}}{c^{2}k_{zf}^{2}} \left(\varepsilon_{1} \mp \frac{kg}{k_{zf}} \right)^{2} \right] + \frac{1}{2k_{zm}} \left[\left(1 + \frac{\varepsilon_{m}k_{zd} - \varepsilon_{d}k_{zm}}{\varepsilon_{m}k_{zd} + \varepsilon_{d}k_{zm}} \right) e^{-2k_{zm}l} \right) \times \\ &\times \left(\frac{d \cdot \varepsilon_{m}}{d\omega} \left(1 + \frac{k^{2}}{k_{zm}^{2}} \right) + \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \frac{\varepsilon_{m}^{2}}{k_{zm}^{2}} \right) \left(-e^{-2k_{zm}l} \right) + 4k_{zm}l \frac{\varepsilon_{m}k_{zd} - \varepsilon_{d}k_{zm}}{\varepsilon_{m}k_{zd} + \varepsilon_{d}k_{zm}} e^{-2k_{zm}l} \times \\ &\times \left(\frac{d \cdot \varepsilon_{m}}{d\omega} \left(1 - \frac{k^{2}}{k_{zm}^{2}} \right) - \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \frac{\varepsilon_{m}^{2}}{k_{zm}^{2}} \right) \right] + \frac{1}{2k_{zd}} \frac{\varepsilon_{m}k_{zd}}{\varepsilon_{m}k_{zd} + \varepsilon_{d}k_{zm}} \left(\varepsilon_{d} \left(1 + \frac{k^{2}}{k_{zd}^{2}} \right) + \frac{\omega^{2}}{c^{2}} \frac{\varepsilon_{d}^{2}}{k_{zd}^{2}} \right). \end{split}$$

На рисунках 3а и 3б изображены амплитуды x- и z-компонент напряженностей электрического поля для Q=0 и для противоположных направлений намагниченности ферромагнетика. Кривые обозначены так же, как на рисунке 2. Из рисунков видно, что намагниченность не нарушает локализацию волны у поверхностей раздела сред, а только влияет на величину амплитуды электромагнитного поля плазмона, что наиболее заметно вблизи границы между серебряной пленкой и верхним диэлектриком.

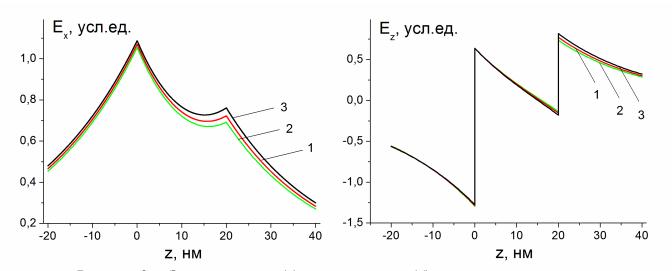


Рисунок 3 — Зависимость x- (a) и z-компонент (б) напряженности электрического поля плазмона от расстояния до границ раздела сред. Обозначения кривых такие же, как на рисунке 2

Таким образом, при выбранных параметрах модели можно ожидать влияния намагниченности на процессы обмена энергией между плазмонами и экситонами молекулярных агрегатов, что в свою очередь может оказаться полезным с прикладной точки зрения.

