

СЕКЦИЯ 11

«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ И ФИЗИКО- ТЕХНИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»

СОДЕРЖАНИЕ

- СТРУКТУРА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОЛИСОПРЯЖЕННОГО ПОЛИМЕРА Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, снс, Лантух, Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Пашкевич С.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук 2137
- ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИСТЕМЫ MOODLE ОБУЧАЮЩИМИСЯ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ» Анисина И.Н., канд. техн. наук, Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Гуньков В.В., канд. физ.-мат. наук 2142
- ВЫСОКОСПИНОВЫЕ ПАРАМАГНИТНЫЕ ИОНЫ В КАЧЕСТВЕ КУБИТОВ И КУТРИТОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ Арифуллин М.Р., канд. физ.-мат. наук, Бердинский В. Л., д-р физ.-мат. наук, доцент 2147
- КАЧЕСТВО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ КАК АКТУАЛЬНАЯ ПРОБЛЕМА ПОДГОТОВКИ КАДРОВ Белокопытова О.Г., к.п.н., Кучеренко М.А., к.п.н., доцент 2153
- НАМАГНИЧИВАНИЕ ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ ФАЗОВО-МОДУЛИРОВАННЫМИ СВЧ-ИМПУЛЬСАМИ В НУЛЕВОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ Бердинский В. Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Арифуллин М.Р., канд. физ.-мат. наук 2157
- ВЛИЯНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПРОЦЕССЫ СУШКИ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ Нургалиева К.К., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Сокабаева С.С. 2161
- ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ПРОЦЕССЫ ОПТИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ-ДЕЗАКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ В МАТРИЦЕ КИСЛОРОДОНЕПРОНИЦАЕМОГО ПОЛИМЕРА Гладышева Ю.А. 2164
- ПРОБЛЕМЫ В ОБЛАСТИ ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИЯ МЕЖФАЛАНГОВЫХ СУСТАВОВ Дудко А.В., канд. пед. наук, доцент, Драгун К.А., Трекилова А.П., Абубакирова А.Р., Ибатова Р.И., Пихуля Т.Н., Дудко Е.А. 2172
- 3D ПЕЧАТЬ МОДЕЛЕЙ МЕЖФАЛАНГОВЫХ СУСТАВОВ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ КИСТИ Дудко А.В., канд. пед. наук, доцент, Ибатова Р.И., Трекилова А.П., Абубакирова А.Р., Драгун К.А., Димитрюк Р.М., Пихуля Т.Н. 2179
- ИНАКТИВАЦИЯ ПЛАНКТОННЫХ БАКТЕРИЙ *ESCHERICHIA COLI* И *BACILLUS SUBTILIS* УДАРНЫМИ АКУСТИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ Ишемгулов А.Т., канд. физ.-мат. наук, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Пашкевич С.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент 2185

- ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ДЕРИВАТОГРАФИИ ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ НИРС Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Алпысбаева Г.Ж., Савинов В.В. 2194
- ОСВЕТИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА МЕДИЦИНСКОГО ЭНДОСКОПА НА БАЗЕ СВЕТОДИОДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор 2200
- ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ КОМПАКТНЫХ ОСВЕТИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ МЕДИЦИНСКИХ ЭНДОСКОПОВ Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор 2204
- ПЕРЕСТРОЙКА КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАМФОЛИТНЫХ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦЫ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор 2208
- КОНТРОЛЬ ЗНАНИЙ СТУДЕНТА-БУДУЩЕГО ИНЖЕНЕРА ПО ФИЗИКЕ: САМОПОДГОТОВКА, САМОАНАЛИЗ, РЕЗУЛЬТАТЫ Кучеренко М.А., канд. пед. наук 2216
- ОСОБЕННОСТИ АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЗАМЕДЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ВБЛИЗИ СФЕРИЧЕСКОГО ФЕРРОПЛАЗМОННОГО НАНОКОМПОЗИТА Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алимбеков И.Р., Неясов П.П. 2222
- МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МД-СИМУЛЯЦИЯ КОНФОРМАЦИЙ ПЕРЕСТРОЙКИ ПОЛИАМФОЛИТНОЙ ЦЕПИ НА ПОЛЯРИЗОВАННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Неясов П.П. 2230
- ПЛАЗМОННАЯ ИНИЦИАЦИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ВБЛИЗИ ПЛОСКОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ. ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ МОДЕЛИ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент 2240
- ЗАПИСЬ ФОТОХИМИЧЕСКИХ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЖЕЛАТИНОВЫХ ПЛЕНКАХ С ОРГАНИЧЕСКИМ КРАСИТЕЛЕМ Лантух Ю. Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Летута С. Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Пашкевич С. Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Алиджанов Э. К., канд. физ.-мат. наук, доцент 2249
- МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЛИЯЮТ НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ КЛЕТОК *E. COLI* К АНТИБИОТИКАМ Летута У.Г., канд. физ.-мат. наук, Тихонова Т.А. 2253
- К ВОПРОСУ ОБ АКТУАЛЬНОСТИ РАСЧЕТА ПОСТОЯННЫХ МАДЕЛУНГА Макаров В.Н. 2258

- МООК – ТЕХНОЛОГИИ В ON-LINE ОБУЧЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНОМУ КУРСУ ФИЗИКИ: РЕЗУЛЬТАТЫ, ПРОБЛЕМЫ И НОВЫЕ ПОДХОДЫ
Микушев В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, Никольский Д.Ю., PhD, Чирцов А. С., д-р техн. наук, доцент 2263
- ПРОБЛЕМА ПРЕЕМСТВЕННОСТИ ЗНАНИЙ ПО ФИЗИКЕ В СРЕДНЕЙ И ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ Огерчук А.А. канд. пед. наук, Пискарева Т.И., канд. техн. наук, Анисина И.Н., канд. техн. наук, 2271
- МАГНИТНЫЙ ОТКЛИК ВЫХОДА РЕАКЦИИ ТРИПЛЕТ-ДУБЛЕТНОГО ТУШЕНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ НАНООБЛАСТИ Пеньков С.А., Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор 2276
- ИЗМЕНЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ НЕЛИНЕЙНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕТИЛЕНОВОГО ГОЛУБОГО В ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ Русинов А.П. канд. физ.-мат. наук, доцент; Бардин В.Д., Николаев Н.А. 2282
- ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ОКРУЖЕНИЕМ Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук Бондаренко Е.Н., Тлеубергенова Ж.Т. 2291
- МОДЕЛЬ «МНИМОЙ ЧАСТИЦЫ» КАК МЕТОД ОПИСАНИЯ СЕДИМЕНТАЦИИ В ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ ГЛИНИСТЫХ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЯХ Савинов В.В., Алпысбаева Г.Ж., Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Цветкова Е.В. 2299
- УЧЕТ РАЗЛИЧИЙ В НАПРАВЛЕНИЯХ ПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ФИЗИКЕ Сидоров А.В. 2307
- ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент 2311
- ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ БИОПЛЁНОК БАКТЕРИЯМИ *E. COLI* Тихонова Т.А., Летута У.Г., канд. физ.-мат. наук, Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент 2316
- РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ИНФОРМАЦИОННО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ УНИВЕРСИТЕТА В ПОДГОТОВКЕ БАКАЛАВРОВ И МАГИСТРОВ ФИЗИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент 2319
- ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ОТ СРЕДЫ С МАГНИТОПЛАЗМОННЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Гадаева Э.К. 2324
- ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ Якупов Г. С. 2332

СТРУКТУРА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОЛИСОПРЯЖЕННОГО ПОЛИМЕРА

**Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, снс,
Лантух, Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Пашкевич С.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Раздобреев Д.А., канд. хим. наук**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

За последнее время достигнуты значительные успехи в разработке органических солнечных элементов на основе полимерных композитов [1]. Такие результаты получены благодаря использованию технологии объемного гетероперехода, состоящего из взаимно проникающих компонент электронодонорного полимера и электроноакцепторной производной фуллерена [2]. Однако фундаментальные вопросы формирования и фотофизики полимерного объемного гетероперехода во многом не ясны. Проблемы разделения, рекомбинации и транспорта зарядов, находятся в центре интенсивных исследований и дискуссий [3]. Электрофизические характеристики полимерного гетероперехода тесно взаимосвязаны со спектром плотности локализованных в запрещенной зоне полимера электронных состояний.

В настоящей работе изучалась возможность мониторинга структуры локализованных электронных состояний органического полупроводника до и после его допирования акцепторными молекулами фуллерена на основе экспериментальных спектров оптического поглощения полученных, в том числе, методом постоянного фототока [4].

Полимерные пленки готовились методом полива поверхности кварцевого стекла соответствующим толуольным раствором полимера (смеси полимера и фуллерена) с последующим исключением растворителя.

Образцы сушились на воздухе при комнатной температуре. Толщина пленок измерялась с помощью атомно-силового микроскопа и интерференционным методом, и составляла 3-5 мкм. Спектры электронного поглощения сформированных пленок измерялись на спектрофлуориметре СМ 2000. Спектральные зависимости коэффициента оптического поглощения для пленок МЕН-PPV, измеренные методом постоянного фототока, были взяты из работы [5]. Структура локализованных электронных состояний в щели подвижности органического полисопряженного полимера, до и после допирования электроноакцепторными соединениями фуллерена, рассчитывалась путем численного решения интегрального уравнения Вольтерра методом обратного преобразования Лапласа на основе спектров коэффициента поглощения пленок МЕН-PPV, измеренных методом постоянного фототока (МПФ) [6].

Для пленок органического полупроводника с низкой степенью беспорядка характерно наличие электронных состояний локализованных в запрещенной зоне, плотность которых экспоненциально спадает к ее середине [7]. В полупроводниках такого типа оптические переходы с участием делокализованных состояний формируют следующий вид спектральной зависимости коэффициента поглощения [8]:

$$\alpha * h\nu \sim (h\nu - E_g)^2.$$

При этом пересечение линии экстраполяции линейного участка графика зависимости $(\alpha * h\nu)^{1/2}$ от $h\nu$ с осью абсцисс дает информацию об оптической ширине запрещенной зоны (E_g). Для электронных переходов из локализованных в делокализованные состояния обнаруживается экспоненциальная зависимость между коэффициентом поглощения и частотой («хвост» Урбаха):

$$\alpha(h\nu) \sim \exp\left(\frac{h\nu}{E_U}\right),$$

где E_U называется энергией Урбаха, и ее величина служит мерой беспорядка в полупроводнике [8].

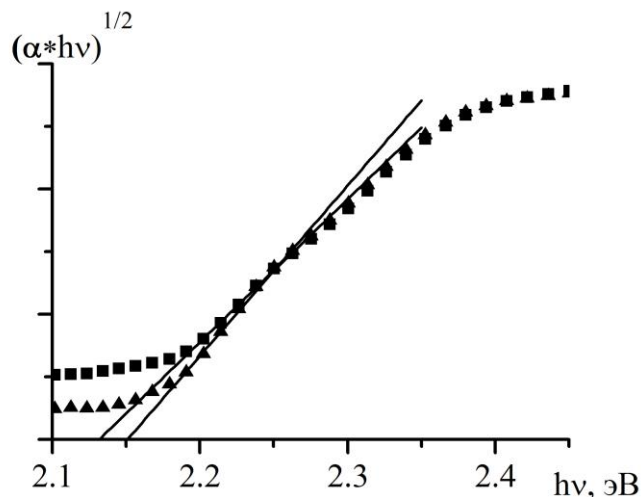


Рис.1 Спектральная зависимость $(\alpha * h\nu)^{1/2}$ на краю поглощения пленок ▾-МЕН-PPV, ⊙- МЕН-PPV/C60.

На рис. 1 представлена спектральная корневая зависимость коэффициента электронного поглощения полимерной пленки МЕН-PPV (кривая 1), полимерного композита МЕН-PPV/C60 (кривая 2), и в низкоэнергетической области края поглощения (красной границы поглощения). Аппроксимация линейной части графиков линейными функциями дает значения оптической ширины запрещенной зоны по Тауцу [9]. Из рис.1 видно, что полученные значения E_g лежат в области 2.15 эВ, что близко к литературным данным [10]. Допирование полимерной пленки фуллереном C60 уменьшает ширину запрещенной зоны на 0.02 eV и сопровождается увеличением энергии Урбаха, что свидетельствует о снижении упорядоченности в композите.

На рисунке 2 представлены результаты измерений спектральной зависимости коэффициента поглощения пленки МЕН-PPV (МЕН-PPV/C60) в области края поглощения, выполненные с помощью МПФ [5]. Из рисунка видно, что

край поглощения полимерного композита МЕН-PPV/C60 сдвинут в область больших длин волн по сравнению с краем поглощения для чистого полимера.

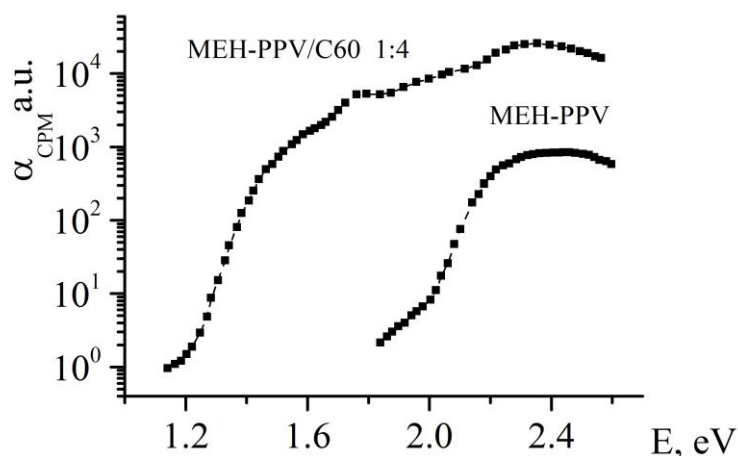


Рис.2 Спектры коэффициента поглощения полимерных пленок измеренные методом постоянного фототока [5].

В методе постоянного фототока регистрируются переходы из локализованных в запрещенной зоне электронных состояний в делокализованные. При этом измеряемая величина коэффициента поглощения (α_{CPM}) имеет следующий вид: $\alpha_{CPM}(\hbar\omega) = const / F(\hbar\omega)$.

Здесь $F(\hbar\omega)$ поток фотонов, поддерживающий постоянство фототока в образце при изменении энергии зондирующего света ($\hbar\omega$). В одноэлектронном приближении можно записать:

$$\int N(E) f(E) g(E + \hbar\omega) [1 - f(E + \hbar\omega)] dE = \hbar\omega * \alpha_{CPM}(\hbar\omega).$$

Подинтегральное выражение представляет собой свертку структуры плотности локализованных в запрещенной зоне полимера электронных состояний ($N(E)$) и структуры плотности делокализованных состояний в зоне проводимости ($g(E)$). Последняя аппроксимируется корневой зависимостью ($g(E) \sim (\hbar\omega - E)^{0.5}$). Это позволяет упростить вид свертки:

$$\int_{\varepsilon}^{\hbar\omega} N(E) * (\hbar\omega - E)^{0.5} dE = \hbar\omega * \alpha_{CPM}(\hbar\omega)$$

Таким образом расчет $N(E)$ по данным МПФ сводится к задаче решения интегрального уравнения Вольтерра, левая часть которого свертка функций $N(E)$ и $E^{1/2}$ относительно преобразования Лапласа [11]. Алгоритм численного расчета спектров плотности состояний по данным МПФ (α_{CPM}) был взят из работы [6]. Результаты таких расчетов для исследуемых образцов приведены на рисунке 3. Из представленных результатов следует, что для чистой полимерной пленки экспоненциальная полоса заполненных локализованных электронных состояний слабо выражена. В допированных образцах наблюдается значительное уве-

личение плотности локализованных состояний, что вероятно обусловлено увеличением концентрации дефектов в пленках МЕН-PPV при добавлении С60.

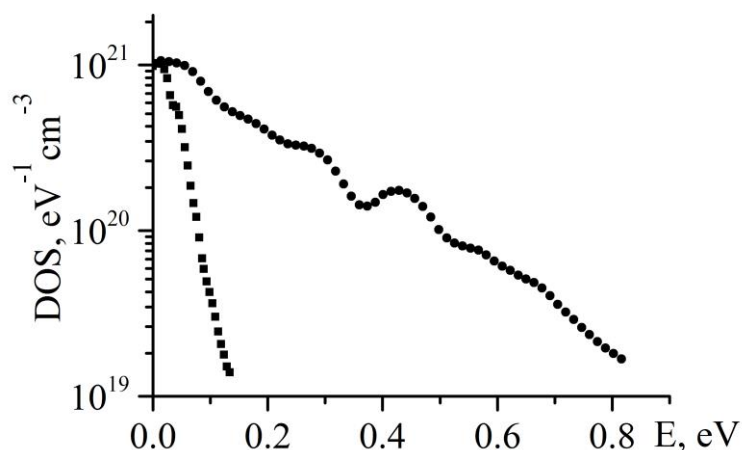


Рис.3 Результаты расчета структуры электронных состояний, локализованных в запрещенной зоне чистого МЕН-PPV – (○) и МЕН-PPV/C60 – (●).

Результаты расчетов коррелируют с данными фотометрии, которые указывают на увеличение энергии Урбаха для пленки МЕН-PPV/C60.

В результате допирования фотопроводимость полимерной пленки повышается, а край спектра фотопроводимости смещается в длинноволновую область.

Список литературы

1. Lingxian Meng, Yamin Zhang, Xiangjian Wan, Chenxi Li, Xin Zhang, Yanbo Wang, Xin Ke, Zuo Xiao, Liming Ding, Ruoxi Xia, Hin-Lap Yip, Yong Cao, Yongsheng Chen. Organic and solution-processed tandem solar cells with 17.3% efficiency // *Science* 2018, 361, P.1094–1098.
2. Д. Ю. Парашук, А. И. Кокорин. Современные фотоэлектрические и фотохимические методы преобразования солнечной энергии // *Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева)*, 2008, т. LII, № 6, с. 107-117
3. Yasser A. M. Ismail, Tetsuo Soga, and Takashi Jimbo. Features in optical absorption and photocurrent spectra of organic solar cells due to organic/organic interface *Journal of Applied Physics* 2011, V.109, pp. 103109-1 103109-7.
4. M. Vanecek, A. Abraham, O. Stika, J. Stuchlik and J. Kocka. Gap states density in a-Si:H deduced from subgap optical absorption measurement on Schottky solar cells. *Phys. Stat. Sol.*, 1984, A83, p. 617-623.
5. J. Willekens, M. Brinza, T. Aernouts, J. Poortmans, G.J. Adriaenssens. Constant photocurrent method and time-of-flight measurements applied to polymer blends. // *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2006, V 352 pp. 1675–1678.
6. Лигачев В.А., Филиков В.А. К определению плотности состояний в щели подвижности неупорядоченных полупроводников. // *Физика и техника полупроводников*. 1991, Т. 25. В.1. с. 133 — 137.

7. Handbook of Conducting Polymers, ed by Skotheim TA, Dekker, (1986)
8. Таус J. Optical Properties and Electronic Structure of Ge// Phys. Stat. Sol. 1996. V. 15. P. 627.
9. David Keith Chambers and Sandra Selmic. Advanced Characterization of the Electronic Structure of MEH-PPV// Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 871. 2005, pp. 197-202.
10. D. Keith. Advanced Characterization of the Electronic Structure of MEH-PPV.// Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 871, 1 (2005), 16.20.1-6.
11. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования. М., Наука, 1971. 288 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СИСТЕМЫ MOODLE ОБУЧАЮЩИМИСЯ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНИЧЕСКИХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

**Анисина И.Н., канд. техн. наук,
Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Гуныков В.В., канд. физ.-мат. наук**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Новые условия реализации высшего образования диктуют необходимость модернизации технологий обучения, применения новых программ и методов, существенно меняя подходы к учебно-методическому обеспечению учебного процесса. Грамотная организация самостоятельных учебных занятий, их систематичность, целесообразное планирование рабочего времени позволяет привить студентам умения и навыки в овладении, изучении, усвоении приобретаемых знаний в процессе обучения; обеспечивает высокий уровень успеваемости в период обучения, а также способствует повышению профессионального уровня в течение всей трудовой деятельности [1].

Согласно учебному плану, разработанному в соответствии с требованиями ФГОС ВО поколения 3++, дисциплина «Физическое материаловедение» относится к базовой части блока Д «Дисциплины (модули)» дисциплин подготовки студентов по направлению 12.03.04 Биотехнические системы и технологии. Преподавание дисциплины подразумевает следующие формы организации учебного процесса: лекции, практические занятия, самостоятельную работу студента, текущие консультации. Программой дисциплины предусмотрено два вида контроля: текущий контроль успеваемости в форме тестирования и промежуточный – в форме экзамена. Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов.

Дисциплина «Физическое материаловедение» служит фундаментальной основой для изучения курсов общепрофессионального цикла и специальных дисциплин. В процессе изучения обучающийся осваивает ряд универсальных (УК), общекультурных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций, необходимых для будущего специалиста, а именно, формированию способностей:

- осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач (УК-1);
- применять естественнонаучные и общепрофессиональные знания, методы математического анализа и моделирования в инженерной деятельности, связанной с разработкой, проектированием, конструированием, технологиями производства и эксплуатации биотехнических систем (ОПК-1);
- проводить экспериментальные исследования и измерения,

обрабатывать и представлять полученные данные с учетом специфики биотехнических систем и технологий (ОПК-3);

- выявлять естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности, привлекать для их решения соответствующий физико-математический аппарат (ОПК-2);

- организовывать работу малых групп исполнителей (ПК-12).

Целью освоения дисциплины «Физическое материаловедение» является изучение возможностей и способов использования современных материалов в медицинской практике, исходя из их структуры и функциональных характеристик. Особое внимание уделяется ознакомлению с новыми материалами и технологиями, перспективам их развития и внедрения в биотехнические системы в будущем. Дисциплина направлена на получение углубленных представлений об электронной и атомно-кристаллической структуре твердых тел, структурно-фазовых превращениях, физических свойствах (механических, тепловых, электронных, магнитных, оптических, и др.) проводниковых, полупроводниковых и диэлектрических материалов, а также методах определения физических свойств и оценки функциональных характеристик материалов [2]. Разработка и получение новых материалов являются основой современного производства, и уровнем своего развития во многом определяют научно-технический и экономический потенциал страны.

Эффективность учебного процесса и его результативность обусловлены многими факторами, в том числе и применением современных форм обучения в образовательном пространстве. Поддержка учебного процесса с помощью дистанционных технологий дает возможность достижения высокого качества подготовки будущих специалистов.

Для изучения дисциплины «Физическое материаловедение» студентам, обучающимся по направлению подготовки 12.03.04 Биотехнические системы, и технологии предлагается использование программного продукта Moodle. Система Moodle активно используется в образовательных учреждениях XXI века и предоставляет широкие возможности для коммуникации. Она позволяет активно взаимодействовать в режиме реального времени, оценивать результаты обучения, а также контролировать посещаемость, активность студентов, время их учебной работы в сети. Система поддерживает обмен файлами любых форматов - как между преподавателем и студентом, так и между самими студентами, а также оперативно информирует участников курса о текущих или предстоящих событиях.

Наиболее эффективными, на наш взгляд, учебными элементами для наполнения курса «Физическое материаловедение» являются: *гlossарий, задание, лекция, тест, форум*. Так, изучение понятий возможно при организации работы с глоссарием, причем в его составлении целесообразно вовлекать самих студентов, что будет являться эффективным способом развития умений анализировать, сравнивать различные по смыслу термины, выделяя главные смыслы, как, например, показано в работе [3]. Элемент курса «Выполнение задания»,

позволяет преподавателю оценить качество усвоения студентами содержания по различным темам дисциплины.

Использование ресурса «Форум» позволяет организовать обсуждение той или иной проблемы в режиме удобном для обучающихся, предоставляя им возможность оценивать работы вместе с преподавателем. В качестве оценочных работ студенты размещают самостоятельно выполненные индивидуальные творческие задания.

Элемент курса «Тесты» обеспечивает проведение текущего (по конкретным темам, разделам) и рубежного контроля. Результат прохождения теста каждый студент видит сразу, что позволяет ему самостоятельно определять свои личностные достижения и уровень освоения материала [4-6].

Кроме того, система Moodle незаменима как дополнение к аудиторной работе. Студентам обеспечивается самостоятельное освоение материала в случае пропуска занятия, а также устранение пробелов путем его повторения, предоставляется возможность лучше сориентироваться в общем объеме и содержании изучаемого материала.

В соответствии с рабочей программой содержание курса «Физическое материаловедение» включает 5 модулей (таблица 1). В любое время курс может быть дополнен или актуализирован. Например, модуль 3 «Новые материалы для медико-биологической практики» способствует успешному выполнению индивидуального творческого задания, обеспечивая формирование профессиональных компетенций [7].

Таблица 1

<i>№ п/п</i>	<i>Наименование модуля дисциплины</i>
Модуль 1	Классификация современных материалов
Модуль 2	Керамика и композиты в биотехнических системах
Модуль 3	Новые материалы для медико-биологической практики
Модуль 4	Пластмассы в биотехнических системах
Модуль 5	Методы исследования структуры и свойств материалов

В каждом модуле размещен материал по теме в форме лекций (в виде презентаций) и банк тестовых вопросов по всем модулям дисциплины. Размещение в оболочке Moodle в первую очередь банка тестовых заданий было обусловлено необходимостью мобильного проведения текущего контроля успеваемости студентов по разным модулям дисциплины. Особенно это удобно при самостоятельном изучении студентами некоторых разделов дисциплины и контроля уровня усвоения ими материала. Банк тестовых заданий по курсу содержит 150 вопросов, на каждый из которых предлагается 4 варианта ответов.

Таким образом, использование Moodle при изучении учебной дисциплины «Физическое материаловедение» расширяет возможности образовательного процесса как в плане организации аудиторной работы, так и в аспектах организации самостоятельной работы студентов и форм текущего и промежуточного

контроля. Современный подход позволяет формировать у обучающихся способность к самостоятельному поиску, к постоянному, непрерывному самообразованию, обеспечивая более высокое качество освоения содержания учебной дисциплины.

Список литературы

1. Глотова, М.Ю. Организация, поддержка и контроль образовательного процесса при преподавании в высшей школе на базе СДО Moodle / М.Ю. Глотова, Е.А. Самохвалова // Преподаватель XXI век. – 2012. - № 4.Ч.2. – С. 15-23.
2. Романченко, Н.М. Использование программы MOODLE при апробировании дистанционного преподавания дисциплины «Материаловедение. Технология конструкционных материалов» [Электронный ресурс] <http://www.kgau.ru/new/all/konferenc/konferenc/2014/g33.pdf>
3. Путеводитель по глоссарию, составленному для дисциплины "Вычислительные методы в химии" / Каныгина О. Н., Сальникова Е. В., Юрова М. С., Назмутдинова А. О., Калименова К. А., Кулешова В. В., Толстых В. Е., Федосова К. В., Юсупова К. В. // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф., 31 янв.-2 февр. 2018 г., Оренбург / М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Электрон. дан. - Оренбург : ОГУ, 2018. - С. 2771-2776. [Электронный ресурс] <https://elibrary.ru/item.asp?id=32690200&>
4. Бичева, И.Б. Использование системы Moodle как средства повышения эффективности образовательной деятельности // Современные научные исследования и инновации. - 2015. - № 5. Ч. 4 [Электронный ресурс] <http://web.snauka.ru/issues/2015/05/46485>.
5. Романченко, Н.М. О некоторых вопросах развития и внедрения дистанционного обучения. – Красноярск: Сборник «Ресурсосберегающие технологии механизации сельского хозяйства» (приложение к «Вестнику КрасГАУ»). – 2009. – № 5.
6. Худoley Н.В. Использование LMS Moodle при обучении иностранному языку в вузе (опыт ФГБОУ ВО «Красноярский ГАУ») // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Информатизация образования. 2018. Т. 15. № 4. С. 410—423. DOI 10.22363/2312- 8631-2018-15-4-410-423.
7. Современные проблемы биологической совместимости медицинских имплантатов / Каныгина О. Н., Стрекаловская А. Д., Бакаев А. А., Хайбулин Н. Р. // Университетский комплекс как региональный центр развития образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф., 31 янв.-2 февр. 2018 г., Оренбург / М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбургский гос. ун-т". - Электрон. дан. - Оренбург: ОГУ, 2018. - . - С. 2470-2474. [Электронный ресурс]

<https://elibrary.ru/item.asp?id=32690146>

ВЫСОКОСПИНОВЫЕ ПАРАМАГНИТНЫЕ ИОНЫ В КАЧЕСТВЕ КУБИТОВ И КУТРИТОВ ДЛЯ КВАНТОВЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ

**Арифуллин М.Р., канд. физ.-мат.наук,
Бердинский В. Л., д-р физ.-мат.наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Предложен новый способ физической реализации элементарных операции квантовых вычислений путем импульсных манипуляции электронными спинами парамагнитных ионов со спином $S=1$ в нулевом магнитном поле. Для этой цели предлагается использовать СВЧ-импульсы, фаза которых может изменяться во время его действия на спиновую систему иона. Теоретически предсказан эффект создания намагниченности парамагнитных ионов со спином $S=1$ в твердом теле в нулевом магнитном поле путем импульсных манипуляции электронными спинами.

Ключевые слова: парамагнитные ионы, квантовые вычисления, кубит, кутрит.

Введение: В последнее время квантовая информатика и квантовые вычисления достигли значительных, главным образом, теоретических успехов. Разрабатываются квантовые алгоритмы, предлагаются различные варианты архитектуры квантовых компьютеров и различные физические реализации кубитов [1], кутритов и других элементов более высокого порядка. Существует много различных предложений для физической реализации квантового компьютера [2-11], и все они определяются физикой их кубитов и природой взаимодействий между кубитами. Например, использование полимерных систем [12], представление кубита с помощью магнитного потока через сверхпроводящий контур [13], или использование в качестве кубитов электроны на поверхности жидкого гелия. Однако для практической реализации многих предложенных физических систем обработки квантовой информации требуются очень дорогие, сложные и, как правило, ненадежные физические и технические методы, например, сверхнизкие температуры, сверхсильные магнитные поля, сверхглубокий вакуум, сложные лазерно-оптические методы охлаждения.

Поэтому наиболее перспективным считаются твердотельные квантовые компьютеры. Это область активных исследований и ожидается, что будет легче масштабировать твердотельную систему до большого количества кубитов. Одним из вариантов является использование заряда и спина электрона в квантовых точках [11], но использование заряда в качестве кубита приводит к очень малым временам когерентности (10^{-10} - 10^{-13} сек.) из-за сильного взаимодействия с окружающей средой и флуктуаций потенциала, создаваемых внешними зарядами.

В данной работе предлагается использовать в качестве элементов квантового компьютера парамагнитные ионы с суммарным электронным спином $S = 1$ и с нулевым ядерным спином в простой кубической или тетрагональной кристаллической решетке. Даже в отсутствие внешнего магнитного поля (в нулевом магнитном поле) диполь-дипольное и спин-орбитальное взаимодействия устраняют вырождение уровней с суммарным спином $S_z = 0$ и $S_z = \pm 1$ [14, 15]. Такое расщепление уровней в нулевом магнитном поле позволяет отказаться от использования сильных магнитных полей для реализации спиновых кубитов или кутритов. Очевидно, что применение низких температур позволяет управлять исходными населенностями спиновых подуровней и временами спиновой релаксации и декогеренции.

Цель данной работы – описание импульсных последовательностей микроволновых и радиочастотных полей, способных реализовать элементарные операции алгоритмов квантовых вычислений и квантовой информатики с использованием высокоспиновых парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле.

Спиновое состояние парамагнитных ионов в тетрагональной кристаллической решетке с анизотропией типа «легкая ось» в нулевом магнитном поле определяется спиновым гамильтонианом

$$H = \frac{1}{2} D \cdot S_z^2, \quad (1)$$

где D – параметр расщепления в нулевом поле, который определяется спин-орбитальным взаимодействием. Например, расщепление в нулевом поле иона Cr^{3+} в кристаллической решетке $\text{K}_3\text{Co}(\text{CN})_6$ соответствует частоте 4,98 ГГц [16].

Основное спиновое состояние ионов с суммарным электронным спином $S = 1$ – триплетное состояние. Из-за спин-орбитального взаимодействия и кристаллического поля, расщепление в нулевом магнитном поле приводит к тому, что состояние $(|T_0\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\beta_j + \beta_i\alpha_j\rangle = |0\rangle)$ лежит ниже вырожденных состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$, образованных как суперпозиции состояний $|T_+\rangle = |\alpha_1\alpha_2\rangle = | +1\rangle$ и $|T_-\rangle = |\beta_1\beta_2\rangle = | -1\rangle$ с проекциями спина $S_z = \pm 1$.

$$|A\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\alpha_j - \beta_i\beta_j\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle - |-1\rangle) \text{ и } |B\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\alpha_j + \beta_i\beta_j\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle + |-1\rangle). \quad (2)$$

Для таких ионов в кристаллической решетке отсутствует магнитное дипольное взаимодействие и дополнительный механизм декогеренции. Эти состояния, расщепленные в нулевом магнитном поле, обеспечивают возможность для управления логическими кубитами на основе спиновых состояний $|0\rangle$, $|A\rangle$ и $|B\rangle$ с помощью СВЧ-импульсов, поляризованных вдоль осей OX или OY , и позволяют использовать эффекты геометрической фазы Берри [17].

Если СВЧ-поле создается катушками Гельмгольца или микрорезонатором, в котором магнитная компонента поляризована вдоль оси ОУ с фазовым сдвигом δ , то полный гамильтониан взаимодействия спиновой системы ионов с СВЧ-полем имеет вид

$$H = H_0 + H_Y(t) = \frac{1}{2} D \cdot \sigma_{1z} \sigma_{2z} + 2g\beta H_1 (\sigma_{1Y} + \sigma_{2Y}) \cos(\omega_G t + \delta) \quad (3)$$

Используя представление взаимодействия и свойство операторного произведения $(\sigma_{1z} \sigma_{2z})^2 = I_1 I_2$ (I_i - единичный оператор), можно показать, что оператор поворота $U_Y(\theta)$ двухспиновой системы на угол $\theta = g\beta H_1 \tau$ вокруг оси ОУ принимает вид:

$$U_Y(\theta, \delta) = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sigma_{Y1} \sigma_{Y2} \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} - i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cdot ((\sigma_{Y1} + \sigma_{Y2}) \cos \delta + (\sigma_{X1} \cdot \sigma_{Z2} + \sigma_{X2} \cdot \sigma_{Z1}) \sin \delta) \quad (4)$$

Такие представления операторов поворотов спина $S = 1$ в виде сумм и произведений односпиновых операторов σ_{xi}, σ_{yj} позволяют очень просто описывать действие различных СВЧ-импульсов. Очевидно, что такой способ построения операторов поворота можно легко обобщить для построения аналогичных операторов $U_X(\theta)$ и $U_Y(\theta)$ с различными фазовыми сдвигами и для частиц со спином $S > 1$ [18].

При низких температурах $kT \ll D$ населенным оказывается нижнее спиновое состояние $|0\rangle$. Можно показать, как оператор (5) позволяют переводить электронные спины из нижнего основного состояния $|0\rangle$ в состояние $|A\rangle$ или в состояние $|B\rangle$. Каждый импульс, поляризованный вдоль оси ОХ или ОУ, действует в своем двумерном подпространстве. Действие оператором $U_X(\theta, \delta)$ с произвольным фазовым сдвигом на состояние $|T_0\rangle = 2^{-1/2} |\alpha_i \beta_j + \beta_i \alpha_j\rangle = |0\rangle$ переводит это состояние в суперпозицию

$$U_X(\theta, \delta) |0\rangle = \cos \theta |0\rangle - i \sin \theta \cdot e^{-i\delta} |B\rangle. \quad (5)$$

Аналогичный результат получается для импульсов, поляризованных вдоль оси ОУ

$$U_Y(\theta, \delta) |0\rangle = \cos \theta |0\rangle - \sin \theta \cdot e^{i\delta} |A\rangle. \quad (6)$$

В одноосном кристалле СВЧ импульсы без сдвига фазы способны формировать выстраивание электронных спинов, но они не создают реального физического магнитного момента иона M_Z . Далее будет показано, как этот дополнительный фазовый сдвиг может влиять на физическое поведение спина $S = 1$.

Пусть первый импульс $U_x(\theta, 0)$ без фазового сдвига ($\delta = 0$), действующий вдоль оси ОХ на состояние $|0\rangle$, создает суперпозицию состояний $|0\rangle$ и $|B\rangle$. После этого второй СВЧ-импульс $(\pi/2)_y$ с фазовым сдвигом δ , действуя на эту суперпозицию, переводит спиновую систему в другую когерентную суперпозицию состояний $|\Psi\rangle$.

$$|\Psi\rangle = U_y(\pi/2, \delta) \cdot U_x(\theta, 0)|0\rangle = -\cos\theta \cdot e^{i\delta}|A\rangle - i\sin\theta|B\rangle \quad (7)$$

Для такой суперпозиции состояний среднее значение проекции спина S_z и, следовательно, магнитного момента M_z двух электронных спинов иона может быть отлично от нуля

$$\langle S_z \rangle = \langle \Psi | (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) | \Psi \rangle = 2\sin(2\theta)\sin\delta \quad (8)$$

Также легко показать вид матрицы плотности ρ и её зависимость от длительности импульсов, угла поворота θ и сдвига фазы δ в базисе $|T_+\rangle$, $|T_0\rangle$ и $|T_-\rangle$.

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \sin 2\theta \cdot \sin \delta & 0 & -(\cos 2\theta + i \sin 2\theta \cdot \cos \delta) \\ 0 & 0 & 0 \\ -(\cos 2\theta - i \sin 2\theta \cdot \cos \delta) & 0 & 1 - \sin 2\theta \cdot \sin \delta \end{pmatrix} \quad (9)$$

Вид этой матрицы плотности наглядно демонстрирует создание разности населенностей состояний $|T_+\rangle$ и $|T_-\rangle$ и когерентностей. При любом фазовом сдвиге $\delta \neq 0$ магнитный момент иона $M_z \neq 0$ достигает максимальных значений при $\theta = \pi/4$. Отсутствие фазового сдвига в двух последовательных импульсах не создает магнитного момента вдоль оси Z. Эффект образования магнитного момента парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле СВЧ импульсами создается сдвигом по фазе одного из импульсов, например, вдоль оси ОУ. Формирование магнитного момента $M_z \neq 0$ из когерентной суперпозиции спиновых состояний подобно переходу «выстраивание-ориентация», которое наблюдалось в оптических экспериментах [19]. Величина намагниченности зависит от концентрации ионов в кристалле и она может оказаться большой величиной.

Измерение магнитного момента иона M_z позволяет идентифицировать состояние спина электронов. Также магнитный момент иона M_z может выступать в качестве физической меры запутанности суперпозиции белловских состояний.

Таким образом, показана возможность реализации логических операций квантового компьютеринга с помощью импульсных манипуляций

высокоспиновыми состояниями парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле.

Дополнительным преимуществом схемы реализации квантового компьютера на парамагнитных ионах в нулевом магнитном поле является, то что в нулевом поле два вырожденных уровня ($|B\rangle$ и $|A\rangle$) являются собственными состояниями гамильтониана $H = \frac{1}{2} D \cdot \sigma_{1z} \sigma_{2z}$ и могут быть защищены от декогеренции (уширении линии), что существенно для времени выполнения квантово-логических операций.

Эффекты образования намагниченности парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле в результате действия таких импульсов можно использовать для создания систем квантовой памяти.

Заключение

Предложено в качестве элементов квантового компьютера использовать парамагнитные ионы с суммарным электронным спином $S = 1$ и с нулевым ядерным спином в простой кубической или тетрагональной кристаллической решетке в нулевом магнитном поле. Показаны преимущества схемы реализации квантовых вычислений на парамагнитных ионах в нулевом магнитном поле.

Для парамагнитных ионов со спином $S=1$ предложены СВЧ - импульсы со сдвигом фазы способные переводить спиновую систему в различные суперпозиционные состояния вырожденных и невырожденных уровней.

Построены последовательности импульсов для осуществления операции NOT, фазовый сдвиг S , необходимых для реализации квантовых преобразований Фурье.

Для парамагнитных ионов с суммарным электронным спином $S = 1$, находящихся в нулевом магнитном поле, теоретически предсказан эффект создания магнитного момента $M_z \propto \langle S_z \rangle \neq 0$ действием СВЧ-импульсов с различными фазовыми сдвигами.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-37-00374).

Список литературы

1. Nielsen M. A., Quantum Computation and Quantum Information / Nielsen M. A. – Cambridge, Chuang I. L. – Maidenhead: Cambridge University Press, 2000 – P.700.
2. Cirac I. J. and Zoller P. Quantum Computations with Cold Trapped Ions // Phys. Rev. Lett. . – 1995. – V. 74.– P. 4091
3. Gershenfeld N. A. and Chuang I. L. Bulk Spin-Resonance Quantum Computation // Science – 1997. – V. 275.– P. 350
4. Loss D. and DiVincenzo D. P. Quantum computation with quantum dots // Phys. Rev. A. – 1998. – V. 57.– P. 120

5. Kane B. E. et al. Silicon-based Quantum Computation // Prog. Phys. – 2000. – V. 48.– P. 1023
6. Twamley J. Quantum-cellular-automata quantum computing with endohedral fullerenes // Phys. Rev. A – 2003. – V. 67.– P. 052318.
7. Davidovich L., Brune M., Raimond J. M. and Haroche S. Quantum theory of a two-photon micromaser // Phys. Rev. A – 1987. – V. 36.– P. 3771–3787.
8. Vion D. et al. Manipulating the Quantum State of an Electrical Circuit // Science – 2002. – V. 296.– P. 886–889
9. Platzman P. M. and Dykman M. I. Quantum computing with electrons floating on liquid helium // Science – 1999. – V. 284.– P. 1967–1969.
10. Knill E., Laflamme R. and Milburn G. A scheme for efficient quantum computation with linear optics // Nature – 2001. – V. 409.– P. 46
11. Kitaev Y. A. Fault-tolerant quantum computation by anyons // Ann. Phys. – 2003. – V. 303.– P. 2–30.
12. Lloyd S. A potentially realizable quantum computer // Science. – 1993. – V. 261. – P. 1569
13. Mooij J. E., Orlando T. P., L. Levitov et al. Josephson persistent-current qubit // Science – 1999. – V. 285.– P. 1036–1039.
14. Альтшулер С. А. Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп / Альтшулер С. А. , Козырев Б. М. – 2 изд. – М., 1972
15. Абрагам А. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов / Абрагам А., Блини Б. – пер. с англ, ч. 1-2 – М., 1972-1973
16. Harwey A. F. Microwave engineering / Harwey A. F. – London and New York: Academic Press, 1963
17. Zu C. et al. Experimental realization of universal geometric quantum gates with solid-state spins // Nature. – 2014. – V. 514. – P. 72–75.
18. Зобов В. Е., Ермилов А. С. Последовательности импульсов для реализации квантового преобразования Фурье на многоуровневых системах // Письма в ЖЭТФ. – 2006. – V. 8. – №10. – P. 539–542.
19. Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных состояний. / Чайка М.П. – Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1975

КАЧЕСТВО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ КАК АКТУАЛЬНАЯ ПРОБЛЕМА ПОДГОТОВКИ КАДРОВ

Белокопытова О.Г., к.п.н.,

Кучеренко М.А., к.п.н., доцент

**Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Эффективность кадровой политики сегодня во многом зависит от того, насколько согласуются рыночные ориентации образования с государственными интересами, общенациональными и региональными приоритетами. Удовлетворение спроса на определенные специальности в отрыве от объективных потребностей развития региона и общества в целом приводит к серьезным диспропорциям на рынке людских ресурсов, на устранение которых уходит в несколько раз больше средств, чем на собственно подготовку бакалавра, а в дальнейшем и магистра.

Сегодня значительная часть выпускников технических образовательных учреждений не работает на производстве, педагогических – в школах, медицинских – в здравоохранении, выпускников учебных заведений сельскохозяйственной направленности – в аграрной области. И это все при условии, что в регионе сократился кадровый состав агропромышленного комплекса, не хватает врачей и педагогов.

Формирование эффективной кадровой политики зависит от многих звеньев одной цепочки «личность – общество – образование – государство – экономика». Решить назревшую проблему можно только тогда, когда образование, наука, производство и государство выступают как социальные партнеры, ответственные за решение общей задачи – повышение качества жизни. Образование есть фактор развития страны, ее будущего.

Сегодняшние школьники через несколько лет станут выпускниками вузов, а еще через десяток лет станут той социальной группой, которая будет полностью определять характер всех процессов в обществе. Какое наше молодое поколение сегодня, такова наша жизнь в недалеком завтра.

В свете развития человеческого общества, важными и значительными ресурсами являются знания, стремления и изобретательность людей. Без них не возможен какой либо устойчивый прогресс в отношении мира. Уровень образованности населения является важнейшим показателем развитости страны, залогом ее процветания.

Основной задачей университета является подготовка квалифицированных кадров, соответствующих современным потребностям. Вопрос качества специалиста всегда был актуальным и важным, но в условиях реформирования всех форм деятельности он становится одним из самых сложных и насущных. Под моделью бакалавра, а в дальнейшем и магистра или специалиста, как правило понимают совокупность профессиональных, социальных, психологических,

креативных и личностных качеств и компетенций, которые определяют их способность трудиться в условиях рыночных отношений. Поэтому, современный выпускник должен быть гармонически развитой личностью, способной систематизировать полученные знания, анализировать и выделять главное, осваивать новые знания, быстро реагировать на изменяющиеся условия профессиональной деятельности, принимать не стандартные решения. Он должен иметь определенное фундаментальное образование, что будет способствовать его мобильности, возможности быстрее ориентироваться и перестраиваться в профессиональной деятельности.

Для поддержания университета, как лидера рынка качественных образовательных услуг, необходимо углубить интеграцию с производственными структурами, синтезировать учебно-научно-производственный процесс, обращенный к проблемам нашего региона и общества в целом. Единство учебного и научно-производственного процессов обеспечивается путем привлечения студентов к разработкам; внедрением в лекционные курсы, практические, лабораторные занятия результатов научных исследований; совмещением педагогической работы и деловой практики, усилением практической направленности.

В современных условиях стратегической целью высшего профессионального образования является повышение качества подготовки выпускника вуза. Этого можно достичь при оптимальном планировании и организации учебного процесса, при использовании современной материальной базы и современных информационных технологий, при наличии у обучающихся мотивации к обучению и рациональной организации их самостоятельной работы.

Вся деятельность человека обусловлена реально существующими потребностями. Мотивированная деятельность – это свободные, обусловленные внутренними побуждениями действия человека, направленные на достижение своих целей, реализацию своих интересов. В мотивированной деятельности работник сам определяет меру своих действий в зависимости от побуждений и условий внешней среды.

Любой образовательный процесс должен включать в себя обучение, содержать элементы воспитания и получать дальнейшее развитие в самообразовании. Результат труда любого человека определяется не только уровнем его профессиональной подготовленности, но и тем, как человек относится к труду, а это зависит от того, как он осознаёт своё место в мире, обществе, что он представляет собой как личность. Поэтому воспитание человека, развитие его мировоззрения во многом определяют наш будущий социальный и научно-технический прогресс.

Подготовка профессионала во многом зависит от качественного профессорско-преподавательского состава, благодаря чему обеспечивается согласование субъект-субъектных отношений и действий. А отсюда следует, что планируя учебный процесс, готовясь к занятию, преподаватель должен думать не только о том, что надо объяснить на занятии, какие опыты показать, какие задачи решить, но и о том, как использовать занятие с его содержанием и мето-

дами для того, чтобы развивать личность студента с чётким миропониманием, твёрдыми взглядами, высокими нравственными качествами.

В системе общего и высшего профессионального образования одно из ведущих мест принадлежит физике, как фундаментальной науке. Роль этого учебного предмета определяется развитием физической науки, ее значением в решении важных научно-технических проблем, проникновением физических методов исследования в другие естественные и технические науки, науки о человеке и обществе в целом.

Необходимыми условиями для обеспечения качества знаний любым педагогом являются, несомненно, глубокие знания своего предмета, владение всем арсеналом приемов и методов преподавания, умение творчески их применять в работе.

В связи с этим, Министерством образования Оренбургской области на базе факультета повышения квалификации преподавателей Оренбургского государственного университета ежегодно организуются курсы для учителей физики города Оренбурга и Оренбургской области. Координатором этого проекта является доцент кафедры физики и методики преподавания физики (ФиМПФ), директор университетской физико-математической школы Кучеренко М.А. Слушателями работает команда преподавателей физического факультета университета: доценты кафедры ФиМПФ Гуньков В.В., Пискарева Т.И., Узенбаев Ф.Г.; доцент кафедры радиофизики и электроники (РФиЭ) Русинов А.П.; старшие преподаватели кафедры ФиМПФ Белокопытова О.Г. и Якупов Г.С.; старший преподаватель кафедры РФиЭ Гадаева Э.К..

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 прошлых лет.

Добавим, что в совместном сотрудничестве преподавателей факультета и учительского сообщества решается и задача привлечения выпускников к поступлению на различные направления подготовки бакалавров и специалистов, реализуемых в университете путем проведения занятий с абитуриентами в университетской физико-математической школе и на подготовительных курсах при центре «Абитуриент» ОГУ, к олимпиадной (Межрегиональная олимпиада Нижегородского университета «БИБН»; Евразийская многопрофильная олимпиада старшеклассников «Поиск») и учебно-исследовательской деятельности школьников (секция «Университетские школы» в рамках научной конференции студентов).

В заключении отметим, что особенно важно правильно выбирать преподавателем стратегию и тактику обучения. Это, на наш взгляд, определяется не только тем, на сколько все выбранное будет способствовать успешному реше-

нию проблемы развития личности выпускника, но еще более важно, на сколько оно будут способствовать полноценному гармоническому развитию личности специалиста в целом.

Список литературы:

1. Белокопытова, О. Г. Основные факторы, влияющие на развитие естественнонаучного мировоззрения личности студента университета / О. Г. Белокопытова // Человеческий капитал, 2019. - № 10 (130). - С. 96-105.
2. Кучеренко, М. А. Профессиональное мастерство учителя физики в контексте достижения предметных результатов старшеклассника [Электронный ресурс] / М.А.Кучеренко, О.Г.Белокопытова // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции.— Оренбург : ОГУ, 2019. - . - С. 2859-2867.
3. 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.
4. Наумова, О.Г. Развитие естественнонаучного мировоззрения студентов в университетском образовании : авт. дисс. ... канд. пед. наук : 13.00.01 / О.Г. Наумова. – Оренбург : Оренбургский государственный университет, 2008. – 23 с.

НАМАГНИЧИВАНИЕ ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ ФАЗОВО-МОДУЛИРОВАННЫМИ СВЧ-ИМПУЛЬСАМИ В НУЛЕВОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Бердинский В. Л., д-р физ.-мат. наук, доцент,

Арифуллин М.Р., канд. физ.-мат. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Теоретически предсказан эффект создания намагниченности парамагнитных ионов со спином $S=1$ в твердом теле в нулевом магнитном поле путем импульсных манипуляций электронными спинами. Для этой цели предлагается использовать скрещенные СВЧ-импульсы с различной начальной фазой или импульсы конечной длительности. Описаны резонансные случаи, когда частота СВЧ-импульсов совпадает с частотой расщепления уровней в нулевом поле. Показано сходство данного эффекта с переходом «выстраивание-ориентация», который наблюдался в оптических экспериментах.

1. Введение

Очевидно, что в нулевом магнитном поле высокоспиновые парамагнитные ионы с суммарным спином $S \geq 1$, такие как Ni^{2+} , Fe^{3+} , Cr^{2+} , Gd^{3+} и другие, создают нулевую намагниченность. В твердом теле их спиновые состояния определяется кристаллическим полем или полем лигандов и спин-орбитальным взаимодействием. В нулевом магнитном поле спиновые состояния ионов с двумя неспаренными электронами и с суммарным спином $S=1$ в кристаллах с одноосной анизотропией описываются спиновым гамильтонианом [1]

$$H_0 = D \cdot S_z^2 \quad (\text{a})$$

где D – параметр расщепления в нулевом поле, который определяется спин-орбитальным взаимодействием. Собственными состояниями этого гамильтониана являются спиновые векторы $|T_0\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\beta_j + \beta_i\alpha_j\rangle = |0\rangle$, $|A\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\alpha_j - \beta_i\beta_j\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle - |-1\rangle)$ и $|B\rangle = 2^{-1/2}|\alpha_i\alpha_j + \beta_i\beta_j\rangle = 2^{-1/2}(|1\rangle + |-1\rangle)$. При низких температурах $kT \ll D$ населенным оказывается нижнее спиновое состояние $|0\rangle$. Векторы $|A\rangle$ и $|B\rangle$ являются суперпозициями состояний $|T_+\rangle = |\alpha_1\alpha_2\rangle = |+1\rangle$ и $|T_-\rangle = |\beta_1\beta_2\rangle = |-1\rangle$ с проекциями спина $S_z = \pm 1$. Здесь следует отметить, что в нулевом магнитном поле все три спиновых состояния $|0\rangle$, $|A\rangle$ и $|B\rangle$ не создают магнитных моментов, так как средние значения всех спиновых операторов $(\sigma_{1i} + \sigma_{2i})$ ($i = x, y, z$) равны нулю. В термодинамическом равновесии возбужденные уровни $|A\rangle$ и $|B\rangle$ равнонаселены; это состояние аналогично явлению оптического выстраивания орбитального углового момента атомов [2] и экситонов

[3]. Оптическое выстраивание – это одинаковое заселение состояний с проекциями орбитального момента $L_z = \pm 1$, при этом макроскопический магнитный момент равен нулю. Для создания макроскопического магнитного момента необходимо преимущественное заселение состояний с определенным значением проекции L_z . Во многих работах, например, [4], описано явление перехода оптического выстраивания в поляризацию, что детектировалось по изменению степени поляризации спонтанного излучения. Для парамагнитных ионов с электронным спином $S = 1$ аналогом оптического выстраивания является состояние с равными населенностями состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$.

Для описания и анализа действия СВЧ-импульсов на парамагнитные ионы спиновый гамильтониан (1) удобно записать через операторы Паули отдельных электронов. Для операторов $U(t)$, описывающих действие СВЧ-поля с частотой ω_G на высокоспиновые ионы, можно получить формулы, удобные для последующих применений в виде полиномов односпиновых операторов Паули. Гамильтониан спиновой системы ионов, взаимодействующих с СВЧ-полем, поляризованным вдоль оси ОХ,

$$H = H_0 + H_X(t) = \frac{1}{2} D \cdot \sigma_{1z} \sigma_{2z} + g\beta \cdot B_X (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \cos(\omega_G t), \quad (b)$$

где $g\beta \cdot B_X$ - частота прецессии.

В представлении взаимодействия гамильтониан взаимодействия $\tilde{H}_X(t)$ удобно представить в виде суммы двух операторов.

$$\begin{aligned} \tilde{H}_X(t) &= \exp(iH_0 t) g\beta \cdot B_X (\sigma_{1x} + \sigma_{2x}) \exp(-iH_0 t) \cos(\omega_G t) = \\ &= g\beta \cdot [\exp(iH_0 t) B_X \sigma_{1x} \exp(-iH_0 t) + \exp(iH_0 t) B_X \sigma_{2x} \exp(-iH_0 t)] \cos(\omega_G t) \end{aligned} \quad (c)$$

Оператор поворота $U_Y(\theta, \delta)$ двухспиновой системы на угол θ СВЧ-импульсом с фазовым сдвигом δ приобретает вид

$$\begin{aligned} \tilde{U}_Y(\theta, \delta) &= \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sigma_{Y1} \sigma_{Y2} \cdot \sin^2 \frac{\theta}{2} - \\ &- i \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} ((\sigma_{Y1} + \sigma_{Y2}) \cos \delta + (\sigma_{X1} \cdot \sigma_{Z2} + \sigma_{X2} \cdot \sigma_{Z1}) \sin \delta) \end{aligned} \quad (d)$$

Можно показать, что последовательное применения СВЧ-импульсов вдоль осей ОХ и ОУ без фазовых сдвигов позволяет создавать суперпозиции вырожденных состояний

$$U_Y(\pi/2, 0) U_X(\theta, 0) |0\rangle = (-\cos \theta \cdot |A\rangle - i \sin \theta \cdot |B\rangle) \quad (e)$$

Такая суперпозиция состояний тоже соответствует выстраиванию спиновых моментов электронов с $m = +1$ и $m = -1$, но уже с другими когерентностями.

В одноосном кристалле СВЧ импульсы без сдвига фазы способны формировать выстраивание электронных спинов, но они не создают реального физического магнитного момента иона M_Z . Далее будет показано, как этот дополнительный фазовый сдвиг может влиять на физическое поведение спина $S = 1$.

Пусть первый импульс $U_x(\theta, 0)$ без фазового сдвига ($\delta = 0$), действующий вдоль оси ОХ на состояние $|0\rangle$, создает суперпозицию состояний $|0\rangle$ и $|B\rangle$. После этого второй СВЧ-импульс $(\pi/2)_y$ с фазовым сдвигом δ , действуя на эту суперпозицию, переводит спиновую систему в другую когерентную суперпозицию состояний $|\Psi\rangle$.

$$|\Psi\rangle = U_y(\pi/2, \delta) \cdot U_x(\theta, 0)|0\rangle = -\cos\theta \cdot e^{i\delta}|A\rangle - i\sin\theta|B\rangle \quad (f)$$

Для такой суперпозиции состояний среднее значение проекции спина S_z и, следовательно, магнитного момента M_Z двух электронных спинов иона может быть отлично от нуля

$$\langle S_z \rangle = \langle \Psi | (\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) | \Psi \rangle = 2\sin(2\theta)\sin\delta \quad (g)$$

Также легко показать вид матрицы плотности ρ и её зависимость от длительности импульсов, угла поворота θ и сдвига фазы δ в базисе $|T_+\rangle$, $|T_0\rangle$ и $|T_-\rangle$.

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \sin 2\theta \cdot \sin \delta & 0 & -(\cos 2\theta + i \sin 2\theta \cdot \cos \delta) \\ 0 & 0 & 0 \\ -(\cos 2\theta - i \sin 2\theta \cdot \cos \delta) & 0 & 1 - \sin 2\theta \cdot \sin \delta \end{pmatrix} \quad (h)$$

Вид этой матрицы плотности наглядно демонстрирует создание разности населенностей состояний $|T_+\rangle$ и $|T_-\rangle$ и когерентностей. При любом фазовом сдвиге $\delta \neq 0$ магнитный момент иона $M_Z \neq 0$ достигает максимальных значений при $\theta = \pi/4$. Отсутствие фазового сдвига в двух последовательных импульсах не создает магнитного момента вдоль оси Z. Эффект образования магнитного момента парамагнитных ионов в нулевом магнитном поле СВЧ импульсами создается сдвигом по фазе одного из импульсов, например, вдоль оси ОУ. Формирование магнитного момента $M_Z \neq 0$ из когерентной суперпозиции спиновых состояний подобно переходу «выстраивание-ориентация», которое наблюдалось в оптических экспериментах [4]. Величина намагниченности

зависит от концентрации ионов в кристалле и она может оказаться большой величиной.

Измерение магнитного момента иона M_z позволяет идентифицировать состояние спина электронов. Также магнитный момент иона M_z может выступать в качестве физической меры запутанности суперпозиции белловских состояний.

Заключение

Для парамагнитных ионов с суммарным электронным спином $S = 1$, находящихся в нулевом магнитном поле, теоретически предсказан эффект создания магнитного момента $M_z \propto \langle S_z \rangle \neq 0$ действием СВЧ-импульсов с различными фазовыми сдвигами.

Предложены СВЧ-импульсы с различной поляризацией и со сдвигом фазы, способные переводить спиновую систему в различные суперпозиционные состояния вырожденных и невырожденных уровней.

Для операторов спиновой эволюции в нулевом магнитном поле и в переменных высокочастотных полях СВЧ-импульсов предложены новые представления экспоненциальных операторов в виде полиномов односпиновых матриц Паули и тригонометрических функций углов поворота спинов.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 18-37-00374).

Список литературы

1. Альтшулер С. А. Электронный парамагнитный резонанс соединений элементов промежуточных групп / Альтшулер С. А. , Козырев Б. М. – 2 изд. – М., 1972
2. Чайка М. П. Выстраивание возбужденных состояний неона в разряде постоянного тока // Оптика и спектроскопия. – 1969. – V.27
3. Джигоев Р.И., Захарченя Б.П., Ивченко Е.Л., Коренев В.Л., Кусраев Ю.Г. Оптическая ориентация и выстраивание экситонов в квантовых точках // ФТТ. – 1998. – V. 40. – С.5
4. Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных состояний. / Чайка М.П. – Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1975
5. Абрагам А. Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов / Абрагам А., Блини Б. – пер. с англ, ч. 1-2 – М., 1972-1973

ВЛИЯНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПРОЦЕССЫ СУШКИ КЕРАМИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

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,
Федеральное государственное бюджетное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Введение

При подготовке керамического сырья важной проблемой является процесс ускоренной сушки керамических изделий.

В международной практике для сушки отдельных видов керамики широко используются СВЧ-печи бытового назначения, что значительно сокращает время сушки, снижает стоимость испытаний и оборудования, поэтому особый интерес вызывает сравнительный анализ сушки керамического сырья в микроволновых печах и сушильных шкафах.

Рассмотрены эффекты влияния воздействия микроволнового излучения на процессы сушки образцов, зафиксированы изменение температуры образцов в СВЧ-печи, и сделан сравнительный анализ потери массы, по отношению к традиционной сушке в сушильном шкафу.

Разогрев в СВЧ-печи происходит не только с поверхности разогреваемого тела, но и в его объеме, содержащему полярные молекулы (например, воды) так как радиоволны данной частоты проникают и поглощаются на глубине примерно 2.5 см. Это сокращает время разогрева по сравнению с сушильным шкафом [1].

Изготовление образцов

Образцы для исследований получали по традиционной технологии: готовили массу (шихту), добавляя на Чаганский суглинок до 20% воды, производили полусухое прессование образцов в форме дисков диаметром 45 и высотой 25 мм. Образцы изготовлены из суглинков содержащей природной глины.

Таблица 1

Химический состав суглинки

Наименование сырья	Содержание оксидов, мас%												
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	TiO ₂	CaO	MgO	Fe ₂ O ₃	P ₂ O ₅	F	S	C	Na ₂ O	K ₂ O	п.п. п.
Суглинок Чаганский	51.29	12.1	-	11.9	2.08	4.8	-	-	2.4	-	3.57	-	11.6

Для эксперимента использовалась микроволновая печь марки Samsung M1712NR, мощностью 600 Вт. В СВЧ печи создавалось неоднородное электромагнитное поле с частотой 2,450 ГГц.

Шкаф сушильный марки ШСП- 0,5-70, потребляемая мощность 4кВт

Сушка образцов производилась на воздухе 24 часа при комнатной температуре 24°C, потеря массы при этом составила примерно 6%.

Таблица 2

Образец	Начальная масса (гр)	Масса через 24ч (гр)	Потеря массы (гр)
1	112,8гр	107,6гр	5,2
2	113,2гр	107,2гр	6

Эксперимент

Производили сушку (I) образца в сушильном шкафу при температуре 70 °С, 2 часа. Потеря массы составила 8,82% (табл. 3). Сушку (II) образца проводили в микроволновой печи в течение 15 минут при мощности $N_{max}=450$ Вт; потеря массы составила 13.43%.

Таблица 3

Сушильный шкаф			Микроволновый печь		
Время	Масса (гр)	Потеря массы (гр)	Время	Масса (гр)	Потеря массы (гр)
9.30	107,6	6,1	10.00	107,6	-
9.50	101,5	7	10.05	95,3	12,3
10.23	100,6	7,6	10.08	95,1	12,5
10.44	100	7,9	10.10	95,0	12,6
10.55	99,7	8,2	10.15	95,0	12,6
11.10	99,4	8,2			
11.30	99,4				

Результаты и их обсуждение

При нагревании с помощью СВЧ излучения, процесс сушки образца происходит во всем объеме [2]. В случае чаганского суглинка это означает, что нагрев происходит однообразно во всем образце. В большинстве реальных образцов температурная однородность уменьшается СВЧ - полем и неоднородностью образца, температура зависит от взаимодействия образца и СВЧ - поля. В противоположность традиционному нагреванию объемное нагревания приводит к уменьшению сопротивления теплового переноса внутри образца, что позволяет значительно лучше прогревать относительно большие образцы со значительно более однородной температурой внутри образца.

Результаты эксперимента, свидетельствуют о принципиальной возможности сушки керамических изделий СВЧ излучением. При этом оказывается, что сушка СВЧ излучением значительно менее энергозатратна по сравнению с традиционными методами, $S_{СВЧ}/S_{ТР}=0.75 \times 10^{-2}$.

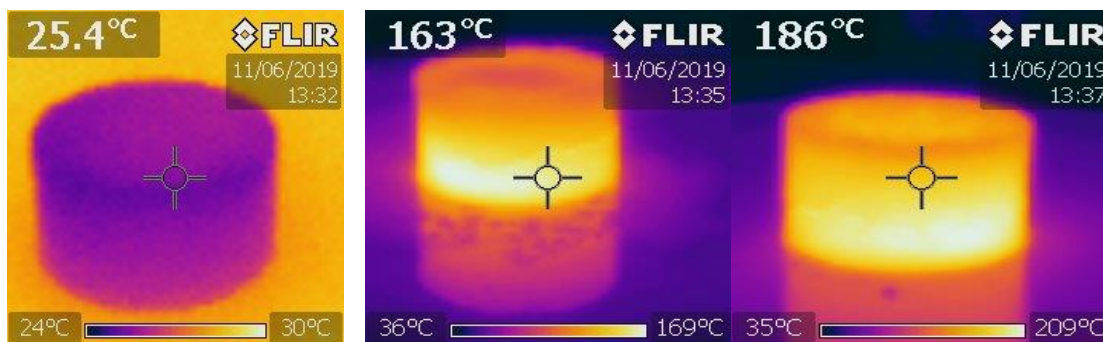


Рис. 1. Температурные распределения в керамических образцах цилиндрической формы при СВЧ-нагреве

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 глины :диссертация на соискание ученой степени 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 Оренбургского государственного университета. – 2011 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 Оренбургского государственного университета. – 2012. – № 4. – С. 170-174.

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ПРОЦЕССЫ ОПТИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ-ДЕЗАКТИВАЦИИ МОЛЕКУЛ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ В МАТРИЦЕ КИСЛОРОДОНЕПРОНИЦАЕМОГО ПОЛИМЕРА

Гладышева Ю.А.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

В последнее время активно ведутся исследования влияния наночастиц различного типа на свойства полимеров. Введение даже небольшого количества металлических наночастиц в полимерную матрицу может сильно изменять механические, термические, оптические и другие свойства материала

Наночастицы благородных металлов, например серебра, характеризуются плазмонным резонансом в видимой области спектра. При возбуждении в таких наноструктурах поверхностных локализованных плазмонов вблизи поверхности наночастиц генерируются сильные локальные электромагнитные поля (так называемое ближнее поле), которое способно влиять на характеристики окружающих молекул.

Исследования показывают, что безызлучательные процессы являются основными процессами деактивации возбужденного состояния флуоресцирующей молекулы вблизи металла. Эксперименты последних лет показывают влияние поверхностного плазмонного резонанса (ППР) металлических наночастиц на флуорофоры. Это связано с усилением квантового выхода флуоресценции вблизи поверхности наночастицы [1]. Так, например, в работе [2] рассматривается изменения в поглощении и флуоресценции ряда молекул, в том числе изменения в поглощении и флуоресценции молекул органических красителей в ближнем поле плазмонных наночастиц. В литературе встречаются работы, рассматривающие спектральные характеристики водного раствора наночастиц серебра и их влияние на органические красители, в частности, в работе [3] показано усиление флуоресценции молекул родамина 6G в присутствии наночастиц серебра в растворах и на серебряных пленках, полученных электроосаждением. Также ряд работ рассматривает как меняются спектры поглощения и люминесценции раствора красителя при внесении наночастиц золота в раствор. Авторами работ [4,5] рассматривается влияние наночастиц золота на молекулы красителя родамина 6G в водном растворе.

В работе [16] впервые рассматривается внедрение наночастиц металлов в полимерные матрицы.

Оптические свойства тонких полимерных пленок с молекулами красителей в присутствии плазмонных металлических наночастиц исследованы неполно [14,15].

В нашей работе предложена методика изготовления полимерных пленок с введением различных добавок.

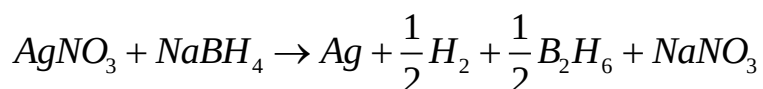
Полимерные пленки изготавливались методом полива на стеклянную очищенную подложку (размер подложки 2 см на 3 см.) из раствора (полимер – краситель - растворитель). Затем пленки помещались в затемненное место для сушки при комнатной температуре. После испарения растворителя образовывалась твердая окрашенная пленка. Толщина полученных пленок составляла 10 – 15 мкм.

Чтобы обеспечить чувствительность полимерной пленки в спектральном диапазоне лазерного излучения нами добавлялись в полимер сенсibilизаторы. В этой роли выступают различные молекулярные красители. В данной работе использовались красители ксантанового ряда: эритрозин и родамин 6G.

Для проведения экспериментов были приготовлены растворы в дистиллированной воде красителей эритрозина и родамина 6G с концентрациями порядка 10^{-3} (моль/литр), растворы красителей в поливиниловом спирте (ПВС), раствор наночастиц серебра в воде, растворы красителя и наночастиц серебра в поливиниловом спирте. ПВС растворялся в воде, концентрация ПВС по массе 5%.

Для получения наночастиц металлов в водных растворах применялся метод химического восстановления. Наночастицы серебра в водных растворах получают путем восстановления ионов серебра с помощью аскорбиновой кислоты, боргидрида натрия, гидразина, глюкозы и других восстановителей [6].

Нами были синтезированы наночастицы серебра методом химического восстановления борогидридом натрия [7,8,9]. В 15 мл охлажденного водного раствора 0.002 М борогидрида натрия ($NaBH_4$) при интенсивном перемешивании по капле добавлялся 1 мл 0.001М нитрата серебра ($AgNO_3$).



Данная методика позволяет получить наночастицы серебра с узким распределением по размерам в пределах 12 ± 2 нм [9]. Абсолютные значения концентраций наночастиц металлов в полученных растворах не определялись.

При изготовлении тонких пленок из полимерного материала ПВС (PVA) с добавлением сенсibilизаторов эритрозина (Er) и родамина 6G (R6G) данный полимерный раствор смешивался с полученным раствором наночастиц AgNP в воде.

С помощью спектрофотометра T70/T70+ UV-VIS регистрировались электронные спектры поглощения тонких пленок. На автоматизированной спектрофлуорометрической установке на базе монохроматора МДР- 204 и ФЭУ-100 проводилось измерение спектров люминесценции. Светодиод синего цвета (405 нм) применялся в качестве источника возбуждения.

При добавлении наночастиц серебра (AgNP) в полимерные матрицы, окрашенные эритрозином и родамином 6G, наблюдается сильная полоса поглощения в видимом диапазоне.

Изучение влияния наночастиц серебра на спектральные характеристики красителей проводилось оптическими методами. Для этого снимались спектры поглощения и спектры люминесценции эритрозина и родамина 6G. Поливини-

ловый спирт сам характеризуется максимумами поглощения, поэтому снятие спектра поглощения производилось относительно пленки чистого ПВС.

На рисунках 1,2 представлены спектры поглощения эритрозина и родамина 6G в системах Er/PVA/AgNP и R6G/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя, на которых видно, что при введении в полимерную матрицу ПВС с красителем наночастиц AgNP наблюдается усиление интенсивности спектра поглощения красителя.