- 1. Калиш, А.Н. Магнитооптические эффекты для детектирования плоскостной намагниченности плазмонных кристаллов / А.Н. Калиш, В.И. Белотелов // Физика твердого тела. 2016. Т.58. вып. 8. С. 1513-1521.
- 2. Ferreiro-Vila, E. Intertwined magneto-optical and plasmonic effects in Ag/Co/Ag layered structures / E. Ferreiro-Vila, J. B. González-Díaz, R. Fermento, M.U. González, A. García-Martín, J.M. García-Martín, A. Cebollada, G. Armelles // Phys. Rev. B.- 2009. V. 80. P. 125132.
- 3. Demidenko, Y. Surface plasmon-induced enhancement of the magneto-optical Kerr effect in magnetoplasmonic heterostructures / Y. Demidenko, D. Makarov, O. G. Schmidt, V. Lozovski // J. Opt. Soc. Am. B. 2011. V. 28. P. 2115 2122.
- 4. Dani, R.K. Faraday rotation enhancement of gold coated Fe_2O_3 nanoparticles: Comparison of experiment and theory / R.K. Dani, H. Wang, S. H. Bossmann, G. Wysin, V. Chikan // J. Chem. Phys. -2011.-V.135.-P.224502.
- 5. Varytis, P. Enhanced Faraday rotation by crystals of core-shell magnetoplasmonic nanoparticles / P. Varytis, P.A. Pantazopoulos, N. Stefanou // Phys. Rev. B. -2016. -V. 93. -P. 214423
- 6. Varytis, P. Strong circular dichroism of core-shell magnetoplasmonic nanoparticles / P. Varytis, N. Stefanou, A. Christofi, N. Papanicolaou // J. Opt. Soc. Am. B. 2015. V. 32. P.1063 1069.
- 7. Umut, E. Magnetic, optical and relaxometric properties of organically coated gold–magnetite(Au– Fe_3O_4) hybrid nanoparticles for potential use in biomedical applications / E. Umut, F. Pineider, P. Arosio, C. Sangregorio, M. Corti, F. Tabak, A. Lascialfari, P. Ghign // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2012.-V.324.-P.2373-2379.
- 8. Temnov, V.V. Towards the nonlinear acousto-magnetoplasmonics / V.V. Temnov, I. Razdolski, T. Pezeril, D. Makarov, D. Seletskiy, A. Melnikov, K.A. Nelson // Journal of Optics. -2016.-V.18.-P.093002.
- 9. Лященко С.А. Исследование оптических и магнитооптических спектров магнитных силицидов Fe_5Si_3 и Fe_3Si методом спектральной магнитоэллипсометрии / С.А. Лященко, З.И. Попов, С.Н. Варнаков и др. // ЖЭТФ. 2015. Т. 147. вып. 5. С. 1023-1031.
- 10. Zvezdin, A.K. Modern Magnetooptics and Magnetooptical Materials / A.K. Zvezdin, V.A. Kotov. Bristol and Philadelphia: IOP Publishing, 1997. 363 p.

ИОННО-ОБМЕННЫЕ СВОЙСТВА ВОДНО-ГЛИНИСТЫХ СУСПЕНЗИЙ

Цветкова Е.В., Юдин А.А. Оренбургский государственный университет

Глины, полифазная смесь минералов, способны при контакте с водой переходить в пластическое состояние. Наиболее важными свойствами глин являются набухаемость, пластичность, гидрофильность, ионный обмен и способность диспергироваться в воде на мельчайшие частички. Глинистые минералы отличаются тонкодисперсностью, особенно минералы группы монтмориллонита, используемые для в качестве ценного сырья для производства функциональной керамики. Монтмориллонит имеет формулу $(OH)_4 \, Si_8 Al_4 O_{20} \, n$ $H_2 O$. Кремний в молекуле монтмориллонита может замещаться на ионы Al^{3+} , $Fe^{2+, 3+}$, Zn^{2+} , Cu^{2+} , Mg^{2+} , Li^+ . Монтмориллонит обладает ионообменной и адсорбционной, способностью, поглощает и выделяет слабо связанную воду в зависимости от влажности окружающей среды [1].

Способность глинистых минералов к катионному обмену связана с двумя механизмами, обусловленными гетерогенным распределением отрицательного заряда на поверхности: изоморфным замещением и разрывом гидроксильных групп на боковых гранях. При изоморфном замещении внутри кристаллической ячейки атомы кремния заменяются атомами алюминия, которые далее замещаются ионами низшей валентности, чаще всего магния. Заряд ячейки становится нескомпенсированным и абсорбирующиеся обменные уравновешивают. Около 80% емкости катионного обмена катионы его катионами, расположенными на базальных поверхностях обусловлены характерно для минералов монтмориллонитовой группы. Второй механизм ионного обмена связан с разрушением гидроксильных связей вокруг алюмокремниевых единиц, возникающие при этом заряды уравновешиваются обменными ионами. Обмен катионами может осуществляться с участием водорода наружных гидроксильных групп. На обменную емкость существенно влияет рН; при ее повышении адсорбция ионов щелочных и других металлов облегчается с возрастающим поляризующим действием среды [2].