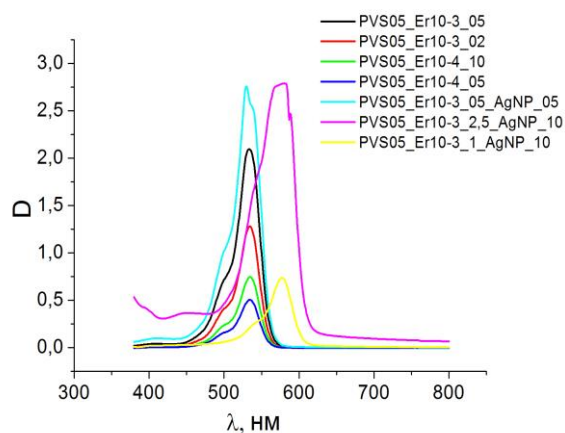


Рисунок 1 - Спектры поглощения эритрозина в тонких пленках Er/PVA и Er/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя

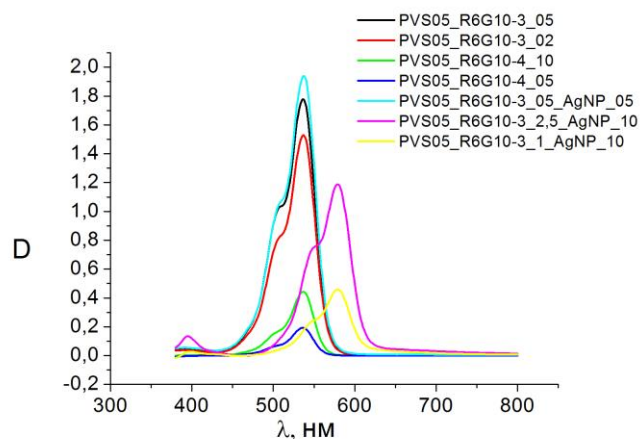


Рисунок 2 - Спектры поглощения родамина 6G в тонких пленках R6G/PVA и R6G/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя

На рисунках 3 и 4 представлены спектры поглощения тонких пленок PVA/AgNP и эритрозина в пленках Er/PVA/AgNP в зависимости от концентрации введенных в матрицу наночастиц серебра. Из рисунка 3 видно, что при увеличении концентрации наночастиц серебра (AgNP) в полимерной матрице ПВС наблюдается усиление интенсивности спектра поглощения. Для исследования влияния наночастиц серебра на спектральные характеристики эритрозина, нами были изготовлены образцы - полимерные матрицы, в которых концентрация красителя и полимера оставались постоянными (объем водного раствора ПВС 1 мл, объем водного раствора эритрозина 0,2 мл), а концентрация вводимых наночастиц в вводимом растворе менялась (объемы AgNP, вводимые в матрицу ПВС+эритрозин 0,1 мл, 0,2 мл, 0,3 мл, 0,5 мл, 0,7 мл, 0,9 мл, 1,0 мл, 1,2 мл). При введении в полимерную матрицу, окрашенную эритрозином, малой концентрации наночастиц серебра наблюдается увеличение интенсивности спектра поглощения (объем AgNP 0,1 мл), далее наблюдается уменьшение оптической плотности пленки (при объемах AgNP 0,2 мл, 0,3 мл, 0,5 мл).

При определенных соотношениях концентраций краситель/AgNP происходит усиление интенсивности спектра поглощения красителя. Это связано с влиянием электромагнитного поля наночастиц. Эффективное рассеяние света вызывается возбуждением многочисленных плазмонов в частице, при этом вблизи поверхности наночастиц образуется усиленное электромагнитное поле.

Это способствует перекрыванию полос поглощения красителя и ППП металла, что ведет к существенному увеличению количества поглощенного света системой в целом.

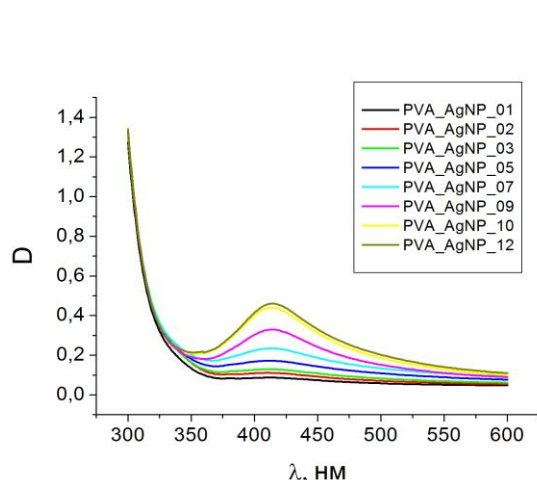


Рисунок 3 - Спектры поглощения тонких пленок PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла

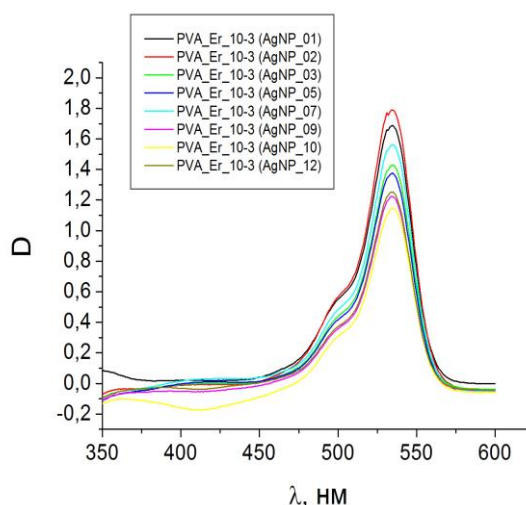


Рисунок 4 - Скорректированные спектры поглощения эритрозина в тонких пленках Er/PVA/AgNP в присутствии наночастиц серебра в зависимости от концентрации металла

Также в полимерных пленках с красителем и с металлическими наночастицами серебра наблюдалось усиление люминесценции.

На рисунках 5,6 представлены спектры люминесценции эритрозина и родамина 6G в системах Er/PVA/AgNP и R6G/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя, на которых видно, что при введении в полимерную матрицу ПВС с красителем наночастиц AgNP наблюдается усиление интенсивности спектра поглощения красителя.

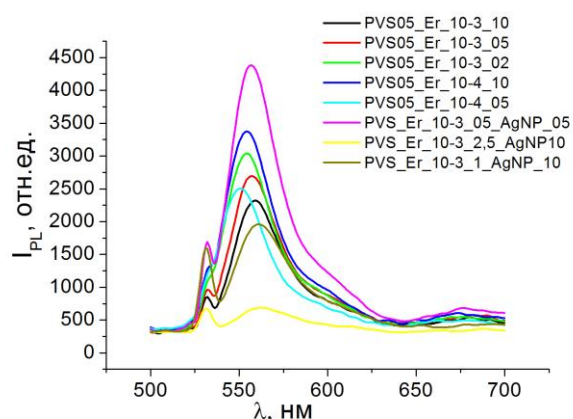


Рисунок 5 - Спектры люминесценции эритрозина в системах Er/PVA и Er/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя

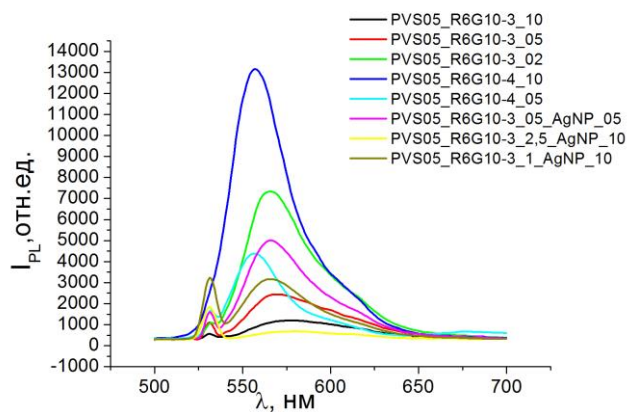


Рисунок 6 - Спектры люминесценции родамина 6G в системах R6G/PVA и R6G/PVA/AgNP в зависимости от концентрации металла и красителя

Это связано с увеличением квантового выхода флуоресценции в системе с повышенным содержанием металлических плазмонных наночастиц - с неодно-

кратно обсуждавшимся в литературе влиянием плазмонных систем на радиационные переходы в молекулах [10,11].

Проводилось сравнение спектров поглощения и люминесценции полученных пленок в зависимости от концентрации наночастиц серебра и концентрации красителя.

На рисунках представлены спектральные характеристики поглощения (рисунки 7,8) и люминесценции (рисунки 9,10) эритрозина и родамина 6G в полимерных матрицах при введении различных концентраций наночастиц серебра по массе.

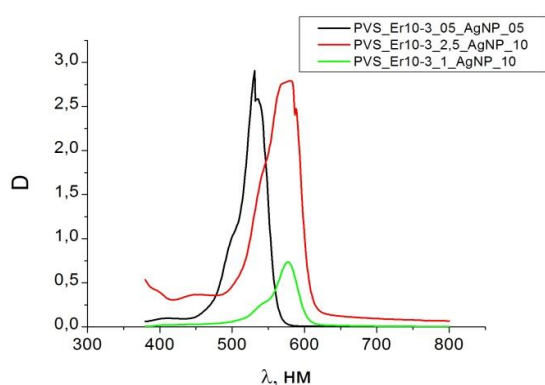


Рисунок 7 - Спектры поглощения эритрозина в полимерной матрице ПВС с добавлением различных концентраций AgNP

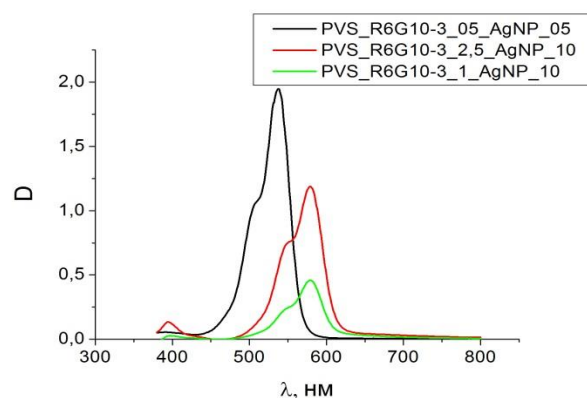


Рисунок 8 - Спектры поглощения родамина 6G в полимерной матрице ПВС с добавлением различных концентраций AgNP

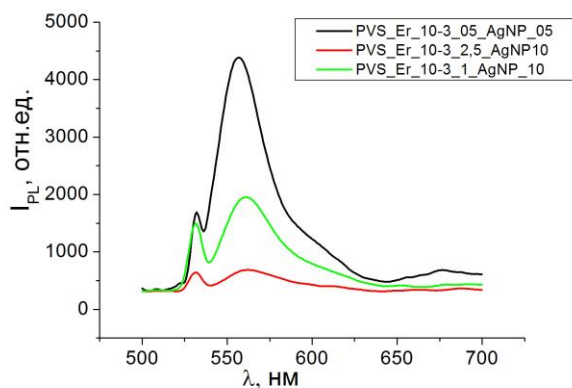


Рисунок 9 - Спектры люминесценции эритрозина в полимерной матрице ПВС с добавлением различных концентраций AgNP и красителя

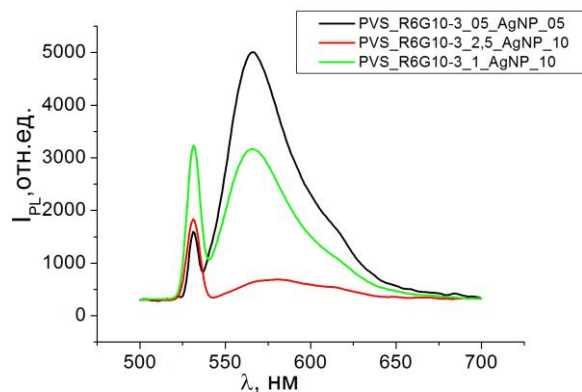


Рисунок 10 - Спектры люминесценции родамина 6G в полимерной матрице ПВС с добавлением различных концентраций AgNP и красителя

Усиление интенсивности флуоресценции эритрозина и родамина 6G при введении наночастиц серебра в полимерные матрицы наблюдается в определенном концентрационном диапазоне. Изменение концентрации наночастиц как в сторону уменьшения, так и в сторону увеличения сопровождается тушением излучения красителя.

В работе [12] отмечается, что для некоторых полимеров, наблюдаемое усиление люминесценции связывалось главным образом с косвенным действием наночастиц, а именно - изменением морфологии (микроструктуры) полимерных материалов при введении металлических наночастиц.

Усиление люминесценции люминофоров при плазмонном резонансе является перспективным направлением развития люминофоров. Усиление люминесценции происходит за счет взаимодействия полей металлических наночастиц с оптическими центрами. Это явление может усиливаться в сотни раз [13].

Также отчетливо наблюдалось перераспределение интенсивностей в спектре люминесценции для различных концентраций AgNP в полимерной матрице ПВС и красителей по массе, что представлено на рисунках 9,10.

При определенном соотношении краситель/AgNP молекулы красителя и наночастиц серебра оказываются на расстояниях, оптимальных для процессов обмена энергиями и усиления флуоресценции.

Нами было зафиксировано различное влияние на люминесценцию эритрозина при добавлении разной концентрации наночастиц серебра в полимерной матрице ПВС, что отражено на рисунке 11.

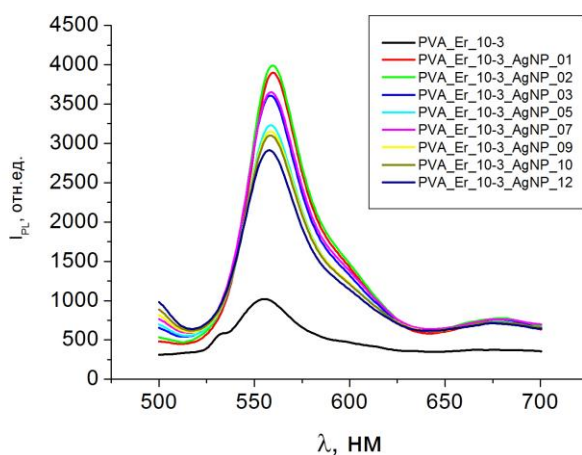


Рисунок 11 - Спектры люминесценции эритрозина в полимерной матрице ПВС с добавлением различных концентраций AgNP

При исследовании обнаружено как усиление, так и ослабление спектральных характеристик молекул красителей эритрозина в матрице поливинилового спирта в присутствии наночастиц AgNP.

Различные концентрации наночастиц серебра могут как усиливать свечение красителей в полимерной матрице, окрашенной эритрозином, так и тушить люминесценцию при возбуждении на длине волны 405 нм.

Проведенное исследование спектральных характеристик влияния наночастиц серебра на процессы оптического возбуждения-деактивации молекул органических красителей в кислородонепроницаемой полимерной матрице (поливинилового спирта) дало следующие результаты: в определенном концентрационном диапазоне наночастиц металла в полимерной пленке наблюдается увеличение поглощения пленки, что связано с появлением новых каналов релаксации

энергии электронного возбуждения в системе. интегральная светимость в полосе люминесценции пропорциональна квантовому выходу молекул красителя. Это позволяет сделать вывод, что квантовый выход фосфоресценции заметно менее чувствителен к изменению концентрации наночастиц металла. Объяснить наблюдаемые зависимости можно, исходя из следующих предположений. Усиление люминесценции при малых концентрациях наночастиц связано с увеличением дипольного момента оператора перехода для пары НЧ/молекула красителя по сравнению с одиночной молекулой. Это же предположение мы делали на основании анализа спектров поглощения. При увеличении концентрации наночастиц в пленке большее влияние оказывает процесс тушения энергии электронного возбуждения молекул красителя наночастицами металла за счет возбуждения в наночастицах поверхностных плазмонов, что подтверждается и исследованиями других научных групп. Изменение концентрации наночастиц как в сторону уменьшения, так и в сторону увеличения сопровождается усилением тушения люминесценции красителя.

Список литературы

1. Hua X.M., Gersten J.I., Nitzan A. Theory of energy transfer between molecules near solid state particles // J. Chem Phys. 1985. – V. 83, N 7. – P. 3650–3659.
2. Craighead H.G., Glass A.M. Optical absorption of small metal particles with absorbed dye coats // Opt. Lett. 1981. – V. 6(5). – P. 248–250.
3. Брюханов В.В, Слежкин В.А., Тихомирова Н.С, Горлов Р.В. Плазмонное усиление флуоресценции органолюминофоров в полимере и на поверхности кремнезем // Вестник Балтийского федерального университета им. И. Канта. 2012. – №4 – С. 54-59.
4. Муха Ю.П., Еременко А.М., Смирнова Н.П. и др. Усиление поглощения и флуоресценции молекул родамина 6Ж вблизи наночастиц золота в матрице SiO₂ // Химия, физика и технология поверхности. 2011. – Т. 2, № 3 – С. 284-288.
5. Муха Ю.П., Еременко А.М., Смирнова Н.П. и др. Влияние наночастиц золота в матрице SiO₂ на спектральные свойства и фотохимию адсорбированных молекул Родамина 6Ж и провитамина D // Наносистемы, наноматериалы, нано-технологии. 2010. – Т. 8, № 4 – С. 813–828.
6. Кузьмина Л.Н. Получение наночастиц серебра методом химического восстановления / Л.Н.Кузьмина, Н.С.Звиденцова, Л.В Колесников // Журнал Российского химического общества им. Д.И. Менделеева. 2007. – Т. XXX, – № 8. – С.7-12.
7. Solomon S.D. et al. Synthesis and Study of Silver Nanoparticles // Journal of Chemical Education. 2007. – Vol. 84. – № 2. – P. 322-324.
8. Guzman M.G. et al. Synthesis of silver nanoparticles by chemical reduction method and their antibacterial activity // PWASET. 2008. – Vol. 33. – P. 367.
9. Mozhgan Bahadory Synthesis of noble metal nanoparticles // dissertation for the degree of Doctor of Philosophy, Drexel University, Philadelphia. 2008. – P. 184

10. Jian Zhang, Yi Fu, Lakowicz J.R. Enhanced Förster Resonance Energy Transfer (FRET) on Single Metal Particle // J. Phys. Chem. C. Nanomater. Interfaces. 2007. – Vol. 111. – № 1. – P. 50–56.
11. Кислов Д.А., Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Ускоренный режим безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения между молекулами вблизи проводящих тел // Вестник ОГУ. 2011. – Т. 123, -№ 4, - С. 128 – 135.
12. P.G. Nicholson, V. Ruiz, J.V. Macpherson, P.R. // Inorganic Chemistry Communications. 2005. – №8. – P. 1052.
13. Heng-yong Weia, Jian Lina, Zhao-bin Fenga, Dong-wei Li, Yan Maa, Wen-hai Huang, Materials Science and Engineering, 172. 2010. –P. 321–326.
14. Stepanov A.L. Optical extinction of metal nanoparticles synthesised in polymer by ion implantation // Metal-polymer nanocomposites. Eds. Nicolaic L., Carotenuto G., Hoboken: John Wiley, 2005. 300 p.
15. Pinchuk A., Kreibig U., Hilger, A. Optical properties of metallic nanoparticles: influence of interface effects and interband transitions // Surf. Sci. 2004. V.557. P.269-280.
16. А.Д.Помогайло, А.С.Розенберг, И.Е.Уфлянд. Наночастицы металлов в полимерах. Химия, Москва, 2000.

ПРОБЛЕМЫ В ОБЛАСТИ ЭНДОПРОТЕЗИРОВАНИЯ МЕЖФАЛАНГОВЫХ СУСТАВОВ

**Дудко А.В., канд. пед. наук, доцент,
Драгун К.А., Трекилова А.П., Абубакирова А.Р.,
Ибатова Р.И., Пихуля Т.Н., Дудко Е.А.**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Государственный университет управления»**

Кисть человека – орган сложного анатомического строения, тонкой физиологической функции, совершенных координированных движений. «При отсутствии иных свидетельств, один только большой палец убедил бы меня в существовании Бога» (Исаак Ньютон, цит. по James Le Fanu, 2003). Это орган труда, самообслуживания, осязания. По выражению Каплана Е.В. рука является продолжением нашего мозга в окружающей среде. Однако, будучи одной из наиболее функционально нагруженных систем, кисть и составляющие ее костные сегменты повреждаются достаточно часто.

Травмы кисти могут быть различными, как по месту локализации, так и по характеру повреждения. Они возникают в быту, во время занятий спортом и профессиональной деятельности. Травмы, кисти руки могут приводить к структурным изменениям тканей, вплоть до растяжения связок и переломов.

Открытые повреждения кисти, по данным различных авторов, занимающихся восстановительной хирургией кисти, составляют 30-70% всех открытых травм опорно-двигательного аппарата, причём частота повреждений не имеет тенденции к снижению. Во всех промышленно развитых регионах мира тяжёлые травмы кисти, приводящие к потере жизнеспособности пальцев или более крупных сегментов, составляют от 25 до 60% всех производственных травм. Бытовой травматизм достигает 25-30%. 50% травм приходится на наиболее трудоспособный возраст.

Вопросы лечения тяжелых сочетанных травм являются одним из основных приоритетов в развитии современного здравоохранения. Характерной чертой последних десятилетий явилось изменение структуры травматизма за счет возрастания тяжести повреждений и увеличения доли сочетанных и множественных травм, частота которых достигает 55-80 %, что обуславливает высокую летальность и инвалидизацию лиц молодого трудоспособного возраста.

Частота повреждений кисти у пострадавших с множественной и сочетанной травмы достигает 25 %. Повреждения кисти в составе политравмы, как правило, характеризуются тяжелой травмой мягких тканей и множественными переломами костей, связаны с высокой энергией травмирующего агента при дорожно-транспортных происшествиях или при кататравме. Этим повреждениям часто не уделяют должного внимания на этапах оказания экстренной помощи. Диагностика открытых повреждений обычно не представляет сложности, тогда как закрытые часто диагностируются несвоевременно, что ве-

дет к трудностям в лечении и последующей реабилитации. У пострадавших с политравмой на первый план выходит лечение жизнеугрожающих повреждений, в то время как лечение «малых переломов» осуществляется в последнюю очередь. Поздняя диагностика и несвоевременное начало лечения впоследствии могут привести к утрате функции кисти. Цель обобщить данные об особенностях повреждений кисти у пострадавших с политравмой. Материалы и методы. Диагностика травм кисти у пострадавших с политравмой должна быть максимально ранней и полной. Необходим тщательный осмотр таких пациентов при поступлении, контрольный осмотр через 24 часа на предмет выявления пропущенных повреждений.

Значительную группу повреждений кисти (до 18%) составляют тяжёлые травмы [4]. Такие повреждения характеризуются обширной зоной разможения мягких тканей, множественными оскольчатыми переломами с нарушением целостности сосудов, нервов и сухожилий, а также дефектами покровных тканей и скелета.

По данным многих авторов, удельный вес травм кисти и пальцев среди повреждений опорно-двигательной системы составляет от 19,1 до 46,6%, инвалидность – 13-30%.

Основными причинами, приводящими к нарушению функции пальцев кисти, являются: неправильно сросшиеся и несросшиеся внутрисуставные переломы, внутрисуставные переломы фаланг и пястных костей с дефектом суставных поверхностей; анкилозы и контрактуры суставов в функционально невыгодном положении [5].

В общей структуре переломов костей кисти на кости запястья приходится 9%, на переломы пястных костей значение доходит до 35%, а переломов фаланг пальцев кисти – 15-20%. В 23% отмечаются множественные переломы костей кисти вместе с повреждениями сухожилий, нервов, связочного аппарата и других анатомических структур.

Пострадавшие после тяжелых травм кисти ограничены в выборе профессии и нередко становятся инвалидами. Инвалидность при повреждениях этой зоны стабильно удерживается на первых позициях среди всей патологии скелета и достигает 13-30% среди всех освидетельствованных.

Ортопедическая коррекция, которая используется в некоторых случаях после получения травмы, призвана избавить от боли, устранить деформацию и улучшить тонус капсульно-связочного аппарата, позволив избежать импиджмент-конфликта. В арсенале ортопедической коррекции имеются артропластика, корригирующая остеотомия, тендопластика, пластика связок, синовэктомия, а также эндопротезирование суставов.

Синовэктомия, тендопластика и пластика капсуло-связочного аппарата могут являться подготовительным этапом ортопедической коррекции утраченной функции сустава, так как артропластика не всегда обеспечивает подвижность и стабильность сустава. Корригирующие остеотомии исправляют ось сегмента с возможной коррекцией положения суставной поверхности. На данный момент одним из перспективных методов ортопедической коррекции, поз-

воляющих стабилизировать сустав при сохранении мобильности, является эндопротезирование. Искусственные суставные поверхности позволяют скомпенсировать объем движений, нормализовать связочный баланс, исправить ось луча, что благоприятно влияет на тонус мышц. Пациенты, которым выполнено тотальное эндопротезирование суставов кисти получают возможность выполнять мелкую моторику, обслуживать себя в быту, сохранить трудоспособность кисти.

Всем пациентам делают рентгенограммы суставов обеих кистей в прямой и боковой проекциях. При необходимости – томографические, денситометрические, ультразвуковые исследования для определения качества кости и состояния капсульно-связочного аппарата, определение дефекта костной ткани.

При серьезном нарушении функций сустава (до развития значительных деформаций, нестабильности сустава, контрактур и мышечной атрофии), с выраженным болевым синдромом, не поддающимся консервативному лечению, чаще показано именно эндопротезирование суставов.

Эндопротезирование суставов — это операция по замене компонентов сустава имплантатами, которые имеют анатомическую форму здорового сустава и позволяют выполнять весь объём движений. Показанием для данной процедуры является техническая невозможность или неэффективность других восстановительных операций (в том числе с использованием аутопластики или аллопластики).

Эндопротезирование мелких суставов необходимо для возвращения функциональности пораженных суставов и устранения болевых ощущений. Накануне эндопротезирования состояние здоровья пациента должно быть стабилизировано. Внутренние инфекции, вирусы и хронические болезни в период обострения являются противопоказаниями к проведению операции.

За последние 30 лет использовано более 40 различных материалов (керамика, металлы, полимеры и др.) для лечения, восстановления и замены более 40 различных частей человеческого тела, включая суставы нижних и верхних конечностей.

Материалы, из которых изготавливают современные эндопротезы, должны обладать следующими свойствами:

- 1) Химическими, то есть должны отсутствовать нежелательные химические реакции с тканями и межтканевыми жидкостями, отсутствие коррозии;
- 2) Механическими, это прочность, сопротивление замедленному разрушению, износостойкость;
- 3) Биологическими, отсутствием реакции со стороны иммунной системы, срастание с костной тканью, стимулирование остеосинтеза [1].

Связанные эндопротезы представляют собой комплекс в виде жесткого шарнира, обеспечивающего движения в суставе наряду с боковой стабильностью. Преимуществом данного типа эндопротеза является возможность эндопротезирования при повреждениях коллатеральных связок. Недостатками – отсутствие амортизации, направление срезающих сил, ограничение в функции сустава. Силиконовые спейсеры обеспечивают поддерживающую функцию, увеличива-

ющую диастаз между торцевыми поверхностями смежных сегментов. Функциональная стабильность достигается относительным сохранением капсульно-связочного аппарата. Несвязанные эндопротезы замещают только суставные поверхности при условии сохранения связок, обеспечивают хорошую подвижность, способны выдерживать достаточные нагрузки. Применяются в случае сохранности связок и при хорошем качестве костной ткани. Для крепления к кости связок и сухожилий используют современные якорные фиксаторы, позволяющие выполнять внутрикостный шов без необходимости освобождения большой площади костной ткани и сокращающие время оперативного вмешательства.

Заболевания, вызывающие нарушения функций суставов кисти и имеющие показания к эндопротезированию:

- идиопатические и посттравматические артрозы;
- посттравматические дефекты суставов пальцев кисти;
- неправильное положение (например, при артрозах, вследствие травмы, неправильных нагрузок и т.д.);
- начальные стадии ревматоидного артрита и псориаза;
- онкологические образования костей, требующие удаления обширных участков кости;
- дегенеративные и постинфекционные артрозы;
- костный анкилоз;
- врожденная костная патология суставов.

Противопоказания к операции по эндопротезированию кисти руки:

- системные или местные заболевания в стадии обострения;
- остеопороз;
- атрофия мышц пораженного пальца;
- открытые зоны роста кости.

При эндопротезировании нескольких суставов на одном луче оперативные вмешательства желательно проводить в несколько этапов, придерживаясь общих ортопедических правил.

Необходимое условие успешного эндопротезирования при посттравматических деформациях - последовательное восстановление всех поврежденных структур. В случае выраженных рубцовых изменений кожных покровов, на первом этапе проводят их полноценное восстановление одним из методов кожной пластики. При наличии вывиха, девиации проводится коррекция элементов костного остова с помощью аппарата внешней фиксации, позволяющего восстановить правильные анатомические взаимоотношения, сохранить и полноценно использовать сохранившиеся костные фрагменты и создать запас мягких тканей в области поврежденного сустава.

Для восстановления функции суставов пальцев при посттравматических деформациях проводится двухэтапное эндопротезирование. Первый этап - восстановление нормальной длины пальца, устранение имеющегося вывиха или подвывиха с помощью аппарата внешней фиксации. Второй этап - эндопротезирование. Делают волнообразный или дугообразный разрез по тыльно-

боковой поверхности сустава. Производят продольный разрез капсулы сустава. Распатором поднадкостнично выделяют концы сочленяющихся фаланг или фаланги и пястной кости. Резецируют головку проксимальной и основание средней фаланг в случае эндопротезирования проксимального межфалангового сустава или головку пястной кости и основание основной фаланги - в случае эндопротезирования пястно-фалангового сустава. Внедряют эндопротез в расширенные костномозговые каналы.

При эндопротезировании нескольких пястно-фаланговых суставов желательно использовать один хирургический доступ – линейный поперечный кожный разрез. Он является оптимальным из-за большей доступности к суставам, меньшей травматизации мягких тканей, постоперационному косметическому эффекту.

Как показывает практика, эндопротезирование суставов кисти при их стойкой деформации, а также у взрослых пациентов с различными травмами кисти является оптимальным решением и наиболее частым выбором.

Наиболее распространены бесшарнирные и шарнирные конструкции эндопротезов. Однако, движение ножки бесшарнирного эндопротеза в костномозговом канале в отдаленных периодах приводит к эрозии, лизису костной массы в 46-57% - к дестабилизации протеза. А шарнирные типы протезов не соответствуют геометрическим и биомеханическим особенностям пястно-фаланговых суставов [2]. При движении протеза на уровне сустава ткани постоянно травмируются, что приводит к некрозу кожных покровов.

Кроме того, имеется силиконовый имплант, предложенный ГУ Институтом ревматологии РАМН ММА им. Сеченова. Данный имплант используют для лечения ульнарной девиации при ревматоидном артрите. Получены результаты эндопротезирования таким имплантом: устранение дефицита разгибания. Из осложнений отмечено: вывих импланта, перлом импланта [3]. При этом обнаружить перелом силиконового импланта на рентген снимках не удастся. Также существует проблема неподходящего размера импланта. Ведь размеры кисти у каждого человека индивидуальны.

В РНИИТО имени Р.Р. Вредена прооперировано 24 больных с ревматоидным поражением пястно-фаланговых суставов (ПФС). Выполнено 37 операций и было установлено 129 протезов трех типов. В группу 1 вошли пациенты, которым установили 43 силиконовых протеза NeuFlex «DePuy» на 12 кистях. В группу 2 вошли 6 больных с установленными 26 протезами связанного типа Daphne «Tescres SP A» на 7 кистях. В группе 3 оказались пациенты, которым имплантировали 60 эндопротезов связанного типа RM Finger «Mathys AG Bettlach» на 17 кистях. Критериями оценки эффективности лечения были показатели функционального состояния кисти, а также осложнения, возникшие после эндопротезирования и рецидивы деформации. Данные фиксировались за 1-2 дня до операции и через 12 месяцев после операции.

В 1 и 2 группах осложнения возникли в 50% случаев: перелом ножек эндопротеза, вывихи конструкций, рецидив ульнарной девиации пальцев. У боль-

ных группы 3 осложнений выявлено меньше. Сила кисти увеличилась во всех группах наблюдений, как один из плюсов.

При невозможности исключить избыточную нагрузку на сустав после хирургического лечения следует отказаться от установки протеза. Результаты эндопротезирования могут не соответствовать ожиданиям пациентов, а также ухудшаться со временем. Проблема обеспечения безопасности пациента во время и после оперативного вмешательства – фундаментальное направление современной анестезиологии и реаниматологии. Учитывая, что больные бывают возрастные, с сопутствующей сердечно-сосудистой патологией, адекватное лечение болевого синдрома и торможение симпатической активности в интра- и послеоперационном периоде являются важными факторами профилактики кардиальных осложнений.

Очень важно постепенно и дозированно давать нагрузку на прооперированный сустав и возвращать ему подвижность. В противном случае возможна контрактура, из-за которой движения будут затруднены, а реабилитация продлится дольше. Поэтому пациенты должны следовать всем рекомендациям и выполнять прописанные упражнения в полном объеме. В первую неделю после операции идет адаптация протеза, нормализация кровотока, разогревание мышц и связок. Во вторую – разработка мышц, привыкание к имплантату. Далее и до конца 3-го месяца развивается функциональность протеза, а к концу 6-го конечности возвращается полная подвижность.

Таким образом, мы можем определить острую проблему в эндопротезировании межфаланговых суставов. Существующие виды протезов на данный момент не полностью удовлетворяют потребности пациентов и не оказывают 100% положительный эффект от их применения в современной реконструктивной хирургии. Следовательно, мы решили выяснить, как можно решить эту проблему в рамках современных технологий.

В качестве решения этой проблемы мы бы хотели предложить разработку приложения, которое может определять индивидуальный размер протеза по снимкам или замерам кисти человека. После определения размеров необходимого импланта, создается 3D-модель протеза и печатается с помощью биочернил на 3D-принтере.

Список литературы

1. Белоусов, А.Е. Пластическая реконструктивная и эстетическая хирургия /А.Е. Белоусов. - СПб: Гиппократ, 1998. - 670 с.
2. Коломацкий, В.В. Эндопротезирование пястно-фаланговых суставов у пациентов с ревматоидным артритом. Научно-практическая ревматология [Электронный ресурс] / В.В. Коломацкий, Б.А. Асин, С.А. Макаров, и др. — Электрон. журн. — Москва: 2006. — Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/14421482>, свободный
3. Каратеев, Д.Е. Ревматоидная кисть /Д.Е. Каратеев; Оформление серии И. Голыженкова Рисунки Н. Якунина. — Москва: 2014. — 79с.

4. Насонов Е.Л., Олюнин Ю.А., Лиля А.М. Ревматоидный артрит: проблемы ремиссии и резистентности к терапии. *Научно-практическая ревматология*. 2018;56(3):263-271. <https://doi.org/10.14412/1995-4484-2018-263-271>

5. Скогорева, Н.В. ПАТОФИЗИОЛОГИЧЕСКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РЕВМАТОИДНОГО АРТРИТА: ЭТИОЛОГИЯ, ПАТОГЕНЕЗ И ПРИНЦИПЫ ЛЕЧЕНИЯ [Электронный ресурс] / Н.В. Скогорева, А.В. Макеева. — Электрон. журн. — Воронеж: Международный студенческий научный вестник, 2015. — Режим доступа: <https://eduherald.ru/ru/article/view?id=12218>, свободный. — Электрон. версия печ. публикации

3D ПЕЧАТЬ МОДЕЛЕЙ МЕЖФАЛАНГОВЫХ СУСТАВОВ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ТОМОГРАФИИ КИСТИ

**Дудко А.В., канд. пед. наук, доцент,
Ибатова Р.И., Трекилова А.П., Абубакирова А.Р., Драгун К.А.,
Димитрюк Р.М., Пихуля Т.Н.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

В статье рассматривается возможность использования технологии 3D моделирования межфаланговых суставов на основе компьютерной томографии, которая является актуальной. Так как визуализация суставов поможет упростить работу хирурга и сократить время операции.

Обработав информацию с сайтов Scopus, Web of Knowledge и PubMed по запросу использование 3D печати для визуализации с помощью КТ, мы выяснили, что развитие этой области стремительно набирает популярность, а также используется в клинической практике. Улучшение технологий печати на 3D принтере в последние годы, дает возможность воспроизводить сложные физические модели, основанные на данных набора объемных изображений компьютерной томографии.

Рассмотрим последние случаи использования 3D моделирования для планирования операций, помогающие хирургу в предоперационной диагностике и в хирургическом моделировании.

Сотрудники Московского государственного медицинского университета им. И.М. Сеченова [3] занимались разработкой трехмерной модели для планирования ревизионного эндопротезирования тазобедренного сустава со сложными Вертлужными дефектами. Они использовали 3D-принтер и цифровые 3D-модели, основанные на данных компьютерной томографии для печати трехмерных моделей. Для того чтобы подобрать нужную модель для восстановления вертлужной впадины, они использовали КТ изображения разрушенной части. На основе изображений были напечатаны 3D модели данной кости, после чего подобрали индивидуальный имплант, который восстановил вертлужную впадину. Это значительно облегчает не только работу хирурга, но период лечения и реабилитации пациента.

Проанализировав их работу, мы понимаем, что данная технология возможна для применения в практической медицине. Это доказывается приведенными в работе рентгеновскими снимками с реконструированными частями тазобедренного сустава, что подтверждает использования 3D печати для моделирования.

Использованием трехмерной модели так же занимается отделение эндодонтии в Токийском стоматологическом колледже [1]. В своих исследованиях с помощью недорогого настольного 3D принтера изготовили многочисленные

модели зубочелюстной кости для предоперационной диагностики и хирургического моделирования аутотрансплантантов. Исследователи отмечают, что компьютерно-томографические изображения и 3D модели на их основе были чрезвычайно полезны для получения представления о анатомических структурах челюсти. Это свидетельствует о полезности данного метода.