Суспензии глинистых минералов обладают собственным значением рН, которое несет определенную информацию об относительном содержании щелочных и щелочноземельных элементов в их химическом составе. Этот показатель является решающим и при изучении гидрофильных свойств глины.

Ионный обмен представляет собой процесс взаимодействия раствора с твердым веществом - ионитом, обладающим способностью обменивать ионы, содержащиеся в нем, на ионы, присутствующие в растворе. Иониты, обладающие кислотными свойствами (катиониты), способны поглощать из растворов электролитов положительные ионы, а щелочными свойствами

(аниониты) - отрицательные ионы. Поглотительная способность ионитов характеризуется обменной емкостью, числом эквивалентов ионов, поглощаемых единицей массы или объема ионита. Различают полную, статическую и динамическую обменные емкости. Полная обменная емкость - это количество вещества, поглощенного до полного насыщения ионита; статическая (равновесная) емкость - количество вещества, поглощенное при равновесии в данных рабочих условиях; динамическая емкость ионита до "проскока" ионов в фильтрат, определяемая в условиях фильтрации [3].

Известно, что природные глинистые минералы в обычных условиях являются катионитами Н-формы; ионы водорода на поверхности глинистых минералов могут вступать в реакцию обмена с другими катионам. Уравнение реакции катионного обмена глины с катионами щелочных металлов можно представить таким образом:

Глина- $H + R + \rightarrow \Gamma$ лина-R + H +

При обмене значение рН раствора будет меняться, поэтому обмен ионов щелочных металлов на глинистых минералах может быть исследован методом потенциометрического титрования [4].

Объект и методы исследования:

В качестве объекта исследования выбрана среднедисперсная фракция монтмориллонитовой глины Оренбургского месторождения с размерами частиц $d \le 160$ мкм. Химический и фазовый составы глины приведены в таблицах 1, 2.

Таблица 1. Химический состав полидисперсной глины [3]

| | | | 1 | | | | F 1 | I - | | r- 1 |
|-------|-------|------------------|--------------------------------|------------------|-----------|------|------|-------------------|--------|--------------|
| оксид | п.п.п | SiO ₂ | Fe ₂ O ₃ | TiO ₂ | Al_2O_3 | CaO | MgO | Na ₂ O | K_2O | Σ , % |
| %, M. | 7,08 | 55,90 | 9,51 | 0,86 | 11,83 | 0,72 | 2,05 | 1,90 | 3,24 | 99,89 |

Таблица 2. Фазовый состав частиц исследуемой глины [4]

| Компонент | Объем. доля, % |
|--|----------------|
| β -кварц, $\mathrm{Si0}_2$ | 35 |
| монтмориллонит | 50 |
| хлорит, | 5 |
| $(Mg,Fe)_{6-2x}(Al,Fe)_{2x}[OH]_{8}{Si_{4-2x}Al_{2x}O_{10}}$ | |
| кристобалит, SiO_2 | 5 |
| α – корунд, Al_2O_3 | 5 |

Исследования по определению pH водных глинистых растворов различной концентрации проводили при температурах 24° C, 50° C и 70° C. Для анализа использовался pH-метр «pH-150MИ» со встроенным датчиком температуры.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Согласно проведенным ранее исследованиям [5] процессов ионного обмена в водной суспензии, содержащей полидисперсные частицы

монтмориллонитовой глины, максимального обмена катионами (0,087 ммоль/г) следует ожидать при 50^{0} С в случае $6 \le \text{pH} \le 7$. Зависимости значений ионообменной ёмкости Q от pH приведены в таблице 3.

| Таблица | 3. | Зависимость от кислотности суспензии | [6] | L |
|-----------|----------|---|-----|----|
| т иозиищи | \sim . | Submeriment of kinesionine of the institution | 1 ~ | ١. |

| Q, ммоль/г | ,058 | ,081 | ,08 | ,08 | ,087 | ,089 | ,087 | ,063 | ,04 | ,035 |
|---------------|------|------|-----|-----|------|------|------|------|-----|------|
| р Н | ,5 | | ,5 | : | | ,6 | , | ,7 | | ,5 |

Результаты изучения влияния содержания частиц глинистых минералов и температуры суспензии на значения рН приведены на рисунке 1. Экспериментальные данные представлены на рисунке 1.