Научный коллектив на базе Бристольской Медицинской школы (Бристоль, Великобритания) и Национального Института Сердца (Гиза, Египет) [2] занимаются оценкой и изучением возможностей, использования моделей трехмерной печати коронарных артерий на основе данных КТ сердца. Они создали наборы различных аномалий коронарных артерий напечатанных на настольном 3D принтере Formlabs, с использованием белой смолы. Ученные показали напечатанные модели группе специалистов по сердечно-сосудистой системе, которые были восторженны результатом с точки зрения ясности моделей, их полезности и актуальности в ближайшем будущем.

Вывод данных исследований заключается в том, что 3D печатные модели сердца могут быть практически использованы для воссоздания анатомии коронарных артерий и улучшения понимания коронарных аномалий.

Сделав библиометрический анализ литературы, мы понимаем, что методика 3D печати модели межфаланговых суставов на основе компьютерной томографии возможна для реализации.

Из статистических данных [4] мы выяснили, что высока степень травматизма верхних конечностей и важность этой проблемы обусловлена, увеличением частоты встречаемости таких травм, особенно среди трудоспособной части населения. Согласно имеющимся статистическим данным о распространении данной патологии, среди травм опорно-двигательного аппарата повреждения кисти составляют 40%, а случаи потери трудоспособности по этой причине достигают 30% от общего количества нетрудоспособных. На долю тяжелых повреждений кисти приходится до 19% от всех повреждений опорно-двигательного аппарата. Поражение межфаланговых суставов в 100% случаев постепенно нарушает функции кисти и за частую приводит к деформациям в межфаланговых суставах.

В 2015 году вследствие травм верхней конечности был потерян приблизительно один миллион рабочих дней. В том же году было выплачено около 60—70 миллионов форинтов по больничным листам, на расходы больниц, на медикаменты, а также пенсионерам и инвалидам. Сравнительные данные Хенцла, относящиеся к травматизму в различных отраслях промышленности, показывают, что повреждения верхней конечности в любой отрасли промышленности преобладают над повреждением других частей тела (голова, туловище, нижние конечности).



Рисунок – 1 Сравнительные данные Хенцла

Локализация повреждений по пальцам показана на таблице 1 (данные приведены за два года).

Таблица 1 – Данные повреждений по пальцам

Кисть	Тыльная сторона ладони	1 палец	2 палец	3 палец	4 палец	5 палец
Левая	286	202	217	149	101	92
Правая	157	129	224	150	102	128

Социально-экономические потери общества от травм кисти велики, что в значительной мере связано как с последствиями тяжелых травм, так и неправильно и несвоевременно оказанной медицинской помощью.

Чтобы решить данную проблему существует методика эндопротезирования, которая отлично восстанавливает поврежденные структуры. Однако проблема данного метода заключается в том, что не всем суставам подбирают индивидуальную модель. Например, подбор размера эндопротеза межфалангового сустава происходит непосредственно во время операции путем «подгона» здоровой фаланги под шаблонную модель, которая подбирается из уже существующих образцов.

Для того чтобы решить данную проблему и учесть все физиологические особенности пациента, мы предлагаем способ моделирования межфаланговых суставов с помощью печати 3D моделей, созданных на основе набора объемных изображений данных компьютерной томографии.

Есть несколько программ перевода снимков МРТ или КТ в 3D модель. Для создания трехмерной модели из снимков формата «dcm» мы используем InVesalius [5]. Данная программа не только удобна и проста в применении, также доступна для большинства платформ: Windows, Mac OS и т.п. Программа находится в открытом доступе.

Рассмотрим эту технологию на примере исследования КТ позвоночника.

Загружаем в программу запись результатов КТ исследования. (Рисунок 1)

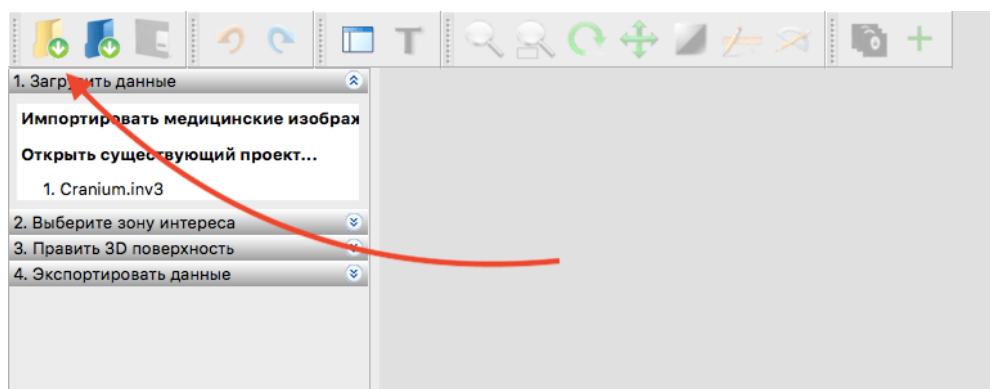


Рисунок 1 – Загрузка данных КТ исследования

В настройках выбираем необходимую область, которую мы хотим переместить в 3D модель. (Рисунок 2)

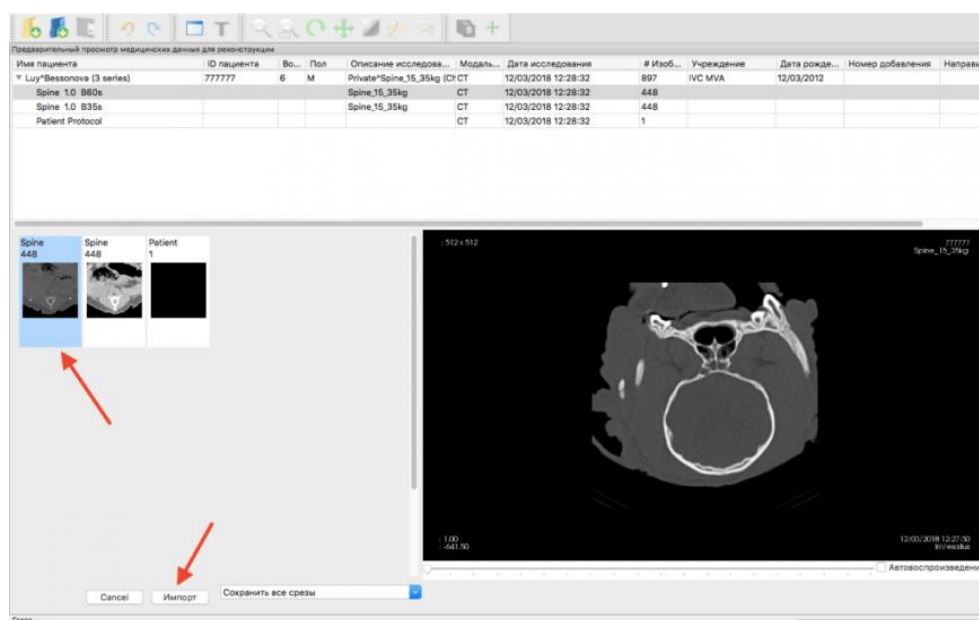


Рисунок 2 – Область для 3D моделирования

Создаем поверхность для каркаса нашей будущей модели и сохраняем файл в формате «STL». (Рисунок 3)

Электрон. журн. — Режим доступа: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov>, свободный.
— DOI: 10.2209/tdcpublication.2018-0058

2. Evaluating 3D-printed Models of Coronary Anomalies: A Survey Among Clinicians and Researchers at a University Hospital in the UK [Электронный ресурс] / Matthew Lee, Sarah Moharem-Elgamal, Rylan Beckingham, и др. — Электрон. журн. — Режим доступа: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/>, свободный.
— DOI: 10.1136/bmjopen-2018-025227

3. Кавалерский, Г.М. Трехмерные модели при планировании ревизионного эндопротезирования тазобедренного сустава со сложными Вертлужными дефектами [Электронный ресурс] / Г.М. Кавалерский, В.Ю. Мурылев, Я. Рукин, и др. — Электрон. журн. — Режим доступа: <https://cyberleninka.ru/article/n/17496878>, свободный. - DOI: 10.4103 / Орто.ИJOOrtho_556_16

4. Абакумова, М.М. Эпидемиология (распространенность) травм кисти [Электронный ресурс] / М.М. Абакумова, Л.Н. Анкина, О.В. Воскресенского, и др. — Электрон. текстовые дан. — Режим доступа: https://meduniver.com/Medical/travmi/epidemiologia_travm_kisti.html, свободный

5. Программа для моделирования InVesalius 3

ИНАКТИВАЦИЯ ПЛАНКТОННЫХ БАКТЕРИЙ *ESCHERICHIA COLI* И *BACILLUS SUBTILIS* УДАРНЫМИ АКУСТИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ

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

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Поиск эффективных способов воздействия на патогенные микроорганизмы становится все более актуальным, поскольку ежегодно увеличивается количество штаммов, резистентных к традиционным антимикробным препаратам [1-2]. Ситуация осложняется тем, что многие микроорганизмы образуют биопленки (БП), в которых повышается не только вирулентность микроорганизмов, но и их устойчивость к химическим и физическим воздействиям [3-5]. Пока окончательно неясно, как БП противостоят медикаментозному воздействию, поэтому требуются новые эффективно и быстро действующие способы инактивации патогенов, к которым они не смогут легко вырабатывать иммунитет [6].

Эффективный способ воздействия на живые микроорганизмы - фотодинамическая обработка [7-15]. Привлекательность такого способа поражения бактерий в том, что против него невозможно выработать иммунитет. Однако фотодинамическое действие применимо только для аэрированных периферийных слоев биотканей и БП, поскольку в глубокие слои тканей и БП практически не проникают сенсibilизаторы и возбуждающий свет.

Эти трудности можно преодолеть, если воздействовать на микроорганизмы ударными волнами. Такие волны возникают при быстром локальном нагреве среды. Локальный нагрев удобно производить короткими импульсами лазерного излучения с помощью термосенсibilизаторов (ТС). В качестве ТС можно использовать молекулы органических красителей. Основное требование к ТС – быстрое преобразование световой энергии в тепловую.

Чтобы в полной мере удовлетворить этому требованию, целесообразно проводить нагрев среды через высокие электронно-возбужденные состояния (ВЭВС) молекул красителей. Для этого возбуждение ТС необходимо производить короткими импульсами лазерного излучения высокой плотности мощности. При таком воздействии молекулы поглощают два (или более) кванта падающего излучения и ступенчато через реальные нижние электронно-возбужденные состояния переходят в ВЭВС [16-19]. Время жизни таких состояний, как правило, составляет единицы пикосекунд, а основной канал релаксации – безызлучательная внутренняя конверсия, приводящая к очень быстрой передаче тепла окружению [20-22]. Таким образом, при мощном импульсном

возбуждении молекулы красителей становятся эффективными фототермическими сенситизаторами.

Эксперимент

Для исследований использовались суточные агаровые (LB-агар, Sigma Aldrich, США) культуры клеток *Escherichia coli* (штамм K12TG1) и *Bacillus subtilis* (штамм 534). Перед облучением бактерии переносились в физиологический раствор (0,85% водный раствор NaCl). Плотность полученной суспензии стандартизировали фотометрически с помощью спектрофлуориметра CM2203 (SOLAR, Беларусь) на длине волны 620 нм. Для оценки выживаемости бактерий после облучения видимым светом в присутствии ФС применялся метод подсчёта колониеобразующих единиц (КОЕ). Количество КОЕ определялось через 16 часов роста на LB-агаре при температуре 37°C. КОЕ до облучения и добавления красителя составляло $(25.0 \pm 4.4) \cdot 10^6$ /мл для *E. coli* и $(21.0 \pm 2.3) \cdot 10^6$ /мл для *B. subtilis*.

В качестве ТС использовались органические красители—анионы эритрозин и эозин, а также краситель-катион родамин 6Ж. Молекулы красителей возбуждались излучением второй гармоники твердотельного лазера на YAG:Nd, работающего в импульсном режиме. Параметры возбуждения: длина волны $\lambda = 532$ нм, длительность импульсов 15 нс, плотность мощности P в пучке $(0.1 - 50)$ МВт/см². Энергия возбуждающих импульсов измерялась дозиметром Field Master (Coherent, USA). В контрольных экспериментах исследуемые растворы бактерий с красителями облучались импульсами с $P < 0.5$ МВт/см², а эквивалентность дозы облучения обеспечивалась соответствующим увеличением количества возбуждающих импульсов. Для фотоинактивации раствор с микроорганизмами помещался в прямоугольную кварцевую кювету сечением 5x10 мм и облучался через ее торцевую стенку.

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

Возникновение в среде ударных волн исследовали по кинетике пропускания и рассеяния света невозмущающего зондирующего луча растворами в присутствии ТС, после воздействия на них интенсивным возбуждающим светом. В качестве зондирующего луча использовали маломощный (менее 1 мВт) He-Ne лазер. Для формирования ударных волн с помощью цилиндрической линзы в кювете с исследуемым раствором создавалась узкая протяженная $(3.2 \times 0.5 \text{ мм}^2)$ зона возбуждения. Вдоль нее пропускался зондирующий луч He-Ne лазера диаметром 1 мм. Измерялось изменение во времени интенсивности рассеянного или прошедшего через раствор света.

Для измерения интенсивности рассеянного света прошедший через раствор луч блокировался непрозрачным экраном диаметром 3 мм в непосредственной близости от собирающей линзы. С помощью этой линзы возникающее после возбуждения среды рассеянное излучение фокусировалось на входной

щели монохроматора. При измерении пропускания раствором зондирующего луча собирающая линза и экран убирались, и луч сразу направлялся на входную щель монохроматора.

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

Результаты и их обсуждение

1. Генерация ударных акустических волн

Кинетика пропускания зондирующего луча физраствором, содержащим эритрозин концентрации 0.25 мМ, после импульсного возбуждения, представлена на рис. 1 (а, б). После окончания возбуждающего импульса ($P = 15 \text{ МВт/см}^2$) интенсивность прошедшего света уменьшается, что обусловлено рассеянием света на пузырьках пара, образовавшихся при испарении жидкости в зоне облучения. В диапазоне времени 0 - 5 мкс дополнительный вклад в уменьшение интенсивности света, проходящего через раствор, дает наведенное триплет-триплетное $T_1 \rightarrow T_m$ поглощение (рис. 1, а). Наведенное поглощение возникает из-за поглощения света возбужденными молекулами красителей и существует только в течение времени жизни триплетных T_1 состояний.

На рис. 1 (в) показана кинетика рассеяния зондирующего луча этим же физраствором после облучения при тех же параметрах импульса. Интенсивность сигнала в этом случае, наоборот, возрастает.

Если передвинуть кювету с раствором так, чтобы зондирующий луч сместился от зоны возбуждения примерно на 1-3 мм, где нет пузырьков пара, то в проходящем сигнале наблюдается только кратковременное уменьшение сигнала, обусловленное $T_1 \rightarrow T_m$ поглощением (рис. 1, б).

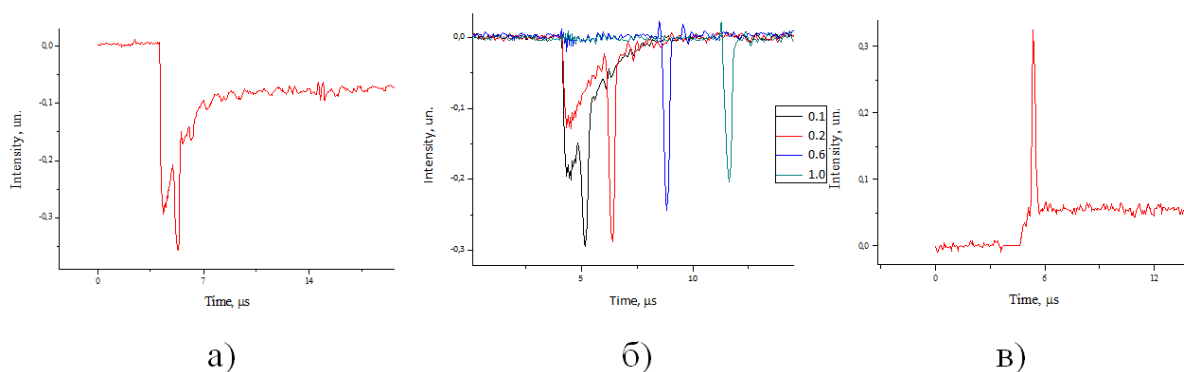


Рисунок 1 – Кинетика пропускания (а, б) и рассеяния (в) зондирующего света эритрозином (0.25 мМ) в физрастворе после возбуждения лазерным импульсом ($\lambda_{\text{возб}} = 532 \text{ нм}$, $\tau = 15 \text{ нс}$, $P = 15 \text{ МВт/см}^2$):

а), в) - зондирующий луч проходит на расстоянии 0.05 см от зоны возбуждения;

б) - зондирующий луч проходит на расстояниях 0.1, 0.3, 0.6 и 1.0 см от зоны возбуждения.

Резкий провал интенсивности прошедшего света на фоне кинетики пропускания (пики на рис. 1, а, б) и, наоборот, резкое возрастание сигнала на фоне кинетики рассеяния (пик на рис. 1, в), обусловлены преломлением зондирующего луча в момент прохождения ударной волны через зону зондирования в растворе.

Ударную волну удобно наблюдать и анализировать, если считать зондирующий луч на 5-10 мм от зоны возбуждения. При таком смещении в регистрируемых сигналах уже не наблюдаются ни рассеяние света пузырьками пара, ни $T_1 \rightarrow T_m$ поглощение, а также тепловые или фотохимические эффекты. Кинетические кривые пропускания зондирующего луча на расстояниях 6 и 10 мм от зоны возбуждения, показаны на рис. 1 (б).

По известному расстоянию и времени распространения волны определена ее скорость, которая при температуре 26⁰С оказалась равной 1505 м/с, что соответствует скорости распространения звука в воде при атмосферном давлении. Скорость распространения обнаруженных волн зависит от температуры раствора – при повышении температуры до 80⁰С скорость возростала до 1555 м/с, а при охлаждении раствора до 0⁰С уменьшалась до 1410 м/с.

Акустические волны возникают в результате теплового расширения среды после быстрого локального повышения температуры при безызлучательной релаксации возбужденных состояний ТС. Если температура среды превышает порог кипения, то имеет место испарение жидкости и ударные волны генерируются возникающими пузырьками пара. Поскольку и нагрев, и испарение происходят в результате превращения сенсбилизатором световой энергии в тепло, ударные волны образуются одновременно в процессах локального теплового расширения среды и формирования пузырьков пара. В работе [23] показано, что наиболее значительные повреждения в биологических системах происходят при облучении импульсами относительно высокой плотности энергии, когда становятся заметными процессы испарения жидкости.

Экспериментально установлено, что ударные волны эффективно генерируются в физрастворах с красителями, если плотность мощности возбуждающего излучения превышает 5 МВт/см². При таком возбуждении заселяются высокие электронно-возбужденные состояния (ВЭВС) молекул. Заселение ВЭВС молекул подтверждается зависимостью интенсивности фосфоресценции красителей от плотности мощности накачки.

При плотности мощности возбуждающего излучения $P < 5$ МВт/см², ударные волны в растворах с ксантоновыми красителями имеют очень низкую интенсивность и их экспериментальная регистрация затруднена. В растворах с родамином 6G при таких условиях акустические волны вообще не обнаружены. Если $P \geq 10$ МВт/см², акустические волны уверенно обнаруживаются как в растворах с ксантоновыми красителями, так и в растворах с родамином 6G. В отсутствие ТС в растворе, даже при плотности мощности возбуждающего света 40 МВт/см² ударные волны не обнаружены.

Мы использовали растворы красителей концентрациями $C = (0.01 - 0.5)$ мМ. Поскольку количество квантов возбуждающего излучения при

$P \geq 10 \text{ МВт/см}^2$ на несколько порядков больше, чем количество молекул красителей в единице облучаемого объема, то можно считать, что в зоне облучения возбуждались все молекулы ТС. Более того, каждая молекула ТС за время длительности возбуждающего импульса ($\tau = 15 \text{ нс}$) может неоднократно повторно поглотить возбуждающий квант, совершая переходы $S_1 \leftrightarrow S_n$ (а также $S_1 \rightarrow S_n \rightarrow T_m \rightarrow S_1$, или $T_1 \leftrightarrow T_m$, или $T_1 \rightarrow T_m \rightarrow S_1 \rightarrow T_1$), каждый из которых сопровождается выделением тепла. Поскольку в исследованных нами красителях сильно перекрываются полосы поглощения $S_0 \rightarrow S_1$, $S_1 \rightarrow S_n$ и $T_1 \rightarrow T_m$ [27], то при воздействии на вещество интенсивным излучением одновременно возбуждаются все перечисленные переходы.

У родамина 6G квантовый выход φ_T ИКК $S_1 \rightarrow T_1$ в триплетное состояние $\varphi_T \sim 0.01$, а квантовый выход $S_1 \rightarrow S_0$ флуоресценции $\varphi_{\text{фл}} \sim 0.99$, поэтому, при релаксации S_1 состояний молекул раствор не нагревается. Если $P \geq 5 \text{ МВт/см}^2$ процесс поглощения становится двухквантовым $S_0 \xrightarrow{h\nu} S_1 \xrightarrow{h\nu} S_n$ и эффективно заселяются высокие S_n состояния молекул [24-26]. При релаксации ВЭВС родамина 6G возникает локальный нагрев, образуются пузырьки пара и появляется рассеяние света.

2. Повреждение бактерий ударными волнами

Для оценки повреждения бактерий ударными волнами определялись КОЕ бактерий при различных режимах облучения. Отбор бактерий для определения КОЕ до и после возбуждения производили непосредственно в зоне облучения (где возможны повреждения микроорганизмов активными формами кислорода, в результате прямой гипертермии бактерий или переноса энергии с ВЭВС молекул красителей на молекулы мембран клеток), а также на расстояниях 0.6 и 1.0 см от зоны возбуждения. На таких расстояниях от зоны возбуждения не проявляются тепловые эффекты, нет фотодинамического действия и переноса энергии. Поэтому, если имеет место повреждение бактерий, то оно происходит исключительно под действием ударных волн, возникающих при быстром образовании и схлопывании пузырьков пара в зоне облучения.

На рис. 2 (а, б) показаны гистограммы изменения КОЕ клеток *Escherichia coli* и *Bacillus subtilis* в физрастворах с ксантоновыми красителями (0.25 мМ) до и после облучения импульсами ($\lambda = 532 \text{ нм}$) различной плотности мощности P в зависимости от расстояния до зоны возбуждения.

Видно, что непосредственно в зоне облучения повреждение бактерий *E. coli* происходит даже при относительно малых плотностях мощности возбуждающего излучения. По-видимому, это обусловлено фотодинамическим действием. Для гипертермии клеток и безызлучательного переноса энергии необходимо взаимодействие красителей со стенками бактерий или их проникновение внутрь клеток. Ксантоновые красители-анионы не взаимодействует с клетками *Escherichia coli*, стенки которых имеют отрицательный заряд [10]. На расстояниях 0.6 и 1.0 см от зоны возбуждения

повреждения клеток *E. coli* становятся заметными только при $P > 10$ МВт/см², когда возрастает эффективность генерации ударных волн.

Клетки *Bacillus subtilis* оказались более чувствительными к воздействию ударных волн. Их чувствительность даже к малым дозам облучения, вероятно, обусловлена взаимодействием эозина с бактериями.

Зависимость выживаемости бактерий от плотности мощности накачки при разной концентрации родамина 6G в растворе, на расстоянии 1.0 см от зоны возбуждения, представлена на рис. 3. Видно, что с ростом концентрации ТС эффективность повреждения микроорганизмов возрастает. Особенно заметными повреждения становятся при $P > 20$ МВт/см².

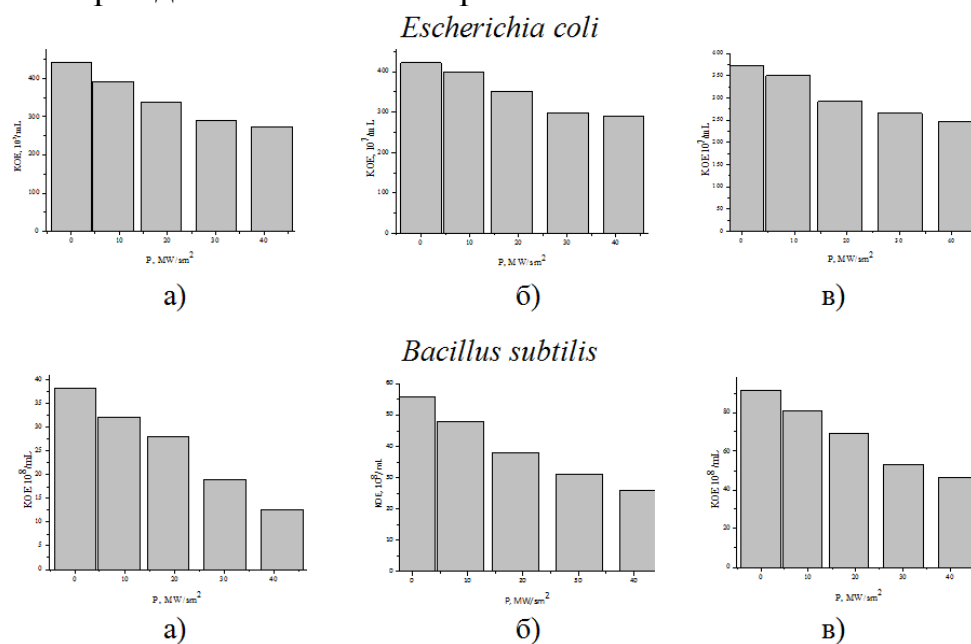


Рисунок 2 – Гистограммы изменения КОЕ клеток *E. coli* (с эритрозином) и *B. subtilis* (с эозином) в физрастворах до и после облучения импульсами различной плотности мощности P в зависимости от расстояния до зоны возбуждения: а) 0 см, б) 0.6 см, в) 1.0 см. Концентрация красителей - 0.25 мМ.

Возможно, с ростом концентрации красителя в растворе формируются кластеры, и сказывается как суперпозиция тепловых потоков от каждой молекулы внутри кластера, так и взаимное влияние разогретых кластеров друг на друга. Это повышает вероятность возникновения ударных волн и, соответственно, увеличивается эффективность повреждения бактерий.

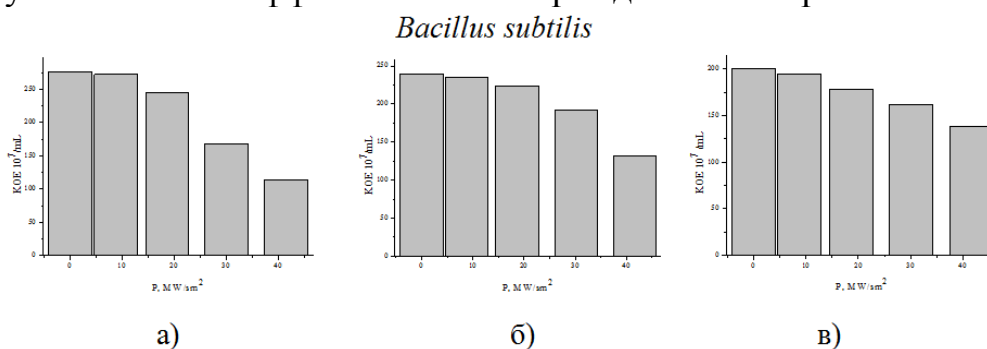


Рисунок 3 – Зависимость КОЕ *Bacillus subtilis* от плотности мощности накачки на расстоянии 1.0 см от зоны возбуждения при различной концентрации родамина 6G в физрастворе: а) 0.5 мМ, б) 0.25 мМ, в) 0.1 мМ.

Заключение

Ударные волны, возникающие при локальном нагреве среды эффективно повреждают бактерии. Это явление можно использовать для разработки практического способа борьбы с патогенными микроорганизмами. Такой способ воздействия на микроорганизмы особенно перспективен в средах, где традиционные способы – антибиотикотерапия или фотодинамическое воздействие на патогены малоэффективны из-за ограниченного проникновения препаратов и света.

Список литературы

1. O'Neill, J. Tackling a global health crisis: initial steps. The Review / J. O'Neill. Antimicrobial Resistance Chaired, 2015.
2. Arias C.A., Murray B.E. Antibiotic-resistant bugs in the 21 st century—A clinical super challenge / C.A. Arias, B.E. Murray // N. Engl. J. Med. – 2009. – V. 360. – P. 439–443.
3. Wilson, M. Lethal photosensitization of oral bacteria and its potential application in the photodynamic therapy of oral infections / M. Wilson // J Photochem Photobiol. – 2004. – V. 3. P. 412–8.
4. Donlan, R.M. Biofilms: microbial life on surfaces / R.M. Donlan // Emerg. Infect. Dis. – 2002. – V. 8. – P. 881–890.
5. Fux, C.A. et al. Survival strategies of infectious biofilms / C.A. Fux, J.W. Costerton, P.S. Stewart, P. Stoodley // Trends Microbiol. – 2005. – V. 13. – P. 34–40.
6. Taylor, P.W., Stapleton, P.D., Paul Luzio, J. New ways to treat bacterial infections / P.W. Taylor, P.D. Stapleton, J. Paul Luzio // Drug Discov Today. – 2002. – V. 7. – P. 1086–91.
7. Hamblin, M.R. Antimicrobial photodynamic inactivation: a bright new technique to kill resistant microbes / M.R. Hamblin // Curr. Opin. Microbiol. – 2016. – V. 33. – P. 67–73.
8. Huang, L., Dai, T., Hamblin, M.R. Antimicrobial photodynamic inactivation and photodynamic therapy for infections / L. Huang, T. Dai, M.R. Hamblin // Methods Mol. Biol. – 2010. – V. 635. – P. 155–73.
9. Kashef, N. et al. Advances in antimicrobial photodynamic inactivation at the nanoscale. Review article / N. Kashef et al. // Nanophotonics. – 2017. – V. 6(5). – P. 853-879.
10. Hamblin, M.R., Hasan, T. Photodynamic therapy: a new antimicrobial approach to infectious disease? / M.R. Hamblin, T. Hasan // Photochem. Photobiol. Sci. – 2004. – V.3 – P. 436–50.
11. Taraszkiewicz, A., Fila, G., Grinholc, M., Nakonieczna, J. Innovative strategies to overcome biofilm resistance / A. Taraszkiewicz, G. Fila, M. Grinholc, J. Nakonieczna // Int. J. Biomed. Res. (2013) (ID: 150653).

12. Vatansever, F. et al. Antimicrobial strategies centered around reactive oxygen species—bactericidal antibiotics photodynamic therapy, and beyond / F. Vatansever et al. // *FEMS Microbiol. Rev.* – 2013. – V. 37. – P. 955–989.
13. Letuta, S.N. et al. 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 // *J. Photochem. Photobiol. B: Biology.* – 2016. – V. 163. – P. 232–236.
14. Ishemgulov, A.T. et al. Long-Term Luminescence of Sensibilizers in Tissues at the Conditions of Oxygen Deficiency Due to Photodynamic Effect / A.T. Ishemgulov, S.N. Letuta, S.N. Pashkevich, E.K. Alidzhanov, Yu.D. Lantukh // *Optics and Spectroscopy.* – 2017. – V. 123. – P. 828–834.
15. Letuta, S.N., Letuta, U.G., Pashkevich, S.N. Inactivation of Bacteria during Stimulation of Sensitizers with High-Power Nanosecond Laser Pulses / S.N. Letuta, U.G. Letuta, S.N. Pashkevich // *Biophysics.* – 2019. – V. 64. – P. 576–582.
16. Летохов, В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах / В.С. Летохов – М.: Наука, 1983.
17. Nickel, B., Roden, G. Stepwise two-photon excitation of tetracene; fluorescence from upper excited singlet states / B. Nickel, G. Roden // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 1977. – V. 81. – P. 281-285.
18. Tobita, S. et al. Study of higher excited singlet states of zinc(II)-tetraphenylporphyrin / S. Tobita, Y. Kaisu, H. Kobayashi, I. Tanaka // *J. Chem. Phys.* – 1984. – V. 81. – P. 2962-2969.
19. Orner, G.C., Topp, M.R. Biphotonic laser excitation of upper singlet state fluorescence in organic dyes / G.C. Orner, M.R. Topp // *Chem. Phys. Lett.* – 1975. – V. 36. – P. 295-300.
20. Lin, H.B., Topp, M.R. Low quantum-yield molecular fluorescence. Aromatic hydrocarbons in solution at 300 K / H.B. Lin, M.R. Topp // *Chem. Phys. Lett.* – 1977. – V. 48. – P. 251-255.
21. В.Л. Ермолаев, В.А. Любимцев Квантовые выходы флуоресценции из каскадно заселяемых высоких синглетных возбужденных состояний молекул красителей / Ермолаев В.Л., Любимцев В.А. // *Опт. и спектр.* – 1984. – т. 56. – С. 1026-1032.
22. Nagaoka, C., et al. Fluorescence from an upper excited state of O-hydroxybenzaldehyde in the vapor phase / C. Nagaoka, M. Fujita, T. Takemura, H. Baba // *Chem. Phys. Lett.* – 1986. – V. 123. – P. 489-492.
23. Cleary, S.F. Laser Pulses and the Generation of Acoustic Transients in Biological Material // M. L. Wolbarsht (ed.), *Laser Applications in Medicine and Biology*, Plenum Press. – New York, 1977. – P. 175-219.
24. Рыльков, В.В., Чешев, Е.А. Интеркомбинационная конверсия из высоковозбужденных состояний. Родамин 6Ж / В.В. Рыльков, Е.А. Чешев // *ДАН СССР.* – 1985. – т. 281. – С. 648-653.
25. Рыльков, В.В., Чешев, Е.А. Интеркомбинационная конверсия из высоковозбужденных состояний ксантовых красителей. Интерпретация спектров и роль ионных пар / В.В. Рыльков, Е.А. Чешев // *Опт. и спектр.* – 1987. – т. 63. – С. 778-783.

26. Летута, С.Н. Триплет-синглетная интеркомбинационная конверсия в многоатомных молекулах / С.Н. Летута // Вестник ОГУ. – 2002. – № 5. – С. 88-92.

27. Rohatgi-Mukherjee, K.K., Mukhopadhyay, A.K. Photophysical processes in halofluorescein dyes / K.K. Rohatgi-Mukherjee, A.K. Mukhopadhyay // Indian J. of Pure and Applied Phys. – 1976. – V. 14. – P. 481-484.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ДЕРИВАТОГРАФИИ ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ НИРС

**Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Алпысбаева Г.Ж., Савинов В.В.**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Введение. Одним из самых распространенных физико-химических методов исследований кинетики термодеструкции твердых веществ в XXI веке является метод дериватографии [1]. Сущность исследований с применением дериватографии (*от лат. derivatus - отведенный, отклоненный и греч. grapho – пишу*) состоит в том, что в процессе непрерывного программируемого нагрева образца по кривым тепловыделения и изменения массы фиксируются происходящие в веществе изменения. Дериватография - метод исследования химических и физико-химических процессов, происходящих в веществе в условиях изменения температурного режима - позволяет проводить одновременно целый комплекс термических исследований, а благодаря автоматизации современных устройств сокращает продолжительность испытаний, исключает погрешности анализа и позволяет регистрировать процессы термических превращений вещества: изменение массы, тепловые эффекты реакций, скорости изменения массы и повышения температуры вещества.

Дериватография является комбинацией двух наиболее распространенных термографических методов: дифференциального термического анализа (ДТА) и термогравиметрического анализа (ТГА). В научной-исследовательской работе студенты использовали дериватограф «Thermoscan-2» для дифференциально-термического анализа (ДТА) и термогравиметрического анализа (ТГА), которые объединяют в одном приборе две системы: электронные термовесы для непрерывного взвешивания и дифференциальный термический анализатор. Прибор предназначен для определения температуры и оценки теплоты фазовых переходов, эндотермических и экзотермических процессов, а также для определения потери веса образца в процессе нагрева.

Устройство является универсальным и незаменимым при выполнении лабораторных и научно-исследовательских работ. Одновременная регистрация изменения массы образца и процессов, сопровождающихся выделением или поглощением тепла, позволяет существенно расширить возможности молодых исследователей: изучение процессов стеклования, кристаллизации, полиморфных переходов, плавления, испарения, разложения, для определения температуры воспламенения и теплоты горения [2], а также как подтверждающий метод ряда экспериментальных данных сторонних методов.