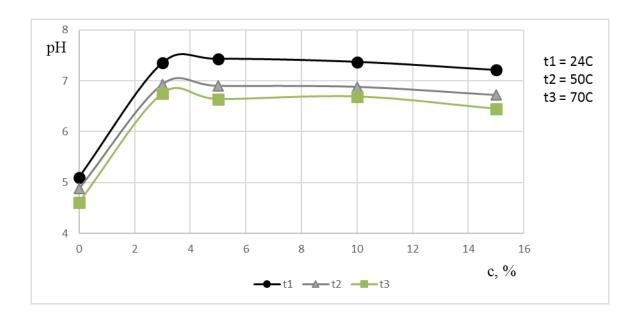


Рисунок 1 – Зависимость рН от концентрации глинистых растворов

Рисунок 1 иллюстрирует влияние обоих факторов на значения рН суспензии. Можно отметить, что влияние температуры на значения рН проявляются слабо: при увеличении температуры на 45⁰ снижаются менее чем на 0,45. При содержании частиц глинистых минералов в количестве 5% значения рН возрастают при комнатной температуре в 1,5 раза (в среднем от 5 до 7,5). С увеличением количества частиц рН снижаются от 7,3 до 6,8.

Выводы: Проведённые эксперименты показали, что максимальные значения рН наблюдаются для глинистых растворов с концентрацией частиц 5%. В области температур 25- 70° C рН меняется слабо (на 3%). В пределах исследованного диапазона температур и концентраций частиц с размерами $d \le 160$ мкм значения рН лежат в области 6,5-7,5 и, согласно таблице 3, обладают максимальными возможностями для ионных обменов.

Для изучения зависимости pH растворов от других внешних воздействий требуются дополнительные эксперименты.

Авторы выражают благодарность профессору О.Н. Каныгиной за помощь в обсуждении результатов эксперимента.

- 1. Цветкова Е. В. Влияние температурного воздействия на вязкость водно-глинистых суспензий/ Е.В. Цветкова // Матер. всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. Оренбург: ОГУ. 2018. С. 2626—2630. ISBN 978-5-7410-1910-8.
- 2. Кравцова, О С. Дисперсионный анализ глинистых систем / О.С. Кравцова, А.Г. Четверикова, О.Н. Каныгина // Матер. всеросс. научно-метод. конфер. «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский гос. ун-т. Оренбург: ОГУ. 2012. С. 921–925. ISBN 978-5-4418-0022-8.
- 3. Анисина, И. Н. Содержание элементного железа как метка для контроля спекания алюмосиликатной керамики [Электронный ресурс] / Анисина И. Н., Каныгина О. Н. // Стекло и керамика, 2017. № 11. С. 33-36.
- 4. Каныгина, О. Н. Монтмориллонит содержащая глина как сырье для функциональных материалов / О. Н. Каныгина, И. Н. Анисина, А. Г. Четверикова, Е. В. Сальникова// Вестник Оренбургского государственного университета. 2013. № 10, октябрь. С. 354-356.
- 5. Кушнарева, О. П. Ионообменные свойства природной монтмориллонит содержащей глины Оренбургской области [Электронный ресурс] / Кушнарева О. П., Каныгина О. Н. // Вестник Оренбургского государственного университета,2017. № 9 (209). С. 23-26. . 4
- 6. Кушнарева, О. П. Управление ионообменными процессами в природных алюмосиликатных материалах [Электронный ресурс]:выпускная квалификационная работа: направление подготовки 04.04.01 Химия / О. П. Кушнарева. Оренбург. 2017. 95 с.

ИЗУЧЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ОСНОВ ЭЛЕКТРОТЕХНИКИ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ

Якупов Г.С. Оренбургский государственный университет

Изучение основ электротехники предусмотрено всеми вариантами программ школьного курса физики в 8 –11 классах. Основные знания об электрических явлениях учащимся сообщаются в курсе физики 8 класса. Уроки технологии с 5 – 9 классы предполагают первичное знакомство с элементами электротехническими знаниями и навыками. В итоге к началу 10 класса у учащегося создается целостное представление о замкнутой электрической цепи, зависимости силы тока от напряжения и сопротивления, тепловом и магнитном действиях тока, умения составлять простейшие цепи и понимать принцип их действия. Знакомство с простейшими электротехническими объектами и их применением в технике и быту должно способствовать зарождению интереса учащихся к электротехнике и электротехническому моделированию. Эти знания умения и навыки служат фундаментом для будущего самоопределения учащегося в выборе дальнейшего жизненного пути, по окончании школы [1].

В процессе освоения теоретических сведений и выполнения практических работ по этому разделу программы школьники знакомятся с некоторыми электрическими явлениями, устанавливают простые зависимости между электрическими величинами, учатся использовать электрическую энергию на практике. Опираясь на жизненный опыт и систематически изучая элементы электротехники, школьники учатся логически мыслить, выстраивать причинноследственные фундаментом связи, что свою очередь служит В материалистического пожимания окружающего мира. Развитие электроэнергетики, информационно-коммуникационных технологий требует большого числа высококвалифицированных рабочих и инженеров целого ряда профессий. Электротехническая подготовка необходима для машиностроения, телекоммуникаций, строительства и сельского хозяйства. Подготовка будущих специалистов в данных сферах является важной задачей для выхода Российской Федерации в число ведущих мировых держав. Реализация этой задачи невозможна без участия школьных vчителей преподающих предметы естественнонаучного цикла, в частности физики.

Значительные трудности, с которыми сталкивается учитель физики, вызваны тем, что с физическими основами электричества учащиеся еще не достаточно хорошо знакомы. Поэтому учителю необходимосформировать основные понятия об электричестве, опираясь на знания учащихся, полученные на уроках природоведения в начальной школе и уроков физики в 7 – 8 классах, а также на уроках технологии.

Важнейшим аспектом подготовки учащихся к выполнению электротехнических работ, является наличие у учащегося хорошо развитого абстрактного мышления. Поэтому задача учителя физики на протяжении всего

курса обучения четко планировать систему развивающих воздействий на учащегося. Без хорошо развитого абстрактного мышления сложно читать и анализировать технические чертежи и схемы.

Наряду с прочными знаниями из раздела «Электрические и магнитные явления» школьники должны приобрести необходимые навыки и умения электротехнических работ. Особенность формирования заключается в том, что при работе с электротехническими устройствами практическая деятельность подростков тесно связана с их интеллектуальной реализуется еще деятельностью. При ЭТОМ одна важная воспитательная. Учащиеся учатся бережно относиться к электроэнергии, осознают, что электрический ток очень важный физический процесс, без которого немыслима жизнь современного общества.

Изучение раздела «Электрические и магнитные явления» параллельно с изучением основ электромонтажных работ создает благоприятные условия для ориентации школьников профессиональной на электротехнические специальности: электрика, электрослесаря, электромонтера, сборщика или Электротехническая аппаратуры. подготовка машиностроителю, шоферу будущему механику, И железнодорожного транспорта, строителю [2]. Это, в свою очередь, является еще одной важной задачей школьного обучения. Здесь же учащиеся знакомятся с правилами и нормами техники безопасности и необходимостью их безукоризненного соблюдения, учатся оказывать первую медицинскую помощь пострадавшему от поражения электрическим током.

Для учащихся очень интересным работать с тем, что находится внутри электрических приборов, это свойственная любому подростку природная любознательность. Она же и является источником мотивации: не только смог разобрать, но и собрал обратно, не просто собрал обратно, а так что это работает. Учащиеся осознают, что выполняют нечто важно и значимое, а это в свою очередь ведет к повышению их самооценки.

такой ОДНИМ важным аспектом деятельности экспериментальная проверка рассмотренных на уроках физики законов, в частности, закона Ома для однородного участка цепи, закона Джоуля-Ленца, а также формирование навыков чтения принципиальных электрических схем. Следующим этапом является формирование умения не только принципиальных умение объяснять, схем, НО И как данная схема функционирует.