Управление прибором, температурным режимом, сбором данных и их обработкой осуществляли с помощью специальной программы “Thermoscan”, ко-

торая входила в комплект поставки вместе с программным продуктом, связанным с РС-совместимым компьютером через USB-интерфейс.

«Thermoscan-2» был приобретен на средства гранта № 19-43-560001 р_а «Физико-химические принципы процессов СВЧ-консолидации каолинитов» при финансовой поддержке РФФИ и правительства Оренбургской области в октябре 2019 года. Авторы статьи являются участниками этого проекта. Внешний вид прибора представлен на рисунке 1.

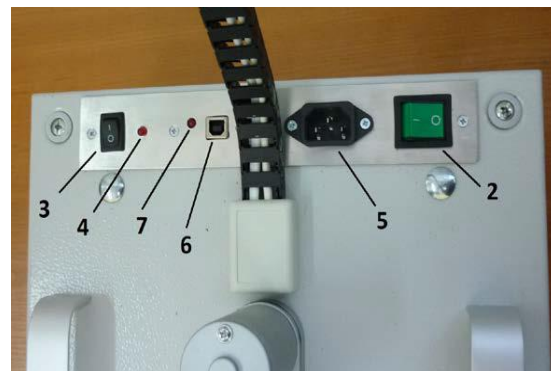


Рисунок 1 –Дериватограф «Thermoscan-2»: фронтальный вид (а), панель управления (б)

1 - Нагревательный элемент, 2 - Кнопка питания с индикатором питания, 3 - Тумблер перемещения нагревательного элемента, 4 - Индикатор обрыва регулирующей термопары, 5 – розетка для шнура питания, 6 - Порт для подключения кабеля USB, 7 – Индикатор передачи данных

На примере исследовании процесса термодеструкции природной кирпичной глины рассмотрен принцип работы дериватографа, заключающийся в изменении теплосодержания вещества при изменении температуры и регистрации на основе измерения разницы температур в исследуемом образце и в эталоне. В качестве эталона использовали вещества, с которыми в исследуемом интервале температур не происходит эндо- и экзотермических процессов. Наиболее часто используют прокаленный оксид алюминия.

Методика эксперимента. Объект исследования помещался в термокамеру вместе с эталоном, снабженную термопарами и высокоточными весами. Запуск прибора начинался с выбора шага нагрева и предела нагревания образца. После начала съемки на экране компьютера фиксировали дифференциальную кривую тепловых процессов в образце.

В стандартном варианте программы термограмма строилась в координатах «разница температур образца и эталона – температура эталона», в другом

варианте – в координатах «разница температур образца и эталона – температура образца».

Съемку термограммы проводили с выбором необходимой скорости нагрева (20 град./мин.) и предельной температуры нагрева (900 °C). После запуска анализа построили графики температурных зависимостей разницы температур образца и эталона и изменения веса образца (рис. 2). Дополнительно получили графики временных зависимостей температуры эталона и потери веса образца.

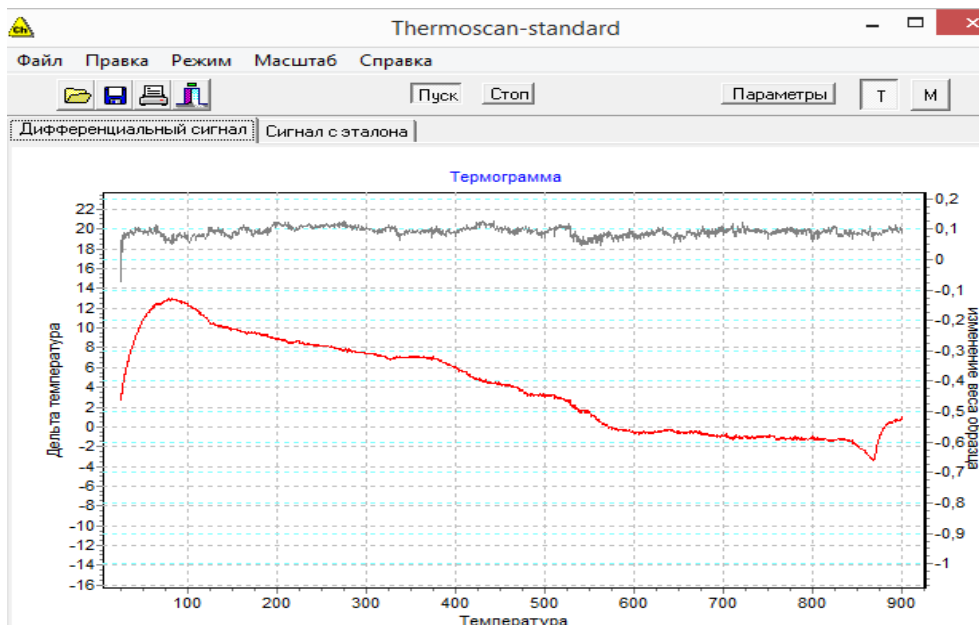


Рисунок 2 – Скриншот экрана с графиками температурных зависимостей массы и температуры образца

Объект исследования. Кирпичная глина является самой распространенной на территории Оренбургской области (около 40 % всех нерудных месторождений). Она содержит основной структурообразующий минерал каолинит в небольшом количестве [5]. Фазовый состав кирпичной глины авторы работы [5] оценили методом рентгенофазового анализа, результаты которого приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Фазовый состав природной кирпичной глины

Компонент	Объемная доля, %
β -кварц, SiO_2	61
кальцит, CaCO_3	17
каолинит, $\text{Al}_2[\text{OH}]_4\{\text{Si}_2\text{O}_5\}$	8
α - корунд, Al_2O_3	7

Результаты работы и их обсуждение. Дериватограмма кирпичной глины представлена на рисунке 3. Положительные эффекты на дифференциально-термической кривой свидетельствуют об экзотермии процесса и, вследствие

этого, увеличении его температуры в сравнении с эталонным образцом. «Провалы», или отрицательные эффекты, соответствуют эндотермическим процессам и, следовательно, понижением температуры образца в сравнении с эталонным [3]. При нагревании может происходить как уменьшение, так и увеличение веса материала. Потеря веса, как правило, обуславливается выделением из вещества газообразных продуктов в процессе окисления присутствующих органических веществ (CO_2 , SO_2 и т.п.), выход из образца различных форм воды (капиллярная, конституционная, кристаллизационная, цеолитная), а увеличение веса - поглощением веществом кислорода в процессе окисления, CO_2 в процессе рекарбонизации и т.п. Однако для большинства минералов увеличение веса при нагревании чрезвычайно мало и им пренебрегают. Потери же веса, наоборот, значительны, и именно на их определении основан данный метод анализа.

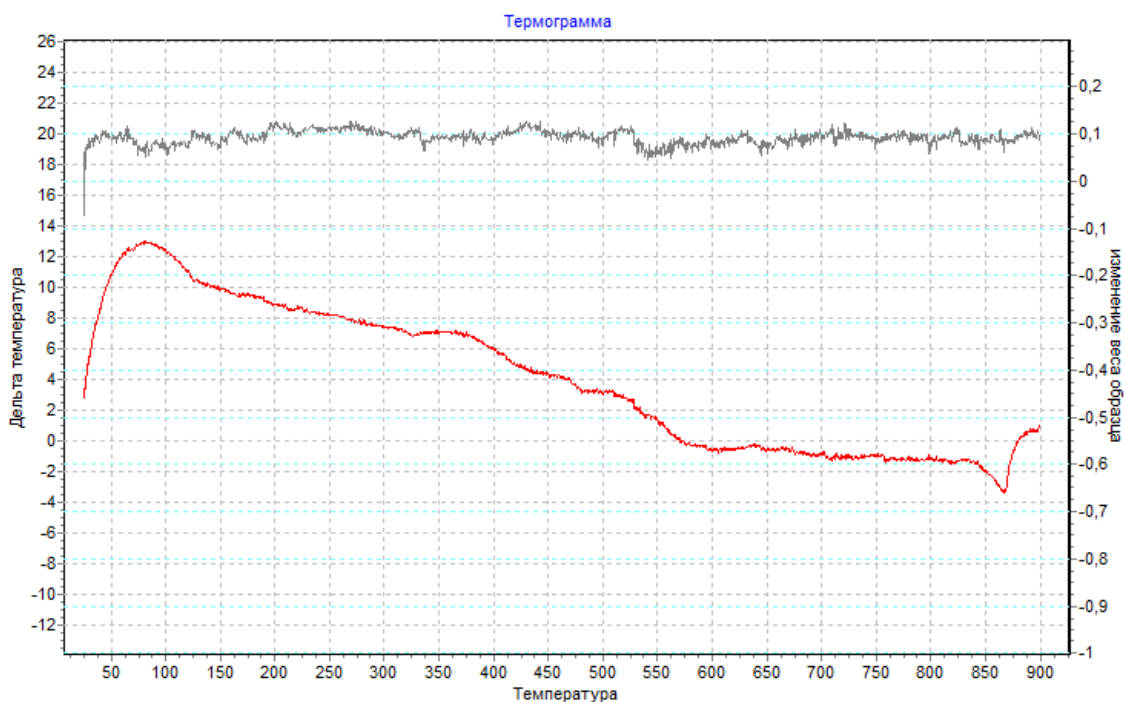


Рисунок 3 – Дериватограмма красной глины

Первый эндоэффект на кривой дифференциального термического анализа (ДТА) появился при температуре 123,9 °C (рис. 3), он соответствовал испарению из образца адсорбционной воды. При $T = 326,4$ °C отмечался другой отрицательный энергетический эффект, соответствовавший отщеплению и удалению из глины химически связанной (гидратной) воды. Об этом же свидетельствовала термогравиметрическая (ТГ) кривая потери веса. При этих же температурах происходило разрушение кристаллической решетки каолинита. В результате дегидратации каолинита образовался метакaoлинит $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$.

Размытый экзотермический эффект с максимумом при 371,6 °C соответствовал выгоранию природных органических примесей. В интервале температур от 371,6 до 579,1 °C произошло полиморфное превращение арагонита в кальцит.

В интервале температур 527...838,1 °С метакаолинит распадался на первичные оксиды с образованием γ -глинозема и кремнезема. В интервале температур 866,4...890,3 °С на диаграмме отмечался резкий экзотермический пик (экзоэффект), который был обусловлен кристаллизацией аморфных продуктов разложения глинистых минералов: γ -глинозем перекристаллизовался в α -глинозем и начинал образовываться новый минерал – муллит $3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$, содержание которого обычно возрастает с повышением температуры. Эндотермический эффект с максимумом при 866,4 °С свидетельствовал о присутствии карбоната кальция: происходило разложение кальцита с выделением CO_2 .

Заключение. В процессе выполнения научно-исследовательской работы студенты освоили современный высокочувствительный прибор - дериватограф, Они познакомились с достоинствами метода ДТА и ТГ: возможностью определения фазового состава тонкодисперсных и скрытокристаллических полиминеральных смесей без разделения их на полиминеральные фракции. С помощью прибора «Thermoscan-2» можно исследовать широкий класс веществ: неорганических и органических, природных и искусственно создаваемых [3] и выполнять научную работу на более высоком экспериментальном уровне.

Молодые ученые убедились, что любая методика имеет и ограничения: в процессе выполнения анализа дериватограф способен «улавливать» сторонние механические колебания, что вносит погрешности в термовесовые кривые. Термографический процесс должен проходить при отсутствии передвижений в лаборатории. Кроме того, описываемый метод не позволяет точно отнести тепловой эффект к физическому или химическому процессу, требует сочетания с такими методами, как оптическая микроскопия или рентгеноструктурный анализ. Поэтому возможность использования таких методов в ОГУ открывает большие возможности в получении оригинальных интересных результатов в области химии, физики и физической химии, разгадке тайн строения веществ.

Занимайтесь научными исследованиями, пользуйтесь новыми возможностями: приборами и методами. Это интересно! Новые приборы помогут новые гранты и сделать красивые научные работы, написать интересные статьи.

Список литературы:

1. Уварова В.А., Мурашев В.И. Дериватографический метод определения кинетических параметров термической деструкции веществ и материалов, используемых в угольных шахтах // вестник научного центра по безопасности работ в угольной промышленности № 2, 2012. – С.175-179.
2. Смольянинов С.И., Лозбин В.И., Икрин В.И., Белихмаер Я.А. Определение кинетических параметров процесса термического разложения топлива по дериватографическим данным // Известия Томского политехнического института. – Т. 259 : Химия и химическая технология. – 1975. – С. 65-67.
3. Пиндюк Т.Ф., Чулкова И.Л. Методы исследования строительных материалов: методические указания к лабораторным работам // Омск: СибАДИ, 2011. – 60 с.

4. Макарова И.А., Лохова Н.А. Физико-химические методы исследования строительных материалов : учеб. пособие. – 2-е изд. перераб. и доп.– Братск : Изд-во БрГУ, 2011. – 139 с.

5. Каныгина О.Н., Четверикова А.Г., Лазарев Д.А., Сальникова Е.В. Высокотемпературные фазовые превращения в железосодержащих глинах Оренбуржья // вестник ОГУ №6 (112), 2010. – С. 113-118.

ОСВЕТИТЕЛЬНАЯ СИСТЕМА МЕДИЦИНСКОГО ЭНДОСКОПА НА БАЗЕ СВЕТОДИОДНОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Задача создания совершенных современных видеоэндоскопических систем мультиспектральной (многоволновой) медицинской визуализации в последнее время вновь обрела актуальность [1].

Свет играет важную роль в процессе диагностики в связи с тем, что от его характеристик зависит достоверность полученных во время исследования данных и успешность эндоскопических вмешательств. Главное требование к источнику света медицинского эндоскопа - он должен быть достаточно ярким и не искажать естественный цвет исследуемого объекта.

Осветительные устройства медицинского эндоскопа, как правило, содержат источник света и оптически связанный с ним волоконно-оптический жгут, передающий свет от источника излучения к эндоскопу, который в свою очередь освещает заданную зону обследования [2, 3].

В качестве источников светового излучения в медицинских эндоскопах на протяжении многих лет использовались лампы, например, галогенные и ксеноновые, мощность которых составляет 100-300 Вт [1-3].

Основным недостатком ламповых источников света является необходимость собирать и фокусировать световой поток с помощью оптической системы (конденсора) на входном торце осветительного жгута, теряя при этом большое количество энергии [1, 4-8].

В последнее время в составе эндоскопических систем стали использоваться светодиодные источники излучения. По цветовым параметрам светодиодные источники излучения близки к стандартным источникам С и Е, их цветовая температура лежит в районе 8000-9000К. Это обеспечивает в их спектре излучения преобладание сине-фиолетовой области, соответственно формируются предпосылки для более высокой разрешающей способности оптической системы построенной на их основе. Использование цветных фильтров позволяет изменять спектральный состав освещающих пучков, в том числе выделять узкие области спектра. Светотехнические характеристики светодиодных источников излучения сравнимы или превосходят аналогичные характеристики ламп, у них коэффициент светоотдачи лежит в пределах от 10 до 25[лм/Вт] [2, 3, 9].

В настоящее время разработаны осветительные устройства для эндоскопов, построенные на основе светодиодов, расположенных вблизи осветительного волокна эндоскопа. Такая конструкция устройства позволяет значительно снизить потери энергии при передаче светового потока от осветителя к эндоскопу.

Однако при использовании в осветительных устройствах сверхмощных светодиодов, с мощностью более 3 Вт, возникает чрезмерный нагрев корпусов, в которых они установлены.

Сегодня отечественной промышленностью универсальный светодиодный осветитель «МИХОС» разработанный фирмой ООО «НПО Эталон», который за счет использования коннекторов системы Storz/ Storz позволяет подключить его непосредственно к эндоскопам различных конструкций. Осветительное устройство состоит из корпуса, внутри которого расположен светодиод. На дистальном конце корпуса расположен коннектор, предназначенный для подключения к эндоскопу, а к проксимальному концу корпуса подключен кабель электропитания [10].

Конструкция этого осветительного устройства не позволяет в достаточной мере отводить тепло от корпуса осветительного устройства. В связи с этим в ней можно использовать только светодиод малой мощности, который не может обеспечить максимальный уровень освещенности объекта. Кроме того эта конструкция не позволяет использовать светофильтры для исследования объектов в различных участках спектра видимого излучения.

Соответственно возникает задача создания осветительного устройства способного создавать необходимый уровень освещенности объекта и позволяющего в достаточной мере отводить тепло от корпуса осветительного устройства. Кроме того, в конструкции должно быть предусмотрено использование светофильтров.

Для решения этой задачи предлагается увеличить эффективность ввода излучения светодиода в световод осветительного канала эндоскопа, что обеспечит снижение необходимой мощности светодиода при заданной необходимой максимальной мощности освещенности. Для этого предлагается в составе осветительного устройства использовать оптическое устройство, которое, прежде всего, позволит увеличить эффективность ввода излучения в световод, а также даст возможность в составе осветительного устройства использовать светофильтры. Предлагается для этого использовать оптическое устройство, включающее две линзы, светофильтры, фокон и промежуточный световод. Оно построено по следующей схеме: в фокус первой линзы помещается светодиод, в фокус второй линзы фокон соединенный с промежуточным световодом, а светофильтры расположены между первой и второй линзами, пространство между которыми заполнено квазипараллельным пучком излучения светодиода.

Предлагаемое светодиодное осветительное устройство для эндоскопов выполнено в виде корпуса, внутри которого размещен светодиод, оптическое устройство, и промежуточный световод, выход которого на дистальном конце корпуса закреплен в коннектор, предназначенный для подключения к эндоскопу. Внутри корпуса размещен радиатор, в теле которого выполнены каналы, при этом между радиатором и корпусом со стороны дистальной части корпуса образуется зазор, предназначенный для прохождения воздуха по каналам радиатора. Светодиод установлен на дистальном конце радиатора, через тело радиатора проходит электрический кабель, предназначенный для подключения све-

одиода к кабелю электропитания с помощью разъема, установленного в коннекторе, расположенном на проксимальном конце корпуса. В корпусе осветительного устройства имеется поперечный разрез, предназначенный для установки светофильтров.

В качестве источника света используется светодиод мощностью 3 Вт. Кристалл представляет собой квадрат со стороной 2 мм, размещенный на штатной подложке, содержащей две токопроводящие дорожки с выводами на концах для соединения с кабелем электропитания.

Увеличение мощности вводимого в световод осветительного канала излучения светодиода позволяет снизить мощность используемого светодиода и обеспечивает бесперебойную работу осветительного устройства с постоянной максимальной освещенностью, не прибегая к необходимости использования системы охлаждения всего осветительного устройства.

Кроме того, использование оптических систем ввода излучения в оптический канал осветительной системы эндоскопа позволит использовать вместо традиционно применяемых в их составе оптических жгутов отдельные световоды. Это крайне важно для создания нового поколения компактных эндоскопов малого диаметра и видеоэндоскопических систем мультиспектральной (многоволновой) медицинской визуализации в полной мере отвечающих требованиям, предъявляемым к современной медицинской аппаратуре, расширяя тем самым возможности малоинвазивных методов хирургии и диагностики.

Список литературы

1. Кирин И.Г. Двухканальная оптическая система доставки некогерентного излучения в осветительный канал медицинского эндоскопа // Медицинская техника. 2019. N 4. С.32-39
2. Васильева Ю.О. Экспериментальная оценка качества изображения светодиодных осветительных систем эндоскопов // Международный научно-технический журнал «Светотехника и электротехника». 2006. N7-8. С. 19-22.
3. Иванилов А.А. Использование светодиодной технологии в эндоскопической диагностике // Известия ЮФУ. Технические науки. 2008. N5. С.30-34.
4. Кирин И.Г.(54) Устройство ввода излучения шаровых ламп в световод. Патент [2 681 668](#) . Опубликовано: [12.03.2019](#). Бюл. № [8](#)
5. Кирин И.Г. Устройство ввода некогерентного излучения в световод. Патент РФ 2171485. Опубликовано 27.07. 2001. Бюл. 21
6. Кирин И.Г. Компактное устройство ввода излучения шаровых ламп в световод. Патент РФ [2 696 936](#) Опубликовано: [07.08.2019](#). Бюл. № [22](#)
7. Кирин И.Г.Способ ввода некогерентного излучения в световод и устройство для его реализации. Патент РФ 2654938.Опубликовано: 23.05.2018. Бюл. № 15.
8. Кирин И.Г. Способ ввода некогерентного излучения в световод и устройство для его реализации. Патент РФ 2666972.Опубликовано: 13.09.2018. Бюл. № 26.

9. Полищук А. Вопросы выбора мощных светодиодных ламп для светотехнических применений // Современная электроника. 2006. №1. С.28-32.
10. Каталог фирмы ООО «НПО Эталон»,
<http://www.etalon66.ru/catalog/0/24/93>).

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ КОМПАКТНЫХ ОСВЕТИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ МЕДИЦИСКИХ ЭНДОСКОПОВ

Кириин И.Г., д-р техн. наук, профессор

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

В последнее время задача создания более совершенных современных видеоэндоскопических систем мультиспектральной (многоволновой) медицинской визуализации вновь обрела актуальность [1].

Исторически так сложилось, что осветители эндоскопов развивались в сторону увеличения яркости, и каждый качественный скачок в их развитии был вызван появлением новых типов источников [1, 2].

В последнее время в составе эндоскопических систем стали использоваться светодиодные источники излучения. Эти источники света сильно не греются. По светотехническим характеристикам (поток, яркость, светоотдача) светодиоды могут составить конкуренцию лампам. Значение коэффициента светоотдачи у исследованных светодиодов колеблется от 10 до 25 [лм/Вт]. По цветовым параметрам светодиоды близки к стандартному источнику С и Е. Цветовая температура светодиодов лежит в районе 8000-9000 °К, что обеспечивает в их спектре излучения преобладание сине-фиолетовой области, и тем самым создаются предпосылки для более высокой разрешающей способности оптической системы, это подтверждено экспериментально. Меньший, чем у ламп, световой поток светодиодов можно отнести к его недостаткам (временным), но это же позволяет при высоких светотехнических характеристиках устранить нагрев корпуса осветителя.

В настоящее время проведены исследования по изучению осветительных систем медицинских эндоскопов построенных со светодиодами, обеспечивающими освещение объектов в видимой области спектра. Исследований же осветительных систем медицинских эндоскопов, построенных на базе светодиодов рассчитанных на освещение объектов в других областях спектра, например в инфракрасной области спектра, в настоящее время нет, соответственно целесообразно было бы продолжить исследования по использованию светодиодов для освещения объектов за пределами видимого спектра излучения [2 - 4].

Использование цветных фильтров в осветительных системах медицинских эндоскопов, построенных со светодиодами, позволяет, как и в случае ламп, изменять спектральный состав освещающих пучков, в том числе выделять узкие области спектра [2,3].

В общем случае анализ вопроса показывает, что только отдельные светодиодные источники света могут быть использованы в качестве источника света в не очень прецизионных, простейших эндоскопах не очень дорогого ценового сегмента [1, 3, 4].

И соответственно задача дальнейшего совершенствования осветительных систем эндоскопов, построенных на базе световодов с использованием традиционных источников света, продолжает оставаться актуальной [1, 5-9].

Автором предложены следующие способы совершенствования оптических схем построения осветительных систем медицинских эндоскопов [1, 5-9].

Первый способ. Этот способ предполагает разделение диаграммы излучения лампы оптической системой на части. Далее выделенные части излучения вводятся в промежуточные световоды, которые затем объединяются в один световод соединяемый со световодом осветительного канала эндоскопа. Использование этого способа ввода излучения в световод осветительного канала медицинского эндоскопа позволяет вводить в него до 25% излучения лампы [1].

Второй способ. В этом способе из излучения шаровой лампы формируется квазипараллельный пучок света. Для этого используется зеркало, выполненное в виде полого шара с внутренним зеркальным покрытием, в боковое отверстие которого установлена линза с эллиптической поверхностью. Шаровая лампа расположена внутри полого шара так, что ее излучение, сконцентрированное сферическим зеркалом и линзой с эллипсоидальной поверхностью, выходит из этой линзы в виде квазипараллельного пучка. Далее этот квазипараллельный пучок света направляется на блок градиентных стержневых линз. Градиентные стержневые линзы соединены попарно с помощью У-ветвителей, выводы У-ветвителей в свою очередь соединены между собой, а вывод последнего У-ветвителя соединен со световодом осветительного канала медицинского эндоскопа, причем, блок градиентных стержневых линз, У-ветвители, и световод расположены вплотную друг за другом. В оптической системе предусмотрен светофильтр, он расположен перед блоком градиентных стержневых линз. Использование этого способа ввода излучения в световод осветительного канала медицинского эндоскопа позволяет вводить до 85% излучения шаровой лампы [5].

Если в составе осветителя эндоскопа используется дуговая ксеноновая лампа, то в полом зеркальном шаре, в который устанавливается лампа, изготавливаются два отверстия, а лампа устанавливается вдоль линии соединяющей эти отверстия. Вплотную к одному из отверстий зеркального шара устанавливается линза с катодиоптрическим кольцом. Затем, также как и в случае с оптической системой осветительного устройства с использованием шаровых ламп, оптическое излучение ксеноновой лампы передается на блок стержневых линз, соединенных с промежуточными световодами, которые далее объединены в один. Использование этого способа ввода излучения в световод осветительного канала медицинского эндоскопа позволяет вводить до 80% излучения ксеноновой лампы [6].

Следующий способ построения высокоэффективных осветительных систем медицинских эндоскопов на базе ламп состоит в том, что на пути квазипараллельных пучков, возникающих на выходе описанных выше оптических зеркально-линзовых систем, вместо блоков градиентных линз, связанных промежуточными световодами, устанавливается плоскопараллельная пластинка из

стекла со значительной зависимостью показателя преломления от температуры. В этом способе за счет самофокусировки в этой пластинке яркость оптического излучения, передаваемого от шаровой или ксеноновой лампы зеркально - линзовыми системами увеличивается и, соответственно, увеличивается мощность оптического излучения, поступающего в световод осветительного канала эндоскопа. Использование этого способа ввода излучения в световод осветительного канала медицинского эндоскопа позволяет вводить до 85 – 90 % излучения лампы [7,8].

Кроме того, в способе, основанном на разделении диаграммы излучения лампы оптической системой на части, рассмотренном выше, если выделенные в отдельные каналы части оптического излучения лампы пропустить перед введением в промежуточные световоды через плоскопараллельные пластинки со значительной зависимостью показателя преломления от температуры, то также можно увеличить мощность оптического излучения, вводимого в промежуточные световоды за счет эффекта самофокусировки излучения в этих стеклянных пластинках. Использование этого способа ввода излучения в световод осветительного канала медицинского эндоскопа позволяет вводить до 60% излучения лампы [9].

Таким образом, настоящая работа показывает, что в световод осветительного канала медицинского эндоскопа, с помощью предлагаемых способов, можно ввести от 25 и до ~ 90% излучения лампы. Тем самым обоснована возможность уменьшения диаметра осветительного канала, что в свою очередь создает возможность разработки и внедрения осветительных систем медицинских эндоскопов, построенных не на базе волоконных жгутов, а на базе световодов, и это может быть достигнуто путем усовершенствования оптических систем ввода излучения от источника света в световод.

Список литературы

1. Кирин И.Г. Двухканальная оптическая система доставки некогерентного излучения в осветительный канал медицинского эндоскопа // Медицинская техника. 2019. N 4. С.32-39.
2. Иванилов А.А. Использование светодиодной технологии в эндоскопической диагностике // Известия ЮФУ. Технические науки. 2008. N5. С.30-34.
3. Васильева Ю.О. Экспериментальная оценка качества изображения светодиодных осветительных систем эндоскопов // Международный научно-технический журнал «Светотехника и электротехника». 2006. N7-8. С. 19-22.
4. Полищук А. Вопросы выбора мощных светодиодных ламп для светотехнических применений // Современная электроника. 2006. №1. С.28-32.
5. Кирин И.Г. Устройство ввода некогерентного излучения в световод Патент РФ [2 625633](#). Опубликовано: [17.07.2017](#). Бюл. № [20](#).
6. Кирин И.Г.(54) Устройство ввода излучения шаровых ламп в световод. Патент [2 681 668](#) . Опубликовано: [12.03.2019](#). Бюл. № [8](#).

7. Кирин И.Г. Способ ввода некогерентного излучения в световод и устройство для его реализации. Патент РФ 2654938. Опубликовано: [23.05.2018](#). Бюл. № [15](#)

8. Кирин И.Г. Компактное устройство ввода излучения шаровых ламп в световод. Патент РФ [2 696 936](#) Опубликовано: [07.08.2019](#). Бюл. № [22](#).

9. Кирин И.Г. Способ ввода некогерентного излучения в световод и устройство для его реализации. Патент РФ 2666972. Опубликовано: 13.09.2018. Бюл. № 26.

ПЕРЕСТРОЙКА КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИАМФОЛИТНЫХ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗОЛОТОЙ НАНОЧАСТИЦЫ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

**Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор
Центр лазерной и информационной биофизики,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Плазмонные наночастицы с адсорбированными на их поверхности макромолекулами широко применяются во многих областях науки и техники, в частности в биомедицинских исследованиях и в элементах устройств наноэлектроники [1-3]. Особый интерес вызывает исследование изменений конформационной структуры полиамфолитных макромолекулярных цепей на поверхности плазмонных металлических наночастиц под влиянием электромагнитного излучения для использования в различных сенсорах. В электрическом поле на поверхности металлической наночастицы индуцируются электрические заряды, которые распределены по поверхности наночастицы с поверхностной плотностью пропорционально косинусу угла между направлением электрического поля и нормали в точке на поверхности наночастицы. Поэтому электрическое поле около наночастицы будет сильно искажено. Такое распределение индуцированных зарядов будет оказывать существенное влияние на конформационную структуру полиамфолитных макромолекул, адсорбированных на поверхности наночастицы. В случае воздействия электромагнитного излучения на данную наносистему конформационная структура полиамфолитной макроцепи будет изменяться в соответствии с колебаниями индуцированных данным полем зарядов на поверхности наночастицы.

Было произведено молекулярно-динамическое моделирование (МД-моделирование) для двух разных полиамфолитных полипептидов, расположенных на поверхности золотой наночастицы радиусом 1.5 нм:

1) полипептид A200R50D50, состоящий из 300 аминокислотных остатков с 200 звеньями Ala с равномерно распределенными 50 звеньями Asp и 50 звеньями Arg – (ADAARA)₅₀;

2) полипептид A272R16D16, состоящий из 304 аминокислотных остатков с 272 звеньями Ala с равномерно распределенными 8 парами звеньев Asp и 8 парами звеньев Arg – A₈(A₈DDA₁₆RRA₈)₈A₈.

МД-моделирование проводилось с использованием программного комплекса NAMD 2.13 [4] при постоянной температуре 900 К с силовым полем CHARMM22 [5] для полипептидов, а их взаимодействие с золотой наночастицей описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, параметризованным

в работе [6]. Атомы наночастицы в процессе моделирования оставались зафиксированными. 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 (PME) [7] с шагом сетки 0.11 нм. Вся молекулярная система была помещена в куб с ребрами 20 нм, заполненный молекулами воды TIP3P [8].

В стартовой конфигурации использовались полученные ранее равновесные конформации полипептидов, адсорбированных на поверхности неполяризованной наночастицы в результате МД-моделирования. Модель золотой наночастицы была получена путем вырезания шара радиусом 1.5 нм из кристалла золота. Локальное электрическое поле задавалось через изменение зарядов атомов на поверхности сферической наночастицы по закону косинуса, которые периодически изменялись в процессе МД-моделирования по закону синуса с периодом колебаний 2.4 нс в течение 12 нс (5 периодов колебаний). Расчет производился для пикового значения индуцированного дипольного момента поляризованной наночастицы $p_{\max}^{np} = 10.92 \text{ кД}$. В этом случае на положительно заряженном полюсе наночастицы атомы имели парциальные заряды равные $+1e$. Каждый период колебания был разбит на 8 временных отрезков по 0.3 нс в течении которых поле не изменялось, а значение дипольного момента наночастицы на выбранном отрезке задавалось путем их усреднения по всей длине отрезка. Дипольный момент наночастицы изменялся в следующей последовательности: $+0.69 p_{\max}^{np}$ (среднее значение на участке колебаний от $\pi/8$ до $3\pi/8$), $+0.97 p_{\max}^{np}$ (от $3\pi/8$ до $5\pi/8$), $+0.69 p_{\max}^{np}$ (от $5\pi/8$ до $7\pi/8$), 0 (от $7\pi/8$ до $9\pi/8$), $-0.69 p_{\max}^{np}$ (от $9\pi/8$ до $11\pi/8$), $-0.97 p_{\max}^{np}$ (от $11\pi/8$ до $13\pi/8$), $-0.69 p_{\max}^{np}$ (от $13\pi/8$ до $15\pi/8$), 0 (от $15\pi/8$ до $17\pi/8$).

На рисунке 1 изображены конформации полипептидов A200R50D50 и A272R16D16 в различные моменты времени от начала МД-моделирования. На рисунках 1а и 1б изображены данные полипептиды в стартовой конфигурации после предварительного МД-моделирования на поверхности нейтральной неполяризованной золотой наночастицы. На рисунках 1в и 1г изображены конформации данных полипептидов в момент времени 10.2 нс на последнем пятом периоде колебаний. Этот момент времени соответствует окончанию МД-моделирования на отрезке, при котором дипольный момент наночастицы направлен вверх и равен $+0.97 p_{\max}^{np}$. Видно, что произошла адсорбция отрицательно заряженных звеньев Asp данных полипептидов на поверхности заряженного положительно в данный момент времени полюса наночастицы, который на рисунках 1в и 1г находился в верхней части наночастицы, а остатки Arg адсорбировались на поверхности отрицательно заряженного в текущий момент времени полюса наночастицы, который находится внизу.

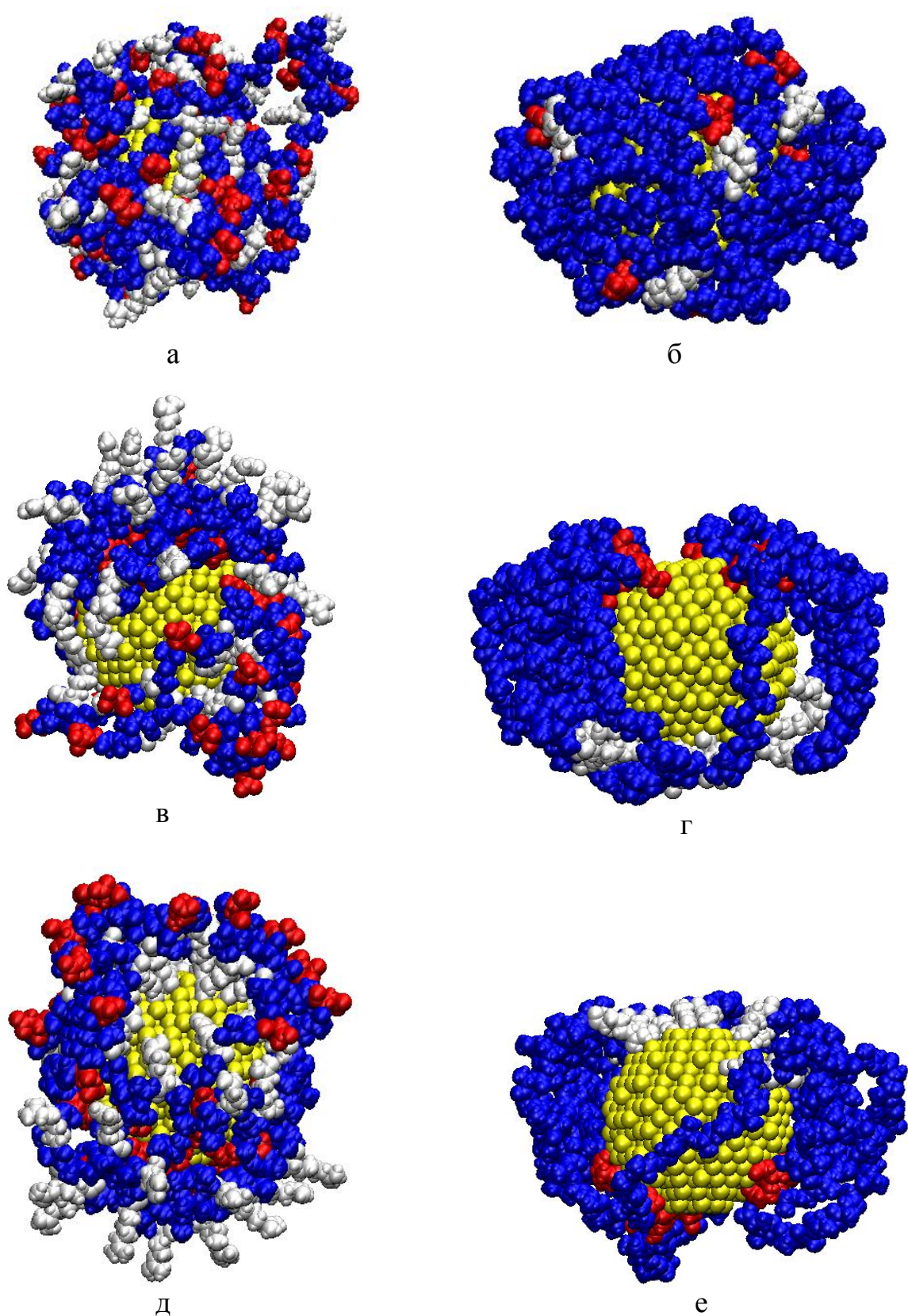


Рис. 1 Полипептиды A200R50D50 (а, в, д) и A272R16D16 (б, г, е) в стартовой конфигурации на поверхности неполяризованной наночастицы (а, б), а также через 10.2 нс (в, г) и 11.4 нс (д, е) от начала МД-моделирования, когда наночастицы поляризованы в противоположных направлениях (синим цветом

изображены звенья Ala, белым – Arg, красным – Asp, желтым – золотая наночастица).