Для успешной реализации поставленных задач предварительно лучше рассмотреть теоретическую часть проблемы, но не целиком. В процессе практической деятельности у учащихся будут возникать вопросы, в ответах на которые излагается оставшаяся часть теории по данному вопросу. Такой способ является неотъемлемой частью эвристического подхода в обучении. Чаще всего, такие работы выполняются учащимися парами или небольшими группами, что дает возможность развивать навыки коллективной деятельности, необходимой учащемуся в дальнейшем.

Несмотря на то, что в тех электрических цепях, которые собирают учащиеся, текут небольшие по величине токи, у них формируется сознание того, что электрический ток представляет опасность для жизни и здоровья человека, а это в свою очередь приводит к пониманию того, что работа, которую они выполняют ответственная и требует определенной подготовки [3].

При изучении основ электротехники можно показать учащимся, что многое из того что изучается в данном разделе имеет отношение к другому не _ информатике, важному предмету В частности основам Последовательное программирования. параллельное соединения проводников, а также устройства с односторонней проводимостью являются хорошей иллюстрацией при изучении логических операций, что в дальнейшем понадобиться для изучения основ программирования.

Существует еще одна важная причина, которая отрицательно сказывается на результатах учебного процесса. В последние годы средства массовой информации и интернет мозг человека вынужден обрабатывать огромное количество разнородной информации, которая при этом поступает к пользователю, как из достоверных, так и из вероятностных (стохастических) источников. При обработке такого объема информации пользователем, как правило, не делается каких-либо глубоких выводов, поступившая к нему информация обрабатывается поверхностно. Как раз роль таких занятий заключается профилактике развития у детей клипового сознания. Когда учащийся собирает некоторую электрическую схему и четко понимает, какой результат он должен получить, заставляет его осознанно подходить к решаемой проблеме, четко выстраивая причинно-следственные связи. Кроме того, учащиеся понимают, что изучают физику и ее законы не абстрактно, а для конкретной цели, видя, где могут быть использованы полученные ими знания. Это, в свою очередь, поддерживает интерес к изучаемому материалу.

Создание инновационных технологий невозможно при отсутствии квалифицированных инженерных кадров. Это в свою очередь ставит перед школой задачу: подготовить умеющих креативно мыслить учащихся с хорошей физико-математической базой. Чтобы создавать будущем высокотехнологичные устройства, необходимо обладать знаниями во многих областях: это математика, это конструирование, это физика, это информатика, изобразительное искусство В TOM числе. Поэтому современные информационно-коммуникационные совокупность технологи ЭТО направлений, в которых будущий инженер должен хорошо ориентироваться.

Достаточно вспомнить, что в 1957 году после запуска первого искусственного спутника Земли в США вышла статья под названием "Что знает Иван и чего не знает Джон". Обеспокоенные успехом советской космонавтики американская общественность попыталась перенять опыт советской системы образования, понимая, что отставание идёт на уровне школьного образования.

Современный мир — это мир «узких» специалистов, когда инженер является профессионалом в очень узкой области. Чем раньше он определиться с выбором конкретного направления своей деятельности, тем больших успехов

он сможет достичь в этой сфере. Задача учителя физики в данном случае создать правильные предпосылки для этого.

- 1. Мякишев, Г. Я. Физика. 11 класс: учеб. Для общеобразоват. учреждений: базовый и профильный уровни / Г. Я. Мякишев, Б. Б. Буховцев, В. М. Чаругин; под ред. В. Н. Николаева, Н. А. Парфентьевой. 19 изд. М.: Просвещение, 2010. 399 с., [4] л. ил. классический курс. ISBN 978-5-09-022777-3.
- 2. Жабцев, В. М. Сделаю сам. Главная книга электрика / В. М. Жабцев. Москва: ACT, 2014. 208 с.: ил. (Мастер золотые руки). ISBN 978-5-17-083092-3
- 3. Даль, Э. Н. Электроника для детей. Собираем простые схемы, экспериментируем с электричеством / Э. Н. Даль ; пер. с англ. И. Е. Сацевича; [науч. ред.Р. В. Тихонов]. М.: Манн, Иванов и Фербер, 2017. 288 с. ISBN 978-5-00100-687-9.