На рисунках 1д и 1е изображены конформации полипептидов A200R50D50 и A272R16D16 в момент времени 11.4 нс, когда дипольный момент наночастицы ($-0.97 p_{\max}^{np}$) направлен вниз. В этом случае наблюдается зеркальная картина конформационной структуры полипептидов по отношению к рассмотренному выше случаю положительного направления дипольного момента наночастицы. Из-за разного порядка расположения заряженных звеньев в макроцепи наблюдаются существенные отличия конформационных структур полипептидов A200R50D50 и A272R16D16 на поверхности поляризованной наночастицы. У полипептида A272R16D16 расстояние между положительными Arg и отрицательными заряженными звеньями Asp достаточно, для того чтобы все заряженные звенья расположились на полюсах (рис. 1г и 1е), а у полипептида A200R50D50 расстояние между заряженными звеньями небольшое, поэтому заряженные звенья могут находиться в экваториальной области, а также наблюдается вытягивание «опушки» макроцепи вблизи полюсов из-за отталкивания одноименно заряженных звеньев по отношению к полюсам наночастицы (рис. 1в и 1д).

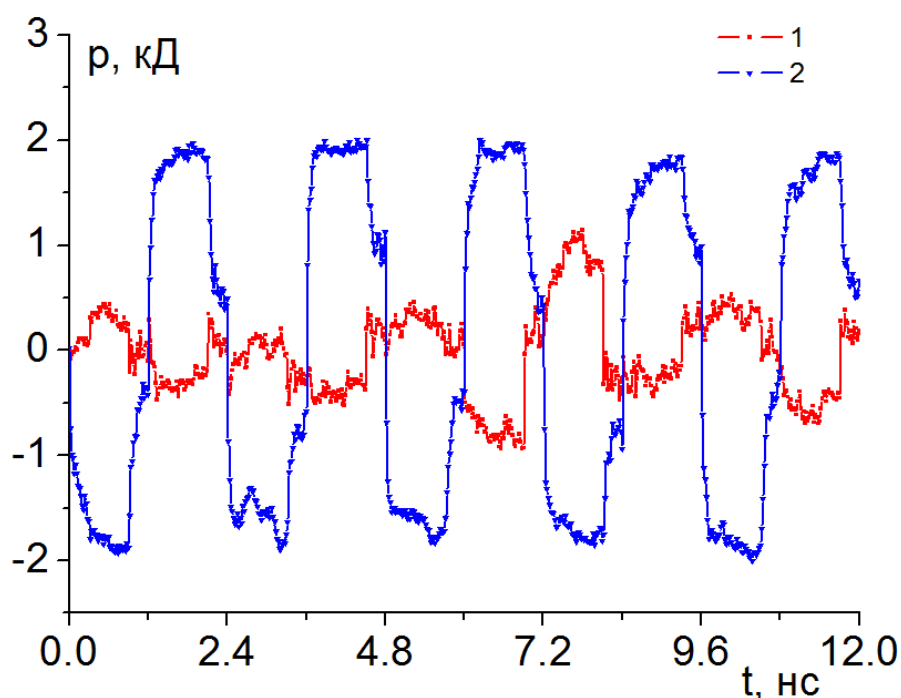


Рис. 2 Зависимости изменения дипольных моментов (p) полипептидов A200R50D50 (1) и A272R16D16 (2) от времени МД-моделирования

На рисунке 2 изображены зависимости изменения дипольных моментов полипептидов A200R50D50 и A272R16D16 от времени МД-моделирования. Видно, что наблюдаются периодические колебания дипольного момента полиамфолитного полипептида на поверхности наночастицы. Это говорит о том, что конформационная структура макромолекулы изменяется вслед за

изменением локального электрического поля вблизи поверхности металлической наночастицы. Также можно отметить различный характер изменения дипольного момента у рассмотренных полипептидов. У полипептида A200R50D50 наблюдается нарастание дипольного момента макроцепи при нарастании дипольного момента наночастицы, а у полипептида A272R16D16 наоборот наблюдается уменьшение дипольного момента макроцепи. Это связано с тем, что при изменении электрического поля происходит разный характер смещения заряженных остатков. У полипептида A200R50D50 вытягивается опушка в районе полюсов и дипольные моменты участков полипептида между заряженными звеньями устанавливается по направлению электрического поля. А у полипептида A272R16D16 происходит смещение заряженных звеньев к противоположному полюсу, что приводит к тому, что дипольный момент всей макроцепи направлен в противоположную сторону.

На рисунке 3 изображены радиальные зависимости плотности атомов полипептида A272R16D16 с дифференциацией по типам звеньев на поверхности золотой наночастицы усредненные по окончании всех временных отрезков на неполяризованной наночастице (рис. 3а, в моменты времени 0, 1.2 нс, 2.4 нс ... 12 нс), на рисунке 3б по окончании всех временных отрезков на наночастице с дипольным моментом $+0.97 p_{\max}^{np}$ (в моменты времени 0.6 нс, 3 нс, 5.4 нс, 7.8 нс и 10.2 нс), а также на наночастице с дипольным моментом $-0.97 p_{\max}^{np}$ (в моменты времени 1.8 нс, 4.2 нс, 6.6 нс, 9 нс и 11.4 нс). Видно, что в моменты времени, когда наночастица не поляризована, радиальное распределение плотности атомов полипептида (рис. 3а) значительно отличается случаев, когда наночастица поляризована (рис. 3б и 3в). На нейтральной поверхности (рис. 3б) наблюдается характерное радиальное распределение с максимумом плотности атомов полипептида вблизи поверхности, а плотности атомов по отдельным звеньям имеют схожую кривую радиального распределения [2]. В случае поляризованной наночастицы в разных направлениях (рис. 3б и 3в) кривые радиальных распределений средней плотности атомов полипептида практически не отличаются друг от друга. На поляризованной наночастице произошло перераспределение атомарной плотности полипептида: пиковые значения средней плотности по остаткам Arg и Asp находятся у поверхности наночастицы, а профиль кривой распределения радиальной плотности по остаткам Ala значительно сместился от нее. Поэтому радиальное распределение средней плотности по всем атомам полипептида в случае неполяризованной и поляризованной наночастиц значительно отличается, а в случае поляризации в противоположном направлении кривые радиальных распределений практически совпадают (рис. 3г).

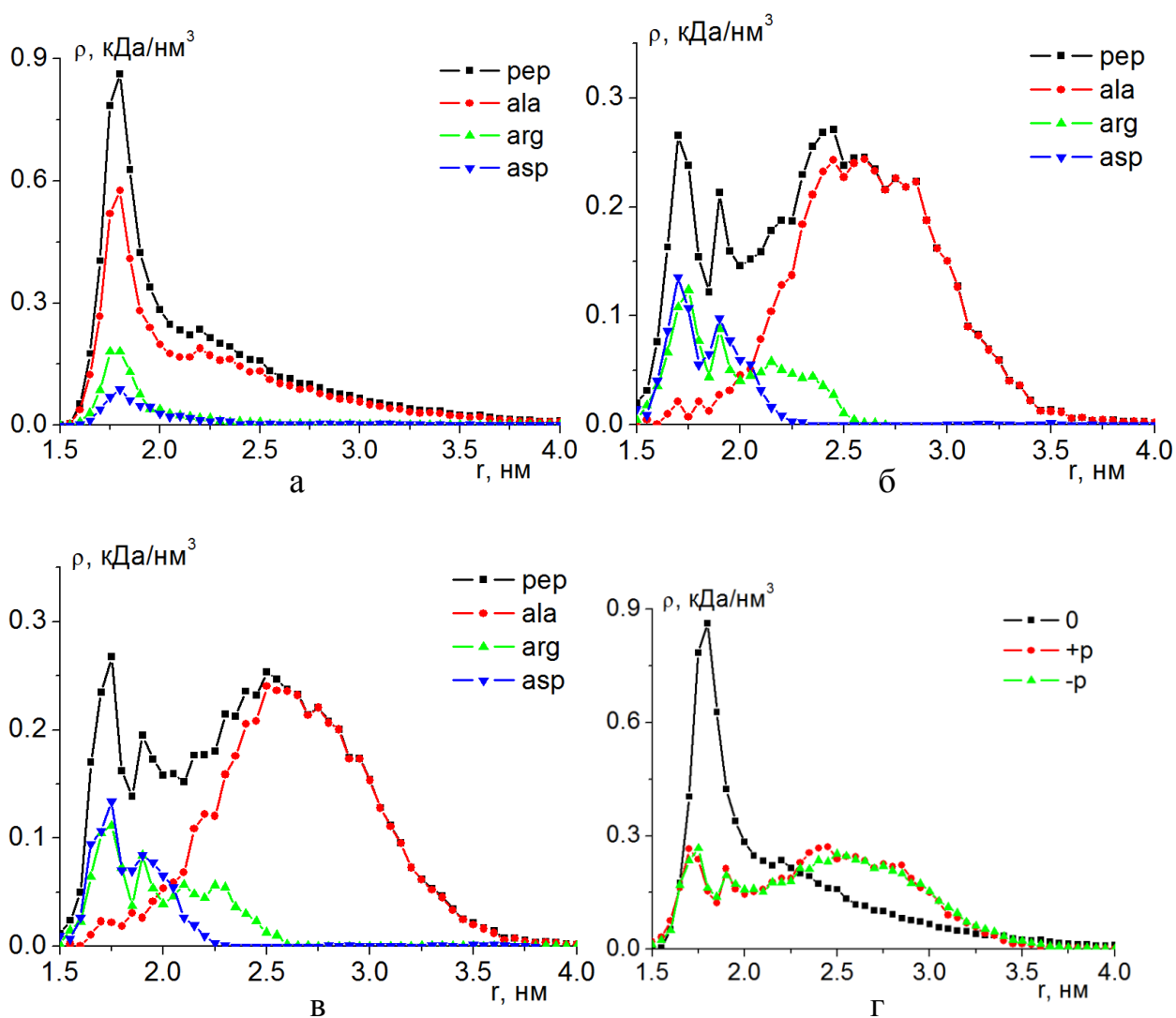


Рис. 3. Радиальные зависимости плотности атомов полипептида A272R16D16 с дифференциацией по типам звеньев на поверхности золотой наночастицы усредненные по окончанию всех временных отрезков на неполяризованной наночастице (а), по окончанию всех временных отрезков с дипольным моментом наночастицы $+0.97 p_{\max}^{np}$ (б) и $-0.97 p_{\max}^{np}$ (в) (пер – зависимость средней плотности по всем атомам полипептида, ala, arg и asp – по типам аминокислотных остатков). Радиальные зависимости средней плотности по всем атомам полипептида A272R16D16 (г) при разных дипольных моментах наночастицы (0 – неполяризованная наночастица, +р и –р, когда дипольный момент направлен вверх и вниз соответственно).

На рисунке 4 изображены радиальные зависимости плотности атомов полипептидов A272R16D16 на поверхности золотой наночастицы по окончанию МД-моделирования на временных отрезках в случаях, когда наночастица не поляризована (рис. 4а), поляризована с дипольным моментом $+0.97 p_{\max}^{np}$ (б) и $-0.97 p_{\max}^{np}$ (в). Видно, что с течением времени МД-моделирования радиальные распределения плотности атомов в одной фазе изменения поверхностной плотности заряда наночастицы практически

совпадают. Это говорит о том, что при периодическом изменении локального электрического поля наночастицы наблюдаются колебания конформационной структуры полиамфолитного полипептида.

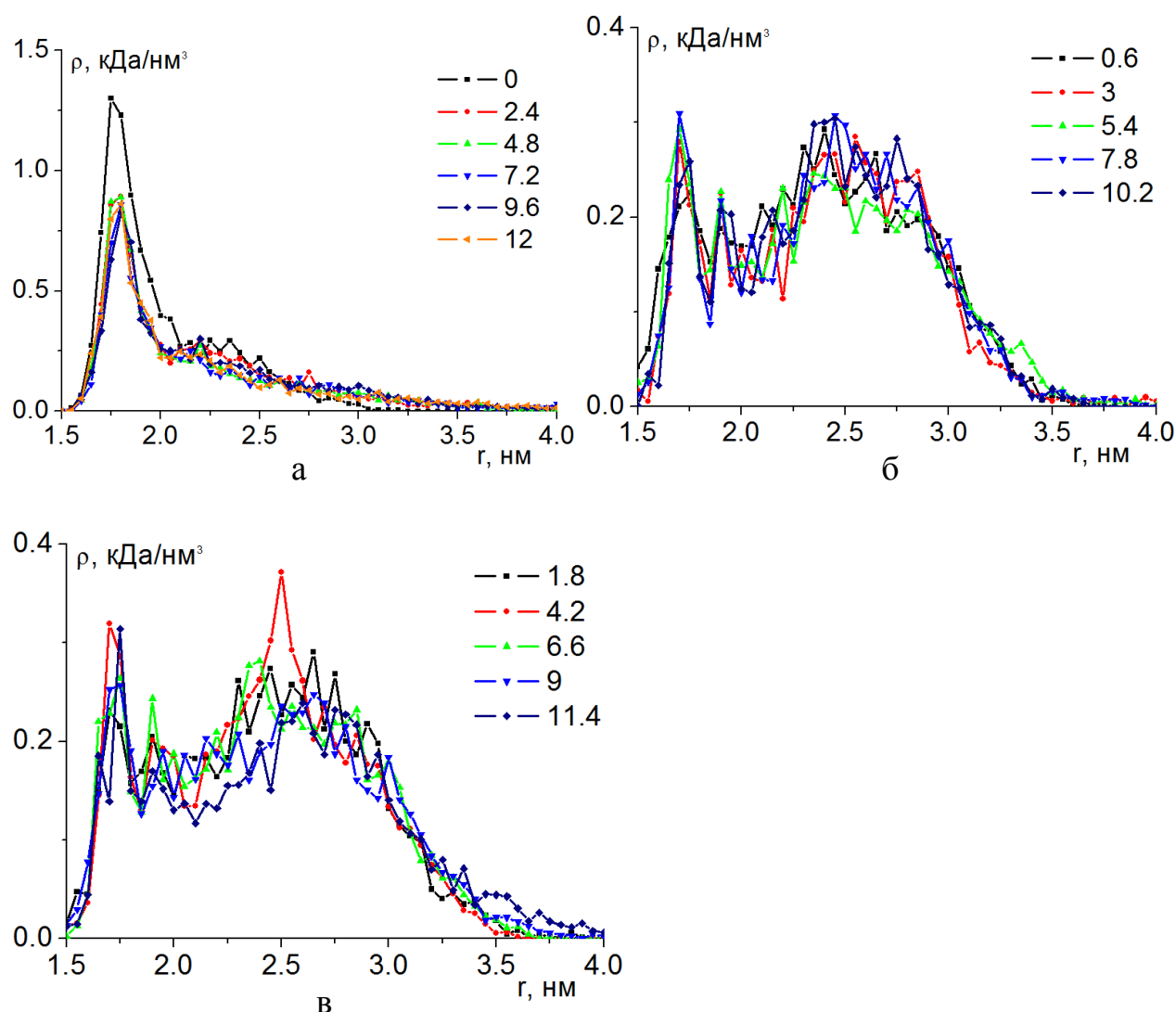


Рис. 4. Радиальные зависимости плотности атомов полипептидов A272R16D16 на поверхности золотой наночастицы по окончании МД-моделирования на временных отрезках, когда наночастица не поляризована (а), имеет дипольным момент, направленный вверх $+0.97 p_{\max}^{np}$ (б) и вниз $-0.97 p_{\max}^{np}$ (в). На рисунке цифрами обозначено время МД-моделирования в наносекундах, при котором построены соответствующие кривые.

Таким образом, на поверхности золотой наночастицы под воздействием сверхвысококачастотного электрического поля наблюдаются эффект колебаний конформационной структуры адсорбированного полиамфолитного полипептида. Такой эффект может найти применение при создании различных сенсорных устройств в биомедицине и нанoeлектронике.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Оренбургской области в рамках научного проекта № 19-43-560003.

Список литературы

1. *Chen, Y.* / Electrically induced conformational change of peptides on metallic nano-surfaces / Chen Y., Cruz-Chu E.R., Woodard J., Gartia M.R., Schulten K., Liu L. // ACS Nano. – 2012. – V. 6. – P. 8847-8856.
2. *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.
3. *Кручинин, Н.Ю.* Молекулярно-динамическое моделирование электрически индуцированных конформационных изменений полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы / Кручинин, Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоидный журнал. – 2019. – Т. 81. – № 2. – С. 175.
4. *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.
5. *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.
6. *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.
7. *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.
8. *Jorgensen, W. L.* Comparison of simple potential functions for simulating liquid water / Jorgensen W. L., Chandrasekhar J., Madura J. D., Impey R. W., Klein M. L. // J. Chem. Phys. 1983. V. 79. Is. 2. P. 926-935.

КОНТРОЛЬ ЗНАНИЙ СТУДЕНТА-БУДУЩЕГО ИНЖЕНЕРА ПО ФИЗИКЕ: САМОПОДГОТОВКА, САМОАНАЛИЗ, РЕЗУЛЬТАТЫ

Кучеренко М.А., канд. пед. наук

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

В современном образовании усилен акцент на планируемых результатах обучения, которые обеспечиваются деятельностью преподавания и деятельностью учения в контактной и самостоятельной работе по освоению дисциплины учебного плана вуза. Для направления подготовки 13.03.02 Электроэнергетика и электротехника на различные виды и формы самостоятельной работы студента отведено, в соответствии с рабочей программой для набора 2019 года, 265,5 академических часов, что составляет 67% от общей трудоемкости дисциплины «Физика».

Студент-первокурсник электроэнергетического факультета попадает в новую для него формирующую учебную среду, в которой должны выявляться и присваиваться новые смыслы в процессе понимания физики, основой которого являются и взаимодействие субъектов образовательной деятельности, и взаимодействие обучаемого с различными по виду источниками информации. Готовность же к такому процессу, как следует из таблицы, имеют около 40% студентов-первокурсников указанного выше направления подготовки, так как, считается, что только выпускники средней школы, имеющие результаты государственной аттестации в диапазоне от 61 до 100 тестовых баллов, демонстрируют готовность к успешному продолжению образования на различных естественнонаучных и инженерных направлениях вузов России [1].

Таблица 1-Распределение абитуриентов ЭЭ факультета по тестовым баллам ЕГЭ-2019 по физике

Группа	Количество студентов (%), имеющих тестовый балл в диапазоне 37-60	Количество студентов (%), имеющих тестовый балл в диапазоне 61-100
19ЭЭ(6)-1	16 (64)	9(36)
19ЭЭ(6)-2	15(60)	10(40)
19ЭЭ(6)-3	15(60)	10(40)

В течение 2-х семестров обучения физике у студента-будущего инженера формируется одна из базовых компетенций - компетенция ОПК-2, предполагающая способность применять соответствующий физико-математический аппарат, методы анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования при решении возникающих профессиональных задач. Инструментом диагностики достижения компетенции является, очевидно, текущий и итоговый контроль знаний и умений обучающегося. Подчеркнем, что в объеме учебного материала,

выносимого на итоговый контроль по физике в форме устного экзамена, 26% в осеннем семестре и 27% в семестре весеннем составляет содержание самостоятельной работы студента, организованной на основе разработанной методики смыслового чтения и подготовленного учебно-методического комплекса, включающего два учебных пособия и методические указания для самоподготовки к практическим и лабораторным занятиям, различным формам рубежного и итогового контроля знаний [2], [3], [4]. Оценки, имеющие преимущественно формирующий характер, то есть, направленные, главным образом, на выявление уровней усвоения и степени соответствия требованиям к самостоятельной работе по разделам «Физические основы механики» и «Колебания и волны» (семестровые СРС №1 и №2), представлены на рисунке 1. Касательно качественных особенностей выполненной работы следует отметить следующее:

1. Студенты склонны игнорировать рекомендованные учебники, учебные пособия, справочники, физические энциклопедии и словари в пользу Википедии, случайных сайтов и учебников средней школы. Корреляция между тестовым баллом ЕГЭ по физике и умениями поиска, обработки и предъявления информации отсутствует.

2. Выявлен высокий уровень заимствования в образцах деятельности студентов, что свидетельствует о не высоко сформированной ценности самостоятельной познавательной деятельности учащегося.

3. Обучающиеся испытывают серьезные трудности в применении нового для них языка дифференциального и интегрального исчисления, затрудняются в анализе и применении различных специфических для предметной области видов кодирования учебной информации (наглядного образа, символической модели, таблиц, графиков и рисунков).

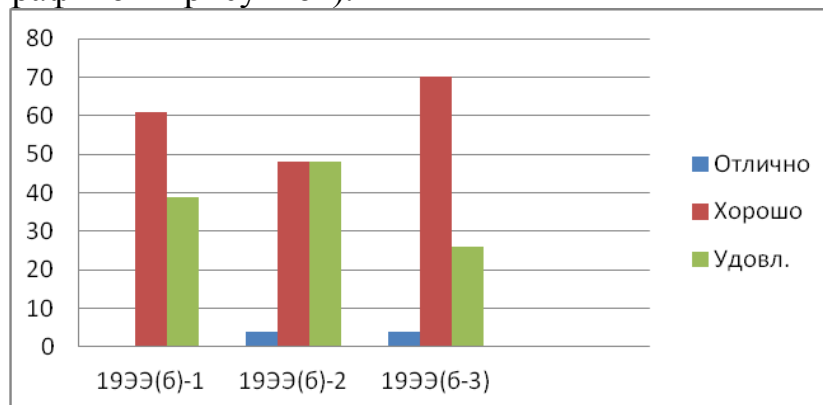


Рисунок 1 – Оценка самостоятельной работы студентов по изучению разделов «Физические основы механики» и «Колебания и волны»

(здесь и далее по вертикали или горизонтали отложен процент обучающихся)

На текущем контроле по этим же разделам 27% заданий в первой, теоретической части, диагностировали уровни освоения материала в семестровой самостоятельной работе и были ориентированы на различные виды деятельности студентов, такие, как: воспроизводящую (40% в объеме заданий), поисковую (40%) и рефлексивную (10%). Во второй части 30%

предложенных для контроля физических задач должны были быть отработаны по плану в предварительном самостоятельном учении студентов. Итоговые оценки выполнения ими теоретической и практической части контрольной работы №1 представлены на рисунках 2 и 3.

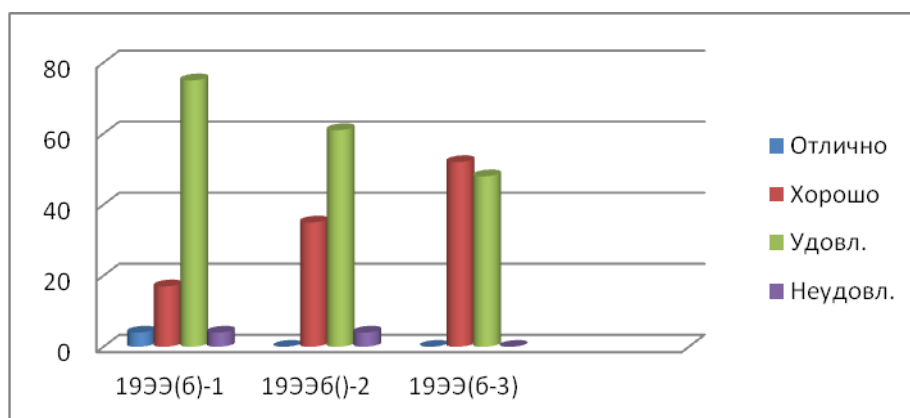


Рисунок 2 – Результаты выполнения контрольной работы №1 (теоретическая часть)

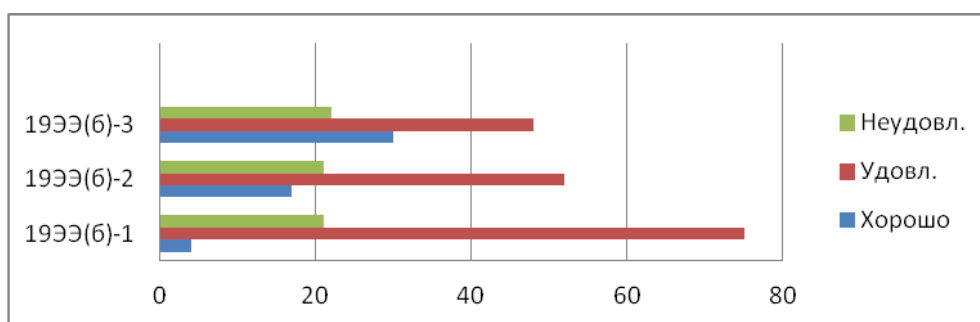


Рисунок 3- Результаты выполнения контрольной работы №1(практическая часть-решение задач)

Отметим в связи с приведенными результатами следующее:

1. Как показывает образовательная практика, эффективная самостоятельная работа студента должна сопровождаться индивидуальными консультациями преподавателя, имеющими установочный, тематический или проблемный характер [5]. Для потока студентов (более 100 учащихся) электроэнергетического факультета это потребует, как представляется, больших временных затрат при имеющемся наличном уровне предметной подготовки первокурсников и, как следствие, перерасчета учебной нагрузки преподавателя.

2. Самостоятельная работа студента с новыми типами физических задач в условиях, когда в семестре на это вид обучения отводится только 16ч. контактной работы, не является продуктивной. В связи с этим, необходимо, на наш взгляд, использовать элементы технологии сотрудничества, возможности «смешанного» и «перевернутого» обучения, которые могут способствовать формированию у студентов не только необходимых предметных навыков, но и навыков сотрудничества, совместной работы и обмена знаниями [6], [7].

3. Только высокомотивированные, с достаточной степенью обучаемости или с сформированными эмоционально-волевыми установками студенты (по нашей оценке таких примерно 23-28%), способны к напряженной, систематической интеллектуальной деятельности по самостоятельному освоению и закреплению многошагового способа решения вузовской физической задачи. По нашему мнению, средством самообучения переводу «декларативных» знаний в знания «функциональные» (терминология Дж. Бигса в [8]) для большинства студентов может стать учебно-методическое пособие для самостоятельной работы, в котором должны быть систематизированы ключевые задачи, моделирующие явления или процессы, являющиеся опорными элементами содержания курса. Выбранные задачи пособия с образцами решения, иллюстрирующими универсальные или специфические подходы решения, должны быть, по возможности, приближены к будущим профессиональным ситуациям в области электроэнергетики и электроснабжения.

Анализ операционального состава учебной деятельности студентов по подготовке к итоговой аттестации был выполнен на основе очного анкетирования с вопросами разного типа, удовлетворяющих основным требованиям, предъявляемых к такой форме опроса учащихся [9]. С материалами анкет работали 63 студента первого курса направления подготовки 13.03.02 Электроэнергетика и электротехника, завершивших двухсеместровое изучение физики и прошедших вторую итоговую аттестацию – письменный экзамен в весеннем семестре 2018-2019 учебного года. В результате были выявлены различные особенности самостоятельного учения первокурсников, среди которых и перечисленные ниже:

1. 67% учащихся по результатам опроса тратят на подготовку к экзамену по физике около 30 часов, а меньшая часть, 14%, - более 30 часов своей внеаудиторной работы. Следовательно, на изучение одного вопроса в среднем уходит около 40 минут подготовки студента.

2. Выбор студентом источников для подготовки к итоговому контролю представлен нами в порядке убывания: лекционные записи (81%), тетрадь с выполненной плановой самостоятельной работой по физике (71%), учебники и учебные пособия, рекомендованные преподавателем (62%), ресурсы интернета (57%), справочники по физике для вузов (14%). В этой связи можно констатировать стремление большей части студентов (около 70%) к использованию различных источников информации. Однако акцент на лекционных записях, являющихся результатом одного вида интерпретации учебного материала, свидетельствует о невысокой познавательной активности первокурсников и отсутствии продуманной методики организации образовательной деятельности с учебниками и учебными пособиями на семестровых практических и лабораторных занятиях по физике.

3. Из множества стратегий смыслового чтения текста и графических форм представления смысловой макроструктуры текста, использованных в учебном пособии для самостоятельной работы [3], при подготовке к экзамену

студентами, в основном, были выбраны 4 приема: создание различных типов плана по контрольному вопросу (49%), выделение понятий, значения которых необходимо уточнить (43%) и составление кратких конспектов по вопросу экзамена (28%), устный рассказ по составленному плану или по структурной схеме (24%). Вместе с тем в индивидуально составленных алгоритмах подготовки к экзамену, предложенных участниками анкетирования, только 48% указали 2 или 3 стратегии в качестве значимых этапов самостоятельной подготовки. Таким образом, большинство стратегий смыслового чтения - подтвержденных опытом человеческой деятельности способов постижения, выявления и выстраивания собственных многообразных смыслов, не присвоены учащимися в субъектный опыт. Это указывает, на наш взгляд, и на то, что стратегии понимания учебного материала осваиваются студентами самостоятельно, а не в рамках, например, междисциплинарного курса или плановых консультаций, направленных на формирование и совершенствование герменевтической по своей природе коммуникационной компетентности личности.

4. Характер ответов на открытые и закрытые вопросы, касающихся ожиданий студента от плановой консультации перед экзаменом, показал, что в основном учащиеся настроены получить психологический настрой в учебном общении и только 27% обучающихся настроены на возможность задать вопрос преподавателю для уточнения или углубления понимания учебного материала. Это свидетельствует о существующем невысоком дидактическом потенциале консультации и требует, по нашему мнению, определенных эффективных методических решений от преподавателя.

5. Анкетирование показало, что большинство опрошенных (81%) испытывают необходимость в методических указаниях для подготовки к экзамену по физике, подготовленных в контексте изучения и использования различных по природе и происхождению герменевтических техник в целях осмысления и применения учебной информации различного содержания и сложности [2,3].

6. Ожидаемыми для «сетевого» поколения стали результаты по использованию открытых онлайн-курсов при подготовке к итоговому контролю знаний. В этом ключе опрос показал лидирующие позиции «Открытого образования» (76%), «Универсариума» (62%) и «Лекториума» (52%). Такая ситуация, как очевидно, настоятельно требует от преподавателя перестройки педагогического мышления и педагогической практики в направлении использования виртуального обучения в плановой самостоятельной работе студента-будущего инженера.

В заключение можно констатировать, что диагностируемые в различных видах контроля планируемые результаты обучения дисциплине «Физика», являющиеся результатом специально организуемой самостоятельной работы студента, должны достигаться в условиях интеграции возможностей традиционного и цифрового обучения, направленных не только на предметное, но и личностное развитие всех участников образовательного процесса вуза.

Список литературы

1. Методические указания для учителей, подготовленные на основе анализа типичных ошибок участников ЕГЭ 2018 года.- www.fipi.ru
2. Кучеренко М.А. Стратегии смыслового чтения учебного текста по физике: учебно-методическое пособие /М.А. Кучеренко; Оренбургский гос. ун-т.-Оренбург: ОГУ, 2014.-248с.
3. Кучеренко М.А. Самостоятельная работа с учебным текстом по физике: практикум по физике /М.А. Кучеренко; Оренбургский гос. ун-т.-Оренбург: ОГУ, 2016.-126с.
4. Кучеренко М.А. Тестовые задания по курсу общей физики: методические указания для самостоятельной работы/ М.А. Кучеренко.- Зарегистрировано РИС ОГУ, №24К01182014 от 19.03.14. –Оренбург: ОГУ, 2013. – 50с.
5. Педагогика и психология высшей школы: Учебное пособие.-Ростов н/Д:Феникс, 2002.-С.124-136.
6. Осипов П.Н. Инженерная педагогика: от сотрудничества к синергии //Высшее образование в России. 2017.№11(217). С.54-60.
7. Иванов В.Г., Кайбияйнен А.А., Мифтахутдинов Л.Т. Инженерное образование в цифровом мире // Высшее образование в России. 2017.№12(218). С. 136-143.
8. Лефрансуа Г. Прикладная педагогическая психология. - Спб: Прайм-ЕВРОЗНАК.-2005.-С.160.
9. Бортко Н.М. Методология и методы психолого-педагогических исследований: учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / Н.М. Бортко, А.В. Моложавенко, И.А. Соловцова; под ред. Н.М. Бортко.-М.: Издательский центр «Академия», 2009.- С. 159-220.

ОСОБЕННОСТИ АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЗАМЕДЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ВБЛИЗИ СФЕРИЧЕСКОГО ФЕРРОПЛАЗМОННОГО НАНОКОМПОЗИТА

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Алимбеков И.Р., Неясов П.П.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Синтез гибридных металлоорганических наноструктур, сочетающих в себе свойства отдельных составляющих компонентов, с возможностями их взаимного влияния друг на друга, контроля состояния и оптимизации характеристик, особенно актуален при создании функциональных систем магнитоуправляемой молекулярной фотоники. В частности, предполагается, что такие системы позволят осуществлять магнитную модуляцию эффективности безызлучательного триплет-синглетного переноса энергии между молекулами, входящими в состав нанокompозита, посредством изменения условий протекания реакции триплет-триплетной аннигиляции (ТТА) экситонов или возбужденных электронных состояний молекул во внешнем магнитном поле или поле ферромагнитной наночастицы. В этой связи представляется важным создание гибридных наноструктур из металлических наночастиц (плазмонных и ферромагнитных), ассоциированных с органическими молекулами или квантовыми точками, а также макромолекулярными линкерами (экситоногенными или пассивными в отношении электронной активации). Одной из возникающих при этом задач является оптимизация параметров таких наноструктур для их эффективного функционирования. Вместе с ее решением необходимо детальное исследование влияния плазмонных наночастиц на выход замедленной флуоресценции, сопровождающей спин-селективную магнитоиндуцированную реакцию ТТА.

Постоянное внешнее магнитное поле

Вектор $\mathbf{p} = \tilde{\alpha}_e(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{E}_0$ электрического дипольного момента слоистого нанокompозита, находящегося в монохроматическом переменном внешнем поле с напряженностью $\mathbf{E}_0$ и постоянном однородном магнитном поле с индукцией $\mathbf{B}$ будет определяться тензором $\tilde{\alpha}_e$ электродипольной (ЭД) динамической поляризуемости [1]. Выражение для тензора $\tilde{\alpha}_e$ ЭД-поляризуемости слоистого сферического композита с внешним радиусом R_2 и замагниченной электронной плазмой сердцевинки радиуса R_1 ($\xi = R_1 / R_2 < 1$) впервые было получено в [2] строгими методами

$$\begin{aligned} \vec{\alpha}_e(\omega | \mathbf{B}) = & \\ = [(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + 2\varepsilon_2(\omega)\vec{\mathbf{I}})(\varepsilon_2(\omega) - \varepsilon_3) + (\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2(\omega)\vec{\mathbf{I}})(2\varepsilon_2(\omega) + \varepsilon_3)\xi^3] \times & \quad (1) \\ \times [(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) + 2\varepsilon_2(\omega)\vec{\mathbf{I}})(\varepsilon_2 + 2\varepsilon_3) + 2(\vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_2(\omega)\vec{\mathbf{I}})(\varepsilon_2(\omega) - \varepsilon_3)\xi^3]^{-1} R_2^3. & \end{aligned}$$

В случае неоднородного магнитного поля $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, создаваемого ферромагнитной частью композитной наночастицы, намагниченность электронной плазмы диэлектрической или парамагнитного металлического компонента оболочки в нулевом приближении может не приниматься во внимание ввиду слабой зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(\omega)$ от индукции $\mathbf{B}$. В альтернативном подходе эта зависимость все же может учитываться посредством введения в выражение (1) среднего по объему наноболочки модуля вектора $\langle B \rangle$ индукции магнитного поля вместо вектора $\mathbf{B}$.

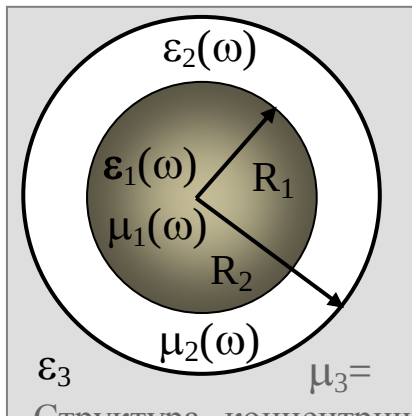


Рис. 1. Структура концентрического слоистого нанокompозита с ферромагнитным кором и проводящей диамагнитной оболочкой, помещенного в диэлектрическую среду с проницаемостью ε_3 .

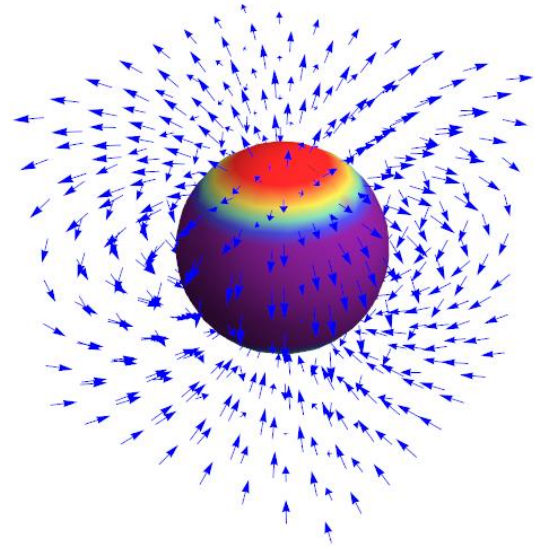


Рис. 2. Картина силовых линий магнитного поля, создаваемого ферромагнитной наночастицей радиуса R_1 снаружи $r > R_2$ слоистого нанокompозита.

Вектор $\mathbf{m} = \alpha_m \mathbf{H}_0$ магнитодипольного момента слоистого нанокompозита определяется через его магнитную дипольную (МД) поляризуемость α_m в поле напряженностью $\mathbf{H}_0$. Сферический слоистый нанокompозит, составленный из двух ферромагнитных материалов (например Fe-Co, или магнетит-Fe) характеризуется МД-поляризуемостью α_m , определяемой выражением, аналогичным (1) с заменой $\varepsilon_j \rightarrow \mu_j$ и тензорных проницаемостей скалярными

$$\alpha_m = \frac{[(\mu_1 + 2\mu_2)(\mu_2 - \mu_3) + (\mu_1 - \mu_2)(2\mu_2 + \mu_3)\xi^3]}{[(\mu_1 + 2\mu_2)(\mu_2 + 2\mu_3) + 2(\mu_1 - \mu_2)(\mu_2 - \mu_3)\xi^3]} R_2^3. \quad (2)$$

В случае полого ферромагнитного шара, т.е. ферромагнитной оболочки с проницаемостью μ_2 и $\mu_1 = \mu_3 = 1$ из (2) получаем

$$\alpha_m = \frac{(\mu_2 - 1)(1 + 2\mu_2)(1 - \xi^3)}{(\mu_2 + 2)(1 + 2\mu_2) - 2(\mu_2 - 1)^2 \xi^3} R_2^3. \quad (3)$$

Для шарового композита со структурой «ферромагнитный кор–плазменная оболочка», т.е. внешним слоем из хорошо проводящего диа- или парамагнитного металла, для которого $\mu_2 \approx 1$ получаем

$$\alpha_m = \frac{\mu_1 - 1}{\mu_1 + 2} R_1^3. \quad (4)$$

Магнитное поле $\mathbf{H}^{(e)}$ в области локализации реагирующих Т-молекул, формируется из двух частей: $\mathbf{H}^{(e)}(r, \theta) = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_m(r, \theta)$, где $\mathbf{H}_m(r, \theta)$ – поле магнитного диполя с моментом $\mathbf{m} = \alpha_m \mathbf{H}_0$, и имеет вид

$$\mathbf{H}^{(e)}(r, \theta) = \mathbf{H}_0 + \frac{\alpha_m}{r^3} \left[3 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \tilde{\mathbf{I}} \right] \mathbf{H}_0. \quad (5)$$

Наноккомпозит с ферромагнитным компонентом (ядром или кором) искажает однородное поле $\mathbf{H}_0$ вокруг наночастицы посредством наложения поля $\mathbf{H}_m(r, \theta)$ магнитного диполя. В результирующем неоднородном поле $\mathbf{H}^{(e)}$ становится важным градиентный механизм эволюции спиновых состояний молекулярной Т-Т-пары. Кинетика населенности $\rho_{00}(t) = \langle 00 | \rho | 00 \rangle$ благоприятного для ТТА синглетного спинового состояния пары формируется на основе нескольких, параллельно действующих механизмов [5]. В экваториальной зоне поле $\mathbf{H}^{(e)}$ будет ослаблено, а на полюсах – усилено.

На рис. 3-4 представлена динамика населенности парного синглетного состояния реагентов, находящихся вблизи поверхности ферромагнитного наноккомпозита, инициированная совместным действием трех механизмов, вызывающих перемешивание зеэмановских состояний Т-Т-пары: спин-спинового, градиентного и дельта-g-механизма. Расчеты показали на доминирующее действие градиентного (дельта В) механизма при размещении пары вдоль вектора градиента поля. Населенность $\rho_{00}(t) = \langle 00 | \rho | 00 \rangle$ определяет скорость аннигиляции $K_{ann}(B)$ Т-возбуждений, а вместе с ней и скорость генерации возбужденных синглетных состояний молекул люминофора, определяющую интенсивность замедленной флуоресценции (ЗФ) в результате ТТА. Тогда скорость $w_{DF}(\omega)$ излучения квантов аннигиляционной ЗФ может быть записана в виде $w_{DF}(\omega) = K_{ann}(B)n_T^2 N_\omega$, где N_ω – спектральная плотность числа излученных фотонов. Для скорости $w_{DF}(\omega)$ можем записать

$$w_{DF}(\omega) = \frac{1}{2} K_{ann}(B) n_T^2 \frac{1}{2\pi} \frac{w_{sp}^2(\omega) \Gamma}{[(\omega - \omega_{res})^2 + \Gamma^2]}, \quad (6)$$

где Γ – полуширина спектральной полосы молекулярной люминесценции. Таким образом, как это видно из (6), ферромагнитная часть нанокompозита влияет на константу скорости ТТА $K_{ann}(B)$ посредством магнитного поля (5), а его плазмонная часть – на скорость $w_{sp}(\omega)$ радиационного распада синглет-возбужденной молекулы вблизи наночастицы.

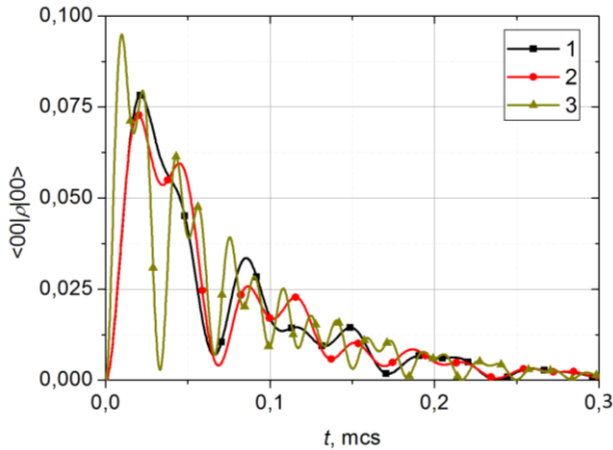


Рис. 3. Осцилляции населенности синглетного состояния Т-Т-пары молекул в окрестности ферромагнитного нанокompозита, вызванные одновременным действием нескольких механизмов: спин-спинового, градиентного и дельта-g-механизма. Расчет для различных значений параметра D тонкого взаимодействия в Т-молекуле: $2 \cdot 10^5$ (1), $2 \cdot 10^7$ (2), $2 \cdot 10^9$ (3) с^{-1} . $B_0 = 5$ мТл.

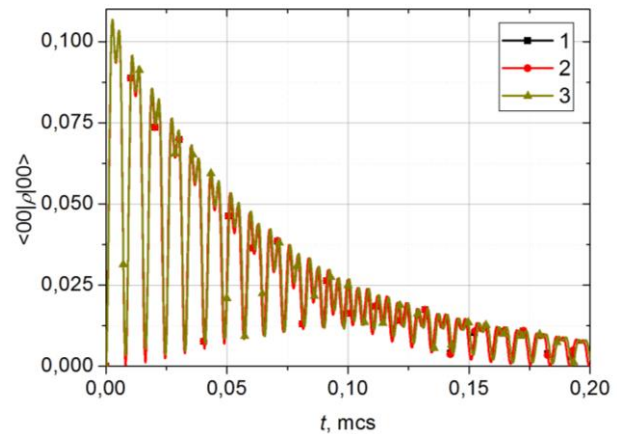


Рис. 4. Осцилляции населенности синглетного состояния Т-Т-пары молекул в окрестности ферромагнитного нанокompозита, вызванные одновременным действием нескольких механизмов: спин-спинового, градиентного и дельта-g-механизма. Расчет для различных значений параметра E тонкого взаимодействия в Т-молекуле: $2 \cdot 10^4$ (1), $2 \cdot 10^6$ (2), $2 \cdot 10^8$ (3) с^{-1} . $B_0 = 5$ мТл.

Выражение для скорости $w_{sp}(\omega|r)$ спонтанной эмиссии молекулы-партнера по аннигиляции, расположенной вблизи наночастицы на расстоянии r от ее центра, может быть записано в следующем виде [2-3]

$$w_{sp}(\omega|\mathbf{r}) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \left[\vec{\mathbf{I}} + \alpha_e(\omega) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \right] \mathbf{p}_M \right|^2, \quad (7)$$

где $\alpha_e(\omega)$ – дипольная поляризуемость наночастицы; $\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ – тензорная функция Грина $\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3} \left[3(\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) / r^2 - \vec{\mathbf{I}} \right]$ квазистатического поля дипольного источника; $\vec{\mathbf{I}}$ – единичный тензор; $\mathbf{p}_M$ – вектор электронного дипольного момента перехода в молекуле. На основе (7) был выполнен расчет частотных зависимостей

(спектров) скорости радиационного распада молекулы (рис. 5-6), а также зависимости этой скорости от частоты ω_{res} резонансного перехода в молекуле (рис. 5) и соотношения радиуса ферромагнитного кора и толщины плазмонной оболочки композита (рис.6). Расчет скорости (7) производился с учетом спектральной полосы излучения молекулы $G_M(\omega)$ в предположении о ее лоренцевой форме

$$G_M(\omega) = \frac{\Gamma_M^2}{(\omega - \omega_{res})^2 + \Gamma_M^2}. \quad (8)$$

Высокочастотный максимум на рис. 5 отвечает широкому плазмонному резонансу кобальтового ядра наночастицы, с растущей амплитудой по мере перемещения резонансной молекулярной частоты ω_{res} в область кобальтового резонанса (коэффициент диссипации $\gamma_{Co} = 9.6 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$). Одновременно с этим падает амплитуда узкого низкочастотного плазмонного резонанса, отвечающего золотой оболочке композита (коэффициент диссипации $\gamma_{Au} = 10^{14} \text{ с}^{-1}$).

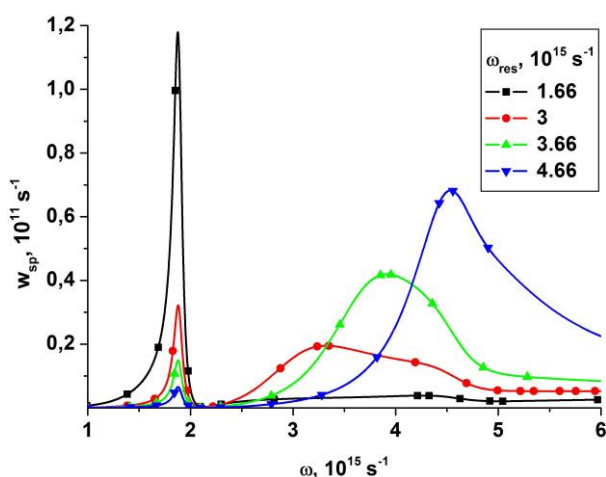


Рис. 5. Спектры скорости радиационного распада системы «молекула-слоистый нанокомпозит» для различных частот молекулярного перехода (на врезке) с учетом лоренцева фактора (8). $p = 55.0528 \cdot 10^{-18}$ ед. СГСЭ, $\Gamma = 6.37 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, $R_1 = 10 \cdot 10^{-7}$, $R_2 = 25 \cdot 10^{-7}$ см.

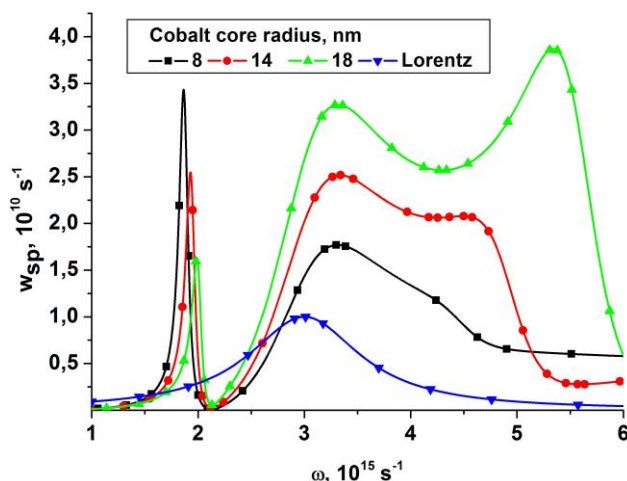


Рис. 6. Спектры скорости радиационного распада системы «молекула-слоистый нанокомпозит» для различных радиусов кобальтового кора (на врезке) и неизменном внешнем радиусе R_2 . Лоренцевой кривой представлена спектральная полоса молекулы.

На рис. 6 прослеживается рост кобальтового плазмонного резонанса ядра при увеличении его радиуса R_1 , ($R_2 = \text{const}$) с одновременным уменьшением толщины $\Delta = R_2 - R_1$ плазмонной оболочки и амплитуды ее плазмонного резонанса.

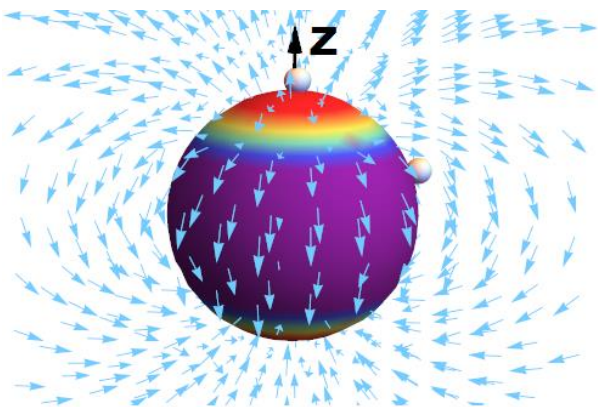


Рис. 7. Перемещение триплетных молекул (серые глобулы) по поверхности однородно намагниченной наночастицы в ее магнитном поле. Перемещения Т-молекул в виде диффузионных скачков осуществляются из экваториальной области в зону полюсов с локализацией в области потенциальной ямы. В ходе диффузии на частицу действует сносная сила (9).

В случае диполь-дипольного взаимодействия между магнитными моментами ферромагнитной наночастицы $\mathbf{m}$ и триплетной молекулы μ_T потенциал $V(\theta)$ такого взаимодействия определяется скалярным произведением $V(\theta) = -\mu_T \mathbf{B}(\theta)$, где вектор индукции поля $\mathbf{B}(\theta)$ определяется выражением $\mathbf{B}(\theta) = [3(\mathbf{m}\mathbf{n})\mathbf{n} - \mathbf{m}]R_0^{-3}$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$. Знак потенциала $V(\theta)$ зависит от взаимной ориентации векторов $\mathbf{m}$ и μ_T . В равновесной конфигурации вектор μ_T всегда коллинеарен вектору $\mathbf{B}(\theta)$. Быстрое выстраивание момента μ_T Т-молекулы вдоль вектора $\mathbf{B} = \mu_3 \mathbf{H}^{(e)}$ в сильных полях $B > 0.3$ Тл вовсе не связано с переориентацией молекулярного остова в пространстве. Направление электронного магнитного момента μ_T в сильных полях «привязано» к направлению вектора $\mathbf{B}$ безотносительно к ориентации остова молекулы. По этой причине $V(\theta) = -\mu_T |\mathbf{B}(\theta)|$, где $|\mathbf{B}(\theta)| = -m\mu_T R^{-3} \sqrt{1 + 3\cos^2 \theta}$, как показано на рис. 8. По данным [3] величина магнитного момента $\mathbf{m}$ ферромагнитной наночастицы составляет 10^3 - $10^4 \mu_B$, где μ_B – магнетон Бора, что соответствует индукции поля B на поверхности наночастицы свыше 30 Тл. Это отвечает глубине потенциальной ямы $\Delta V = m\mu_T / R_0^3$ около 10^{-2} эВ, т.е. сравнимо с величиной ван-дер-ваальсового взаимодействия, или даже превышает его. Сила, вызывающая перемещение Т-молекулы из экваториальной зоны в область полюсов (рис. 7) определяется выражением [4]

$$F(\theta) = -\frac{3}{2} \frac{m\mu_T}{R_0^4} \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{1 + 3\cos^2 \theta}}. \quad (9)$$

Данный тип потенциального поля отличается тем, что яма большей глубины формируется не в области «экватора», а в области полюса. Это обстоятельство позволяет рассматривать необратимые прыжки Т-молекул из экваториальной зоны в зону полюсов.

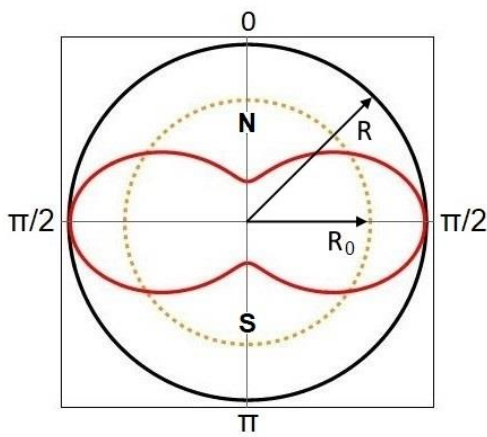


Рис. 8. Профиль потенциального поля в сферической наночейке с глобулярной ферромагнитной частицей, отвечающего диполь-дипольному взаимодействию магнитных моментов наночастицы и триплетной молекулы. Ось SN определяется ориентацией магнитного момента наночастицы. Потенциальные ямы глубиной $\Delta V = m\mu_T / R^3$ формируются на полюсах S и N. В области экватора потенциальная яма не образуется, но возникает характерное кольцевое «плато» с неустойчивым положением равновесия в средней его части ($\theta = \pi/2$).

Переменное магнитное поле

В переменном поле $\mathbf{H}_0(i\omega t)$ за счет индуцированных токов в проводнике возникает магнитный момент $\mathbf{m}(t) = \alpha_m(\omega)\mathbf{H}_0(t)$, где динамическая магнитная поляризуемость $\alpha_m(\omega)$ определяется выражениями [5]

$$\alpha_m(\omega) = \alpha'_m(\omega) + i\alpha''_m(\omega) = -\frac{1}{2} \left[1 - \frac{3}{(kR)^2} + \frac{3}{kR} \text{ctg}(kR) \right] R^3. \quad (10)$$

$$\alpha'_m(\omega) = -\frac{1}{2} \left[1 - \frac{3\delta}{2R} \frac{\text{sh}(2R/\delta) - \sin(2R/\delta)}{\text{ch}(2R/\delta) - \cos(2R/\delta)} \right] R^3. \quad (11)$$

$$\alpha''_m(\omega) = -\frac{3\delta^2}{4R^2} \left[1 - \frac{R}{\delta} \frac{\text{sh}(2R/\delta) + \sin(2R/\delta)}{\text{ch}(2R/\delta) - \cos(2R/\delta)} \right] R^3. \quad (12)$$

В формулах (10)-(12) $k(\omega) = \sqrt{2\pi\sigma\omega}(1+i)/c$, где проводимость металла $\sigma = \omega_{pl}^2/(4\pi\gamma)$. Толщина скин-слоя $\delta = (1+i)/k(\omega) = c/\sqrt{2\pi\sigma\omega}$. Для серебра при частоте $\omega = 10^{14} \text{ с}^{-1}$ получаем $\delta = 24 \text{ нм}$. На частотах порядка плазменной частоты это значение толщины скин-слоя уменьшается на порядок.

В пределе малых частот ($\delta \gg R$) выражения (11) и (12) переходят в

$$\alpha'_m(\omega) = -\frac{4}{315} \left(\frac{R}{\delta} \right)^4 R^3 = -\frac{(4\pi)^2 R^7 \sigma^2 \omega^2}{315c^4}. \quad (13)$$

$$\alpha''_m(\omega) = \frac{1}{15} \left(\frac{R}{\delta} \right)^2 R^3 = \frac{2\pi\sigma\omega}{15c^2} R^5. \quad (14)$$

В случае больших частот ($\delta \ll R$) из (11) и (12) получаем

$$\alpha'_m(\omega) = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{3\delta}{2R} \right) R^3 = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{3c}{2R\sqrt{2\pi\sigma\omega}} \right) R^3. \quad (15)$$

$$\alpha_m''(\omega) = \frac{3}{4} \delta \cdot R^2 = \frac{3}{4} \frac{c}{\sqrt{2\pi\sigma\omega}} R^2. \quad (16)$$

Таким образом, в случае переменного поля магнитный момент в наночастице $\mathbf{m}(t) = \alpha_m(\omega)\mathbf{H}_0(t)$ будет возникать не только (и не столько) из-за наличия в ее структуре ферромагнитного компонента, но и при наличии только лишь хорошо проводящего диа- или парамагнитного металлического компонента, т.е. плазменной части наночастицы. Результирующее квазистационарное поле по-прежнему, как и в стационарном случае, представляет собой суперпозицию однородного поля и поля магнитного диполя. В образовавшемся магнитном поле будут иметь место все те эффекты неоднородного поля в реакции ТТА, которые наблюдались нами ранее [6] в случае постоянного магнитного поля.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № 0743-2017-0001(3.7758.2017/8.9), а также Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-43-560003) и администрации Оренбургской области.

Список литературы

1 *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.

2 **Кучеренко М.Г. Локализованные плазмоны в замагниченном нанополитре и сферическом слоистом композите с анизотропной сердцевинной или оболочкой** // Универ. комплекс как регион. центр образов., науки и культуры: матер. Всеросс. научно-методич. конфер. – Электрон. дан. – Оренбург: ОГУ, 2016. – С. 1220-1227.

3 *Ивичева С.Н., Каргин Ю.Ф., Овченков Е.А., Кокшаров Ю.А., Юрков Г.Ю.* Свойства 3D-композитов на основе опаловых матриц и магнитных частиц // Физика твердого тела. 2011. –Т. 53. Вып 6. –С. 1053-1058.

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, № 1. С. 33-48.

5 *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.

6 *Кучеренко М. Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П.* Спин-селективная кросс-аннигиляция электронных состояний мобильных триплетных молекул на поверхности ферромагнитной наночастицы // Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2019. – С. 2896-2902.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И МД-СИМУЛЯЦИЯ КОНФОРМАЦИЙ ПЕРЕСТРОЙКИ ПОЛИАМФОЛИТНОЙ ЦЕПИ НА ПОЛЯРИЗОВАННОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЕ

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Неясов П.П.
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Представлена математическая модель формирования конформационных перестроек адсорбированной макроцепи полиамфолита, вызванных распределенными электрическими зарядами на поверхности поляризованной металлической сферической наночастицы. Получены выражения для радиально-углового распределения плотности звеньев адсорбированной макроцепи в однородном СВЧ-поле во втором порядке теории возмущений по полю. Предполагалась, что напряженность СВЧ-поля изменяется адиабатически медленно по сравнению с характерными частотами конформационных переходов макроцепи. Анализ результатов моделирования позволил обнаружить появление конформаций полиамфолитных макромолекул, значительно отличающихся от случаев неполяризованной нейтральной наночастицы, а также равномерно заряженной по поверхности наночастицы.

В работе построена математическая модель формирования конформационных перестроек адсорбированной макроцепи полиамфолита, вызванных распределенными электрическими зарядами на поверхности поляризованной сферической наночастицы (НЧ). Поляризация частицы возникала в результате воздействия на нее внешнего микроволнового поля. При помещении сферической наночастицы в однородное СВЧ-поле шаровая симметрия системы утрачивается, а потенциал поля получает зависимость от угловой переменной θ . Ранее, в ряде работ авторов [1-3] для сферически-симметричного случая было показано, что в случае физической – ван-дер-ваальсовой адсорбции адсорбционный потенциал стенок наночастиц может быть эффективно представлен комбинацией простейших модельных потенциалов $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$ вида «твердая стенка – дельта-функциональная яма» (R – радиус НЧ). Монохроматическое СВЧ-поле $E(t) = E_0 \exp(-i\omega t)$ поляризует наночастицу, и тогда к адсорбционному потенциалу $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$ добавляется как потенциал самого СВЧ-поля, так и потенциал поляризованной поверхности глобулы $V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta)$. В итоге

$$V(\mathbf{r}) = V_1(r) + V_2(r, \theta) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0) - eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta), \quad (1)$$

где

$$V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + 2\varepsilon_2} R^3 eE_0 \frac{\cos \theta}{r^2}. \quad (2)$$

Диэлектрические проницаемости $\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2$ в поляризационном потенциале (2) характеризуют металл частицы и окружающую среду, соответственно. Равновесные конфигурации адсорбированной макроцепи в идеализированной модели, исключающей объемные взаимодействия звеньев, задаются конформационной функцией $\psi(\mathbf{r})$, определяющей плотность мономеров $n(\mathbf{r}) = \psi^2(\mathbf{r})$, и являющейся решением дифференциального уравнения шредингеровского типа [4]

$$\frac{a^2 kT}{6} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = [V(\mathbf{r}) - \varepsilon] \psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где a – размер звена цепи, kT – энергия теплового кванта. В случае слабого СВЧ-поля учет потенциала (2) может быть произведен в рамках теории возмущений. Однако использование в качестве функций нулевого приближения ранее определенных в [1,2] функций $\psi_0(r)$ со сферической симметрией не может обеспечить требуемый результат. Как уже было отмечено, уравнение (3) с потенциалом (1) содержит угловую переменную, поэтому его следует записывать в виде

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \psi(\mathbf{r}) = [V(\mathbf{r}) - \varepsilon] \psi(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Решение (4) может быть представлено в виде $\psi(\mathbf{r}) = F(r)P_l(\cos \theta)$, где $P_l(\cos \theta)$ – полином Лежандра порядка l . Тогда, с учетом спектра собственных значений $-l(l+1)$ для полиномов Лежандра, для радиальной функции $F_l(r)$ получаем уравнение

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] F_l(r) = [V(r) - \varepsilon_l] F_l(r). \quad (5)$$

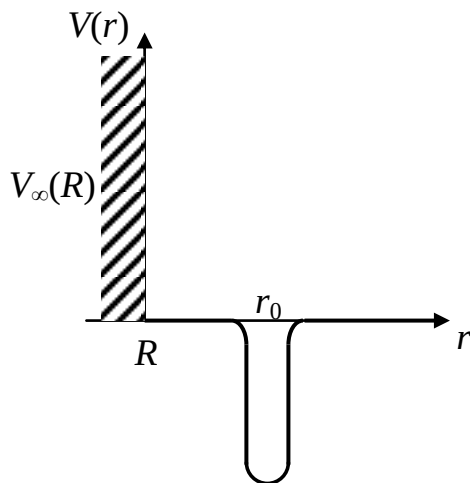


Рис. 1. Адсорбционный потенциал в виде δ -функциональной ямы с бесконечно высокой стенкой.

Здесь в (5) радиальный потенциал $V(r) = V_1(r) + V_2(r)$, а $V_2(r)$ определен соотношением $V_2(r, \theta) = V_2(r)P_l(\cos \theta)$, или

$$V_2(r, \theta) = - \left[1 - \alpha'(\omega) \left(\frac{R}{r} \right)^3 \right] r E_0 P_1(\cos \theta). \quad (6)$$

Сферически-симметричное ($l=0$) решение уравнения (3) Гросберга-Хохлова [4] для сферической наночастицы и дельта-функционального потенциала притяжения с от-

талкивающей стенкой $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$ (рис. 1) имеет вид [2, 3] ($A = \text{const}$)

$$\psi(r) = A \frac{\exp(-qr)[\exp(2qr_0) - \exp(2qR)]}{2qr} \quad r_0 < r < \infty, \quad (7)$$

где параметр q является корнем уравнения $q = \frac{3\alpha}{a^2 k_B T} [1 - \exp(2q(R - r_0))]$.

(8)

Построим, теперь, зависящие от угла θ функции $\psi(\mathbf{r})$ нулевого приближения, то есть решения уравнения (4) с потенциалом $V(r) = V_1(r)$, без поляризующего поля. Используя для радиальной функции $F_l(r)$ подстановку $F_l(r) = f_l(r) / \sqrt{r}$ для функции $f_l(r)$ получаем уравнение

$$f_l''(r) + \frac{1}{r} f_l'(r) - \left[\frac{(l+1)l + 1/4}{r^2} \right] f_l(r) = \frac{6}{a^2 kT} [V_1(r) - \varepsilon_l] f_l(r). \quad (9)$$

Учитывая, что $(l+1)l + 1/4 = (l+1/2)^2$, от (9) приходим к уравнению Бесселя для цилиндрических функций $Z_{l+1/2}(\xi)$ с полуцелым индексом. Таким образом, решением (9) являются модифицированные функции Бесселя $I_{l+1/2}(q_l r)$ и $K_{l+1/2}(q_l r)$, $\xi = q_l r$, $q_l^2 = -\frac{6\varepsilon_l}{a^2 kT}$. В качестве парциальных решений уравнения (5) с определенным индексом l в поле $V(r) = V_1(r)$ можем записать следующие

$$\begin{cases} F_l^I(r) = A_l \frac{I_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}} + B_l \frac{K_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}}, & R < r < r_0 \\ F_l^{II}(r) = C_l \frac{K_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}. \quad (10)$$

Постоянные A_l , B_l и C_l находим из тех соображений, что ψ -функции должны удовлетворять следующим граничным условиям

$$\psi_I(R) = 0, \quad \psi_I(r_0) = \psi_{II}(r_0), \quad \psi_{II}'(r_0) - \psi_I'(r_0) = -\frac{6\alpha}{a^2 kT} \psi_{II}(r_0). \quad (11)$$

Последнее уравнение позволяет определить единственный дискретный уровень спектра ε_l для каждого l . При $l=0$ приходим к уже исследованной ранее задаче и сферически-симметричным функциям (7), которые, теперь, представлены через функции Бесселя $I_{1/2}(q_0 r)$ и $K_{1/2}(q_0 r)$, в эквивалентной (7) форме

$$\begin{cases} \psi_I^{(l=0)}(r) = A_0 \frac{I_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} + B_0 \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & R < r < r_0 \\ \psi_{II}^{(l=0)}(r) = C_0 \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (7')$$

Учитывая, что $I_{1/2}(\xi) = \sqrt{\frac{2}{\pi\xi}} \text{sh}\xi$, $K_{1/2}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2\xi}} \exp(-\xi)$ легко приходим от (7') к (7), с параметром q_0 , определяемым уравнением (8).

При $l=1$ из (10) получаем

$$\begin{cases} \psi_I^{(l=1)}(r, \theta) = \left[A_1 \frac{I_{3/2}(q_1 r)}{\sqrt{r}} + B_1 \frac{K_{3/2}(q_1 r)}{\sqrt{r}} \right] P_1(\cos \theta), & R < r < r_0 \\ \psi_{II}^{(l=1)}(r, \theta) = C_1 \frac{K_{3/2}(q_1 r)}{\sqrt{r}} P_1(\cos \theta), & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (12)$$

Заметим, что плотность $n(r) = \psi^2(r)$ звеньев адсорбированной макроцепи будут по-прежнему определять функции (7) или эквивалентные им (7'), а не (12), т.к. собственные значения ε_1 , соответствующие (12), имеют больший модуль, чем ε_0 . Кроме того, обратим внимание и на тот факт, что поправки первого порядка к ε_0 , при учете возмущения $V_2(r, \theta) = -eE_0 r \cos \theta + V_p(r, \theta)$ равны нулю для состояний (7) и (7'). Корректное использование теории возмущений Релея-Шредингера требует учета состояний (12) для уточнения базисного состояния (7').

В общем случае произвольного индекса l для определения параметров q_l и ε_l (важный случай $l=1$) необходимо воспользоваться уравнением из (8)

$$\frac{d}{dr} F_l^{II}(r) \big|_{r=r_0} - \frac{d}{dr} F_l^I(r) \big|_{r=r_0} = - \frac{6\alpha}{a^2 kT} F_l^{II}(r_0). \quad (13)$$

Из (10) и (11) находим соотношения между константами A_l , B_l и C_l :

$$B_l = -A_l \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)}, \quad C_l = A_l \left[\frac{I_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)} \right]. \quad (14)$$

Тогда (10) принимает вид

$$\begin{cases} F_l^I(r) = A_l \left[\frac{I_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)} \frac{K_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_l^{II}(r) = A_l \left[\frac{I_{l+1/2}(q_l r_0)}{K_{l+1/2}(q_l r_0)} - \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)} \right] \frac{K_{l+1/2}(q_l r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}. \quad (10')$$

Подставляя (10') в (13) получаем общее трансцендентное уравнение для собственных значений q_l

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha r_0} = I_{l+1/2}(q_l r_0) K_{l+1/2}(q_l r_0) - K_{l+1/2}^2(q_l r_0) \frac{I_{l+1/2}(q_l R)}{K_{l+1/2}(q_l R)}. \quad (15)$$

Теория возмущений второго порядка по СВЧ-полю

Учитывая ортогональность полиномов Лежандра с различными индексами l и структуру угловой зависимости оператора возмущения $V_2(r, \theta) \sim \cos \theta$, замечаем, что вклад в поправки базисного состояния $\psi_{I,II}^{(l=0)}(r)$ будут вносить только функции (12) с $l=1$. Исправленное базисное состояние $\psi_{I,II}^{(l=0)}(r)$ во втором порядке по малому параметру $\eta = eE_0 a / |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$ может быть записано в виде

$$\begin{cases} \psi_I(r, \theta) = \psi_I^{(l=0)}(r) + \frac{\langle \psi_I^{(l=0)} | V_2 | \psi_I^{(l=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_I^{(l=1)}(r, \theta) - \frac{1}{2} C_I^{(2)} \psi_I^{(l=0)}(r), & R < r < r_0 \\ \psi_{II}(r, \theta) = \psi_{II}^{(l=0)}(r) + \frac{\langle \psi_{II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{II}^{(l=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_{II}^{(l=1)}(r, \theta) - \frac{1}{2} C_{II}^{(2)} \psi_{II}^{(l=0)}(r), & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (16)$$

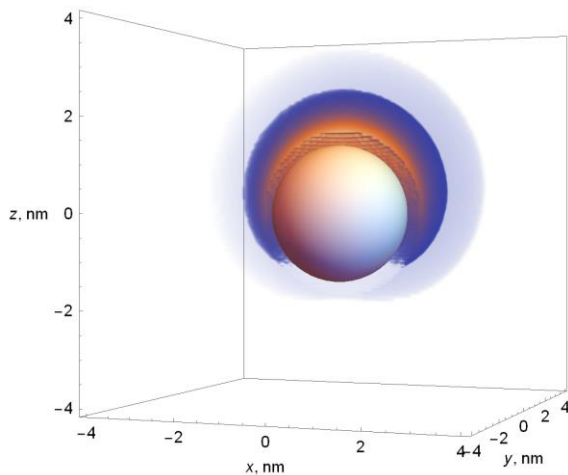


Рис. 2. Деформация макроцепной опушки полипептида на поверхности золотой наночастицы в поляризующем внешнем поле частоты $\omega = 5.30 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Расчет плотности звеньев произведен на основе выражения (18). Значения параметров: $e' = 0.7e$ (заряд звена); $a = 0.5$, $R = 1.5$, $r_0 = 1.8 \text{ нм}$; $\omega_p = 1.37 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$; $\varepsilon_2 = 4$; $A_0 = A_1 = 1$; $\alpha = 0.005 \text{ эВ} \cdot \text{нм}$; $k = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К}$; $T = 300 \text{ К}$; $E_0 = 3 \cdot 10^5 \text{ В/см}$; $q_0 R = 1.758$; $q_1 R = 1.419$.

Проект № 0743-2017-0001(3.7758.2017/8.9).

Поправки второго порядка с коэффициентами $C_{I,II}^{(2)}$ в (16) не привносят ожидаемую угловую зависимость в базисное состояние и поэтому они могут быть опущены. Однако радиально-угловое распределение плотности звеньев макроцепи как квадратичная форма от (16) содержит члены второго порядка малости по параметру $\eta = eE_0 a / |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$

$$n_I(r, \theta) = n_I^{(l=0)}(r) + 2 \frac{\langle \psi_I^{(l=0)} | V_2 | \psi_I^{(l=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_I^{(l=0)}(r) \psi_I^{(l=1)}(r, \theta) +$$

$$+ \frac{\left| \langle \psi_I^{(l=0)} | V_2 | \psi_I^{(l=1)} \rangle \right|^2}{|\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}|^2} \left| \psi_I^{(l=1)}(r, \theta) \right|^2, \quad R < r < r_0 \quad (17)$$

$$n_{II}(r, \theta) = n_{II}^{(l=0)}(r) + 2 \frac{\langle \psi_{II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{II}^{(l=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_{II}^{(l=0)}(r) \psi_{II}^{(l=1)}(r, \theta) +$$

$$+ \frac{\left| \langle \psi_{II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{II}^{(l=1)} \rangle \right|^2}{|\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}|^2} \left| \psi_{II}^{(l=1)}(r, \theta) \right|^2, \quad r_0 < r < \infty. \quad (18)$$

Собственные значения ε_l находим из уравнения $\varepsilon_l = -q_l^2 a^2 kT / 6$, а коэффициенты $\langle \psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle$ представляют собой следующие интегралы

$$\langle \psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle = \begin{cases} \int_R^{r_0} F_0^I(r) V_2(r) F_1^I(r) r^2 dr, & I: R < r < r_0 \\ \int_{r_0}^{\infty} F_0^{II}(r) V_2(r) F_1^{II}(r) r^2 dr, & II: r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (19)$$

где радиальные функции $F_{l=0,1}^{I,II}(r)$ определены выражениями (10). Интегралы (19) вычисляются от комбинаций показательных и степенных функций.

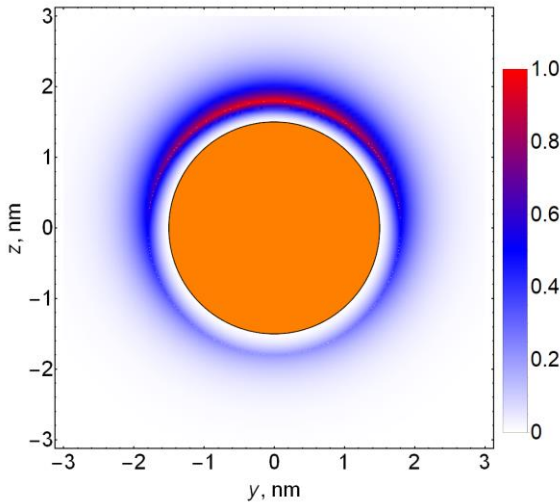


Рис. 3. Асимметричное вытягивание опушечного слоя в области полюса поляризованного поля E_0 металлической Au-наночастицы. Расчет $n(\mathbf{r})$ по (17)-(18). Частота поляризующего внешнего поля $\omega = 5.30 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$. Имеет место увеличение толщины опушки и плотности числа звеньев на верхнем полюсе и их уменьшение – на противоположном. Значения параметров: заряд звена макроцепи $e' = 0.3e$; $a = 0.5$, $R = 1.5$, $r_0 = 1.8 \text{ нм}$; $A_0 = A_1 = 1$; $\omega_p = 1.37 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$; $\varepsilon_2 = 4$; $\alpha = 0.005 \text{ эВ} \cdot \text{нм}$; $k = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ эВ/К}$; $T = 300 \text{ К}$; $q_0 R = 1.758$; $q_1 R = 1.419$; $E_0 = 3 \cdot 10^5 \text{ В/см}$.

Выражения (17) и (18) для радиально-углового распределения плотности звеньев адсорбированной макроцепи могут быть записаны в виде

$$n_I(r, \theta) = n_I^{(l=0)}(r) + n_I^{(1)}(r) \cos \theta + n_I^{(2)}(r) \cos^2 \theta, \quad R < r < r_0, \quad (20)$$

$$n_{II}(r, \theta) = n_{II}^{(l=0)}(r) + n_{II}^{(1)}(r) \cos \theta + n_{II}^{(2)}(r) \cos^2 \theta, \quad r_0 < r < \infty, \quad (21)$$

где

$$n_{I,II}^{(1)}(r) = 2 \frac{\langle \psi_{I,II}^{(l=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(l=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} F_0^{I,II}(r) F_1^{I,II}(r), \quad n_{I,II}^{(2)}(r) = \frac{|\langle \psi_I^{(l=0)} | V_2 | \psi_I^{(l=1)} \rangle|^2}{|\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}|^2} |F_1^{I,II}(r)|^2. \quad (22)$$

Результаты расчетов радиально-угловых зависимостей плотности звеньев полиамфолита на основе (20)-(21) приведены на рис. 4 с шагом по углу $\Delta\theta = \pi / 6$.

Было произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование наносистемы (рис. 5), состоящей из поляризованной наночастицы Au радиусом 1.5 нм с адсорбированными на ней полиамфолитными полипептидами с разными законами распределения положительных и отрицательных аминокислотных остатков макроцепи размером от 300 до 400 звеньев. МД-моделирование выполнено на основе программного комплекса NAMD 2.13. Для полипептидов было использовано силовое поле CHARMM22, а взаимодействие с золотой наночастицей описывалось потенциалом Леннард-Джонса, который ограничивался 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 более удаленных зарядов использовался метод «частица-сетка Эвальда» (PME) с шагом сетки 0.11 нм. Вся молекулярная система помещалась в куб со сторонами 20 нм, заполненный молекулами воды (TIP3P). Модель золотой наночастицы была получена путем вырезания шара радиусом 1.5 нм из кристалла золота. Поляризация сферической наночастицы в электрическом поле задавалась через изменение по закону косинуса поверхностной плотности заряда. Были использованы следующие значения суммарного дипольного момента наночастицы: $p_{0.25} = 2.73$, $p_{0.50} = 5.46$ и $p_{1.00} = 10.92$ кД. При этих значениях момента, полюсы наночастицы несли парциальные заряды: 0.25, 0.5 и 1e соответственно.

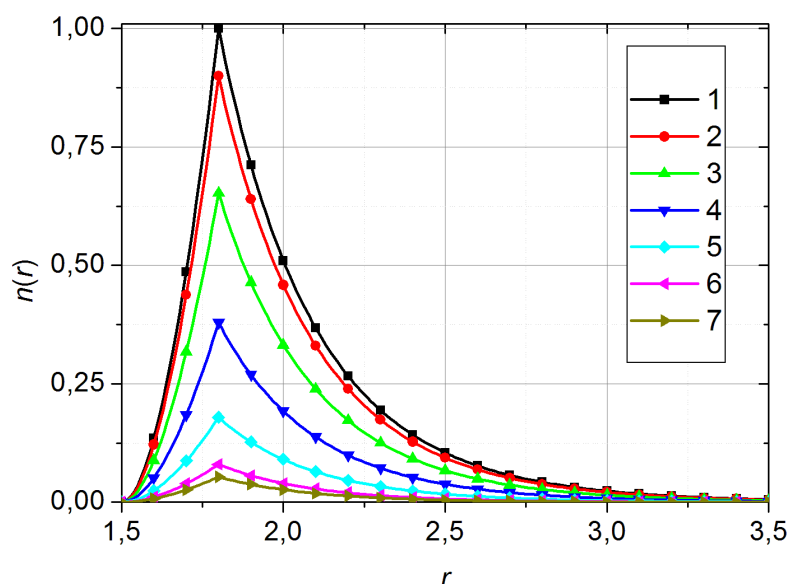


Рис. 4. Радиальные зависимости плотности звеньев полиамфолита. $e' = 0.5e$; $a = 0.5$, $R = 1.5$, $r_0 = 1.8$ нм; $A_0 = A_1 = 1$; $\omega_p = 1.37 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$; $\varepsilon_2 = 4$; $\alpha = 0.005$ эВ·нм; $k = 8.62 \cdot 10^{-5}$ эВ/К; $T = 300$ К; $q_0 R = 1.758$; $q_1 R = 1.419$; $E_0 = 3 \cdot 10^5$ В/см.

Произведен расчет средней радиальной плотности атомов полипептида в направлениях положительно и отрицательно заряженных полюсов поляризованной наночастицы, а также в ее экваториальной области. По мере увеличения дипольного момента наночастицы происходила перестройка конформационной структуры адсорбированной полиамфолитной макроцепи. Заряженные аминокислотные остатки смещались к соответствующим по знаку полюсам. Кроме того, степень вытягивания опушки макроцепи в районе полюсов зависела от расстояния между противоположно заряженными звеньями. Такая перестройка конформационной структуры начинала происходить при значении дипольного момента наночастицы $p_{0.50}$, при меньших значениях дипольного момента такие конформационные изменения были выражены слабо. Видно, что для полипептида A200R50D50 (рис. 5а) с наименьшим расстоянием между положительными и отрицательными звеньями смещение макромолекулярной опушки в направлении поляризации выражено слабее, чем для полипептидов A240R30D30 (рис. 5б). По мере увеличения расстояния между положительными и отрицательными звеньями полипептида наблюдается «выбрасывание» значительных по длине петель макроцепи в направлении оси поляризации.

На рис. 6 изображены радиальные распределения средних плотностей атомов полипептидов A200R50D50 (рис. 6а и 6б) на поверхности неполяризованной и поляризованной золотой наночастицы. На рисунке 6а представлены радиальные распределения средней плотности атомов полипептида на поверхности неполяризованной наночастицы. Видно, что радиальные зависимости средней плотности по типам звеньев в целом повторяют радиальный профиль плотности по всем атомам полипептида.

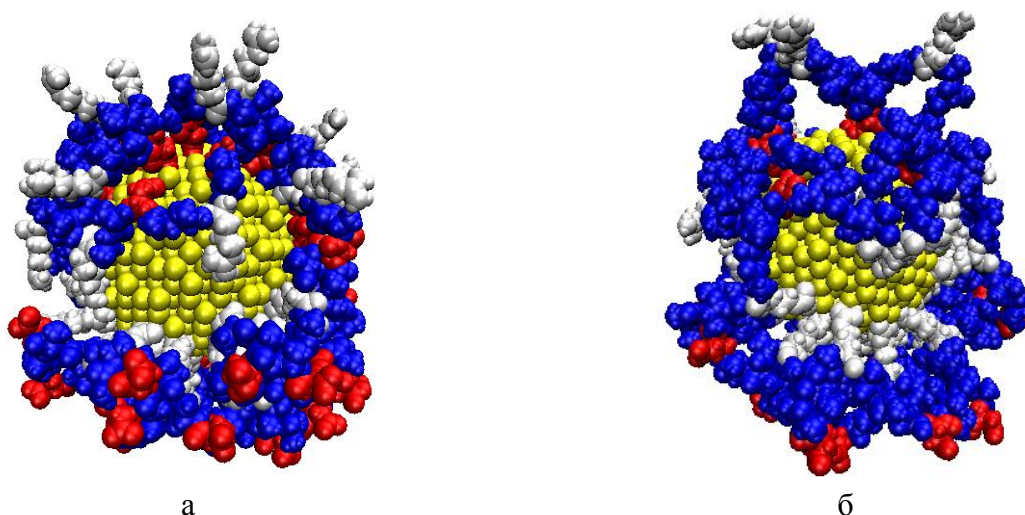


Рис. 5. Конформации 300-звенных полипептидов (ПП) A200R50D50 (а), A240R30D30 (б) на поверхности поляризованной золотой наночастицы радиусом 1.5 нм. Состав ПП по числу звеньев: 240 ALA, 30 ARG и 30 ASP: ALA240ARG30ASP30. Конформация (б) ПП возникала в результате МД-моделирования при поляризации наночастицы в вертикальном направлении с дипольным моментом $p_{1,00}$. Синим изображены звенья Ala, белым – Arg, красным – Asp.

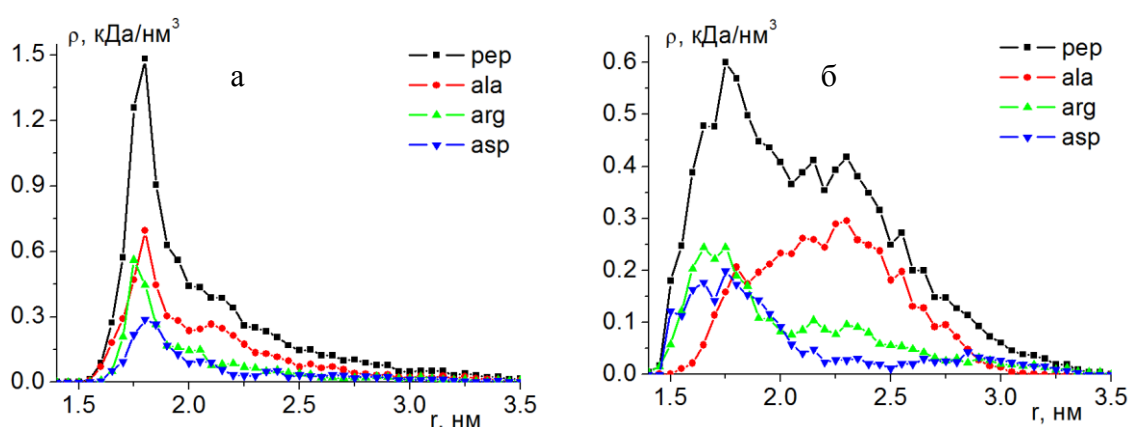


Рис. 6. Радиальные зависимости средней плотности атомов полипептидов A200R50D50 (а, б) на поверхности непolarизованной (а) и поляризованной (б) с дипольным моментом $p_{1,00}$ золотой наночастицы с дифференциацией по типам звеньев. Обозначения на рис.: пер – зависимость средней плотности по всем атомам полипептида; ala, arg и asp – усредненные радиальные плотности по типам аминокислотных остатков.

На рис. 6б представлены радиальные распределения плотности полипептида на поверхности сильно поляризованной (дипольный момент $p_{1,00}$) наночастицы. Видно, что в этом случае максимум радиальной плотности заряженных звеньев Arg и Asp полипептида находится у поверхности наночастицы, а максимум средней радиальной плотности уменьшился более чем в два раза.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проек-

та № 0743-2017-0001(3.7758.2017/8.9), а также Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-43-560003) и администрации Оренбургской области.

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Размещение звеньев полимерной цепи в поле гладкой твердой поверхности и в нанополостях пористого сорбента // Вестник ОГУ. 2008.-№9. -С. 177-184.
2. Кучеренко М.Г., Кручинин Н.Ю., Чмерева Т.М. Кинетика квазистатического тушения возбужденных центров приповерхностного слоя сегментами макромолекулярных цепей в нанопорах и вблизи наночастиц // Вестник ОГУ. 2010. -№5. -С. 124-135.
3. Кучеренко М.Г., Измоденова С.В., Чмерева Т.М., Кручинин Н.Ю., Подрезова Н.С. Кинетика диффузионно-контролируемых фотореакций в приповерхностном слое фуллерен-тубуленовой наночастицы с адсорбированной полимерной цепью // Вестник ОГУ. 2013. №9 (158). С. 100-109.
4. Гросберг А. Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1989. -344 с.

ПЛАЗМОННАЯ ИНИЦИАЦИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ И ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ВБЛИЗИ ПЛОСКОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ. ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ И КВАНТОВЫЕ МОДЕЛИ

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

В случае, когда активируемые молекулы размещены над сплошной металлической пленкой достаточно большой толщины, с целью получения выражений для локальных напряженностей поля и вслед за этим – скорости межмолекулярного безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения (БПЭЭВ), а также интенсивности люминесценции этих молекул, удобно воспользоваться методом построения изображений дипольных источников поля [1-2].

Дипольные моменты $\mathbf{p}_D$, $\mathbf{p}_{\text{Im}}$ донора и его изображения связаны друг с другом следующим соотношением $\mathbf{p}_{\text{Im}} = L(\omega)(\mathbf{p}_D - 2\mathbf{n}_z p_{Dz})$, где $\mathbf{n}_z$ – единичный вектор нормали к поверхности металла. Квазистатический фактор Лоренца $L(\omega)$ для двух сред с плоской границей раздела имеет вид

$$L(\omega) = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega)}, \quad (1)$$

где ε_1 – диэлектрическая проницаемость среды над проводником, а комплексная диэлектрическая проницаемость $\varepsilon_2(\omega)$ металла в модели Друде-Лоренца $\varepsilon_2(\omega) = 1 - \omega_{pl}^2 / [\omega(\omega^2 + i\gamma)]$, где $\omega_{pl} = \sqrt{4\pi Ne^2/m}$ – объемная плазменная частота (m , e – масса и заряд электрона, N – концентрация свободных электронов), вычисляется на частоте ω электронного перехода в молекуле донора.

Напряженность поля $\mathbf{E}_1(\rho, \phi, z | \omega) = \mathbf{E}_p(\rho, \phi, z | \omega) + \mathbf{E}_{\text{Im}p}(\rho, \phi, z | \omega)$, создаваемого диполем и его изображением в области $z > 0$, не заполненной металлом, определяет скорость $U_{DA} \sim (\mathbf{p}_A \mathbf{E}_1(z_A, \rho_{DA}, \phi))^2$ безызлучательного переноса энергии от возбужденной молекулы-донора к молекуле-акцептору с дипольным моментом перехода $\mathbf{p}_A$, расположенной в точке $\mathbf{r}_A = \mathbf{r}_A(z_A, \rho_{DA}, \phi)$.

Выражение для скорости переноса может быть приведено к виду, содержащему помимо геометрических величин лишь экспериментально измеряемые характеристики: спектральный контур $F_D(\omega)$ люминесценции донора и спектр $\mu_A(\omega)$ поглощения акцептора [1]

$$U_{DA}(z_D, z_A, R, \Omega_{DA}) = \frac{9c^4}{8\pi n_A \tau_D} \frac{\chi^2(\Omega_{DA})}{[(z_D - z_A)^2 + R^2]^3} \int F_D(\omega) \mu_A(\omega) \frac{d\omega}{\omega^4} + \frac{9c^4}{8\pi n_A \tau_D} \frac{\chi^2(\Omega_{ImA})}{[(z_D + z_A)^2 + R^2]^3} \times \quad (2)$$

$$\int \left[|L(\omega)|^2 + 2 \operatorname{Re}[L(\omega)] \frac{\chi(\Omega_{DA})}{\chi(\Omega_{ImA})} \left(\frac{(z_D + z_A)^2 + R^2}{(z_D - z_A)^2 + R^2} \right)^{3/2} \right] F_D(\omega) \mu_A(\omega) \frac{d\omega}{\omega^4}$$

Здесь $r_{DA} = \sqrt{(z_D - z_A)^2 + R^2}$ – расстояние между точечными диполями донора и акцептора, а также расстояние $r = \sqrt{(z_D + z_A)^2 + R^2}$ между диполем-изображением донора $\mathbf{p}_{Im}$ и акцептором. Расстояние z отсчитывается от поверхности металла до слоя, в котором размещены молекулы люминофоров (D и A), а радиус r проведен от донорного центра к акцепторному и расположен в плоскости молекулярного слоя. При вертикальном размещении молекул D-A-пары – вдоль нормали $\mathbf{n}_z$: $R=0$, $z_D=h$, а $r_{DA} = z_A - z_D$. Кроме того в формуле (2) c, τ_D, n_A – скорость света в вакууме, время жизни возбужденного состояния донора и концентрация акцептора, соответственно.

Первое слагаемое в правой части (2) представляет собой стандартное выражение для скорости переноса в теории Ферстера с угловым фактором $\chi^2(\Omega_{DA})$. Влияние проводника на процесс определяет второе – интегральное слагаемое. Частотно-зависящими функциями в нем являются не только спектральные функции $F_D(\omega)$ и $\mu_A(\omega)$ молекул донора и акцептора, но и фактор Лоренца $L(\omega)$, содержащий диэлектрическую проницаемость $\varepsilon_2(\omega)$ проводника с учетом ее частотной дисперсии.

В результате расчетов, произведенных на основе (4), нами наблюдалось плазмонное увеличение скорости безызлучательного межмолекулярного переноса энергии. Оно имело место при любых межмолекулярных расстояниях и более ярко выражено в приповерхностной области у граничной плоскости. Эффект увеличения скорости БПЭЭВ связан с размещением полосы плазмонного резонанса в низкочастотной области ($\omega_{pl} = 3,87 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$), а также деформацией спектров при удалении молекул от поверхности проводника в диапазоне высот от $0,4 \cdot 10^{-7} \text{ см}$ до $2 \cdot 10^{-7} \text{ см}$. На отрезке межмолекулярных расстояний от 40 до 80 Å имеет место плазмонное увеличение скорости переноса на порядок. Таким образом, перемещение молекул-реагентов относительно поверхности проводника позволяет изменять величину скорости процесса в широком диапазоне значений.

В квантовой модели плазмон-инициированного межмолекулярного переноса энергии вблизи плоской проводящей поверхности для скорости DA-переноса энергии в [3-4] была получена формула со спектральными функциями $G_D(\omega) \sim F_D(\omega)$ и $G_A(\omega) \sim \mu_A(\omega)$ лоренцева типа.

$$U_{DA}(z_D, z_A, R, \theta_D, \theta_A) = \frac{2\pi |p_{D|01}|^2 |p_{A|01}|^2}{\hbar^2} \times \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\chi(\Omega)}{r_{DA}^3} + \frac{\omega_p^3 F(z_D + z_A, R, \Omega_D, \Omega_A)}{((\omega - \omega_s)^2 + i/\tau)((z_D + z_A)^2 + R^2)^{5/2}} \right|^2 G_D(\omega) G_A(\omega) d\omega, \quad (3)$$

где дистанционно-угловой конфигурационный фактор комплекса

$$F(z_D + z_A, R, \Omega_D, \Omega_A) = \cos \theta_D \cos \theta_A (2(z_D + z_A)^2 - R^2) + \\ + \frac{1}{2} \sin \theta_D \sin \theta_A ((2(z_D + z_A)^2 - R^2) \cos(\varphi_D - \varphi_A) - 3R^2 \cos(\varphi_D + \varphi_A)) + \\ + 3R(z_D + z_A)(\cos \theta_D \sin \theta_A \cos \varphi_A - \cos \theta_A \sin \theta_D \cos \varphi_D).$$

Усреднение (3) по углам приводит к следующему результату ($z_D = z_A = z$)

$$U_{DA}(z, R) = \frac{4\pi |p_{D|01}|^2 |p_{A|01}|^2}{3\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{R^6} + \frac{\omega_s^3 (\omega - \omega_s) (3R^2/2 - (8z^2 - R^2)/6)}{R^3 \omega_p^2 (4z^2 + R^2)^{5/2} ((\omega_s - \omega)^2 + 1/\tau^2)^2} + \right. \\ \left. + \frac{\omega_s^6}{\omega_p^4 (4z^2 + R^2)^3 ((\omega_s - \omega)^2 + 1/\tau^2)} \right) G_D(\omega) G_A(\omega) d\omega. \quad (4)$$

Из полученных формул (3) и (4) видно, что когда z_D и z_A стремятся к нулю, зависимость скорости переноса по плазмонному механизму принимает типичную для индуктивно-резонансного переноса форму $U \sim R^{-6}$. Этот результат согласуется с итоговой формулой (2), полученной методом изображений, хотя в (3) и (4) отсутствует фактор Лоренца $L(\omega)$. В то же время, в итоговые выражения (3)-(4) квантовой модели входит частота ω_s поверхностного плазмона.

В случае, когда металлическая пленка имеет малую толщину, может проявляться влияние этой толщины на рассматриваемые процессы. К сожалению, описание процессов при этом становится более громоздким, т.к. использованный в модели (2) метод изображений, строго говоря, справедлив лишь в случае достаточно толстых пленок. Для сплошных однородных пленок малой толщины и описания их влияния на перенос энергии и люминесценцию более уместен метод, использованный в работе [4].

Выражения для скорости БПЭЭВ (3)-(4) изменяют свой вид в случае металлической пленки малой толщины. В [4] исследован безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения посредством поверхностных плазмонов между молекулами, адсорбированными проводящей тонкой пленкой. Скорость

передачи энергии с донора на акцептор, как и в модели, приводящей к (3), может быть найдена в рамках обобщенной теории Ферстера, учитывающей плазмонный канал

$$U_{DA} = \frac{2\pi}{\hbar^2} \int |V_{DA}(\omega)|^2 G_D(\omega) G_A(\omega) d\omega, \quad (5)$$

где $G_{D(A)}(\omega)$, как и ранее, – функция распределения по частотам в спектре испускания донора (поглощения акцептора), удовлетворяющая условию нормировки $\int_{-\infty}^{\infty} G_{D(A)}(\omega) d\omega = 1$.

Если молекулы донора и акцептора находятся по одну сторону пленки в области $z < 0$, матричный элемент $V_{DA}(\omega)$ D-A- взаимодействия приводится к следующему виду [4]

$$\begin{aligned} V_{DA}(\omega) = V_{DA}^F(\omega) + V_{DA}^P(\omega) = |p_D|_{01} |p_A|_{10} & \left[\frac{\chi(\Omega_1, \Omega_2)}{R_{DA}^3} + \right. \\ & + \frac{1}{4} \int_0^\infty k^2 e^{k(z_A + z_D)} \left[\frac{\omega_1(k)(1 + e^{-kl})}{\omega - \omega_1(k) + i/\tau} + \frac{\omega_2(k)(1 - e^{-kl})}{\omega - \omega_2(k) + i/\tau} \right] \times \\ & \left[J_0(kr_{DA}) \left\{ \frac{1}{2} \sin \theta_D \sin \theta_A \cos(\phi_D - \phi_A) + \cos \theta_D \cos \theta_A \right\} - \right. \\ & - \frac{1}{2} J_2(kr_{DA}) \sin \theta_D \sin \theta_A \cos(\phi_D + \phi_A) + \\ & \left. \left. + J_1(kr_{DA}) (\sin \theta_D \cos \theta_A \cos \phi_D - \sin \theta_A \cos \theta_D \cos \phi_A) \right] dk \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь в (6) $J_n(x)$ – функции Бесселя порядка n . Структура ориентационных факторов в (3) и (6) имеет схожий характер, тогда как дистанционные переменные в (6) не отражают привычных степенных зависимостей (2) и (3)-(4). Частично это связано с невыполненным интегрированием в (6) по волновым числам k поверхностного плазмона, частично – с усложнившимся дисперсионным законом $\omega_j(k)$ для тонкого слоя по сравнению с полубесконечной средой, выразившемся в появлении двух дисперсионных ветвей $\omega_{1,2}(k)$ в матричном элементе (6).

Помимо межмолекулярного переноса энергии через плазмонный канал возможна необратимая генерация поверхностных плазмонов донорными молекулярными центрами с последующей диссипацией энергии плазмонов.

В модели Э. Зенгуила для возбужденной молекулы с электронным дипольным моментом перехода $\mu = |\langle 1 | \mathbf{er}_e | 0 \rangle|$ и энергией $\hbar\Omega$ перехода $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$,

осциллирующей над поверхностью металла на расстоянии z_D , ее поляризуемость $\alpha(\omega)$ может быть записана в виде: $\alpha(\omega) = \alpha_0 / (1 - \omega^2 / \Omega^2)$, где $\alpha_0 = 2\mu^2 / (\hbar\Omega)$. Вводя время жизни τ возбужденного состояния $|1\rangle$ молекулы заменой $\omega \rightarrow \omega + i/\tau$, для резонансной частоты молекулярного осциллятора получаем выражение

$$\omega_R \approx \left[1 - \frac{\alpha_0}{8z_D^3} \frac{\varepsilon(\omega_R) - 1}{\varepsilon(\omega_R) + 1} \right] \Omega.$$

Тогда для скорости $U(z_D | \omega)$ тушения на резонансной частоте ω_R можем записать

$$U(z_D | \omega) = \frac{1}{\tau} = \text{Im } \omega_R \approx \frac{2\mu^2}{8\hbar z_D^3} \text{Im} \frac{\varepsilon(\omega_R) - 1}{\varepsilon(\omega_R) + 1}. \quad (7)$$

Следует отметить, что к этому результату приходим и при рассмотрении энергии взаимодействия двух диполей: P и его изображения $\text{Im } P$. Действительно, энергия их взаимодействия

$$W = \mathbf{p}_{\text{Im}} \mathbf{E}_P(\rho, \phi, z | \omega) = \frac{1}{r^3} \left[\frac{3(\mathbf{pr})\mathbf{r} \mathbf{p}_{\text{Im}}}{r^2} - \mathbf{p} \mathbf{p}_{\text{Im}} \right] = \frac{2p^2}{8z_D^3} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega)}. \quad (8)$$

Тогда беря мнимую часть от (8) и полагая $U(z_D | \omega) = \text{Im } W / \hbar$, получаем (7).

Таким образом, кроме межмолекулярного БПЭЭВ имеет место прямое тушение возбужденных состояний доноров металлической поверхностью. Для скорости $U(z_D | \omega)$ такого тушения на частоте ω электронного перехода в молекуле донора можем записать

$$U(z_D | \omega) = \frac{\omega}{2\pi} \text{Im } \varepsilon_2(\omega) \int_{-\infty}^0 dz \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty |\mathbf{E}_2(\rho, \phi, z | \omega)|^2 \rho d\rho. \quad (9)$$

Здесь в (9) $\mathbf{E}_2(\rho, \phi, z | \omega)$ – напряженность поля, создаваемого донорным диполем в области, заполненной металлом, причем стандартный подход [5] дает следующий результат

$$\mathbf{E}_2(\rho, \phi, z | \omega) = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2(\omega)} L(\omega) \mathbf{E}_P(\rho, \phi, z | \omega) = \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2(\omega)} \mathbf{E}_P(\rho, \phi, z | \omega), \quad (10)$$

$$\mathbf{E}_P(\rho, \phi, z | \omega) = \frac{1}{r^3} \left[\frac{3(\mathbf{pr})\mathbf{r}}{r^2} - \mathbf{p} \right].$$

Подставляя последние выражения (10) в (9) и выполняя расчет интегралов, приходим к выражению, эквивалентному (7), с характерной зависимостью z_D^{-3} .

Представим волновую функцию молекулы в виде произведения электронной части на колебательную: $\psi_D = \varphi_D \Phi_D$. Пусть ψ_D^0 - волновая функция молекулы в основном электронном состоянии, а ψ_D^1 - в 1-ом возбужденном состоянии. Обозначим через $S(E_D^1, E_D^0) = \langle \Phi_D^1 | \Phi_D^0 \rangle$ интеграл перекрытия колебательных волновых функций молекулы. Введем, также, функцию $g(E_D^1)$ распределения по колебательным энергетическим подуровням этой молекулы.

Тогда, следуя чисто квантовому подходу в духе теории Ферстера [1],[3-4], для скорости безызлучательной передачи энергии возбуждения на металлическую поверхность с одновременным рождением на ней поверхностных плазмонов с частотами ω_k , можно записать следующее выражение

$$U = \frac{2\pi}{\hbar} \int \sum_k \left| \langle \varphi_D^0 | \langle n_k + 1 | (-\mathbf{p}_D \mathbf{E}) | n_k \rangle | \varphi_D^1 \rangle \right|^2 g(E_D^1) S^2(E_D^1, E_D^1 - \hbar \omega_k) dE_D^1. \quad (11)$$

где $V = -\mathbf{p}_D \mathbf{E}$ - оператор энергии взаимодействия диполя молекулы - донора энергии с внешним электрическим полем поверхностных плазмонов; $\mathbf{E}$ - напряженность поля поверхностных плазмонов; $|n_k\rangle$ - вектор состояния с n -плазмонами с волновым вектором $\mathbf{k}$; $|n_k + 1\rangle$ - вектор состояния с $n+1$ плазмонами с волновым вектором $\mathbf{k}$. Вводя функцию распределения по частотам в спектре испускания молекулы $G_D(\omega) = \hbar \int S^2(E_D^1, E_D^1 - \hbar \omega_k) g(E_D^1) dE_D^1$, и учитывая, что частота поверхностных плазмонов слабо зависит от волнового вектора $\mathbf{k}$, скорость переноса энергии на частоте ω_k запишем в виде

$$U = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_k \left| \langle \varphi_D^0 | \langle n_k + 1 | (-\mathbf{p}_D \mathbf{E}) | n_k \rangle | \varphi_D^1 \rangle \right|^2 G_D(\omega). \quad (12)$$

Матричный элемент электронного дипольного момента перехода в доноре $|p_D|_{01} = \langle \varphi_D^0 | p_D | \varphi_D^1 \rangle$. Для матричного элемента плазмон-молекулярного взаимодействия, входящего в (12), получаем

$$\langle \varphi_D^0 | \langle n_k + 1 | (-\mathbf{p}_D \mathbf{E}) | n_k \rangle | \varphi_D^1 \rangle = -\frac{\sqrt{2\pi k \omega^3 \hbar}}{\sqrt{S \omega_p^2}} |p_D|_{01} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-kz} (i \sin \theta_D \cos(\varphi_D - \varphi) + \cos \theta_D).$$

Заменяя сумму по $\mathbf{k}$ в (12) интегрированием $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int k dk d\varphi$, получаем

$$\int_0^\infty e^{-2kz} k^2 dk = \frac{2!}{(2z)^3}, \text{ а интегрирование по углу } \varphi \text{ дает фактор } \pi \sin^2 \theta_D. \text{ В результате для скорости переноса энергии (12) от молекулы к плоской проводящей поверхности получаем выражение}$$

$$U(\omega | z, \theta_D) = \frac{\pi \omega^3 |p_D|_{01}^2 G(\omega)}{4z^3 \hbar \omega_p^2} (1 + \cos^2 \theta_D). \quad (13)$$

Усредняя выражение (13) по углу θ_D окончательно получаем

$$U(\omega | z) = \frac{\pi \omega^3 |p_D|_{01}^2}{3\hbar \omega_p^2 z^3} G(\omega). \quad (14)$$

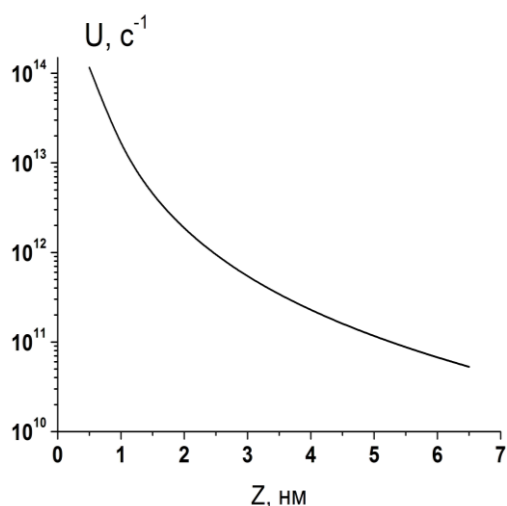


Рис. 1. Зависимость скорости тушения возбужденных молекул донора Ан-подложкой от расстояния z до

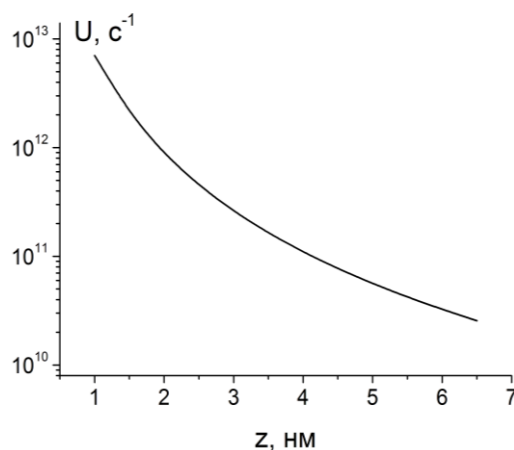


Рис. 2. Зависимость скорости тушения возбужденных молекул донора серебряной Ан-подложкой от расстояния

На рисунке 1 представлена зависимость скорости передачи энергии от молекулы донора к поверхности от расстояния z между молекулой и золотой подложкой. Расчеты выполнены на основе (14) для диэлектрической проницаемости диэлектрика $\varepsilon_D = 1.5$ и высокочастотной части диэлектрической проницаемости золота $\varepsilon_\infty = 9.8$. Из рисунка 1 видно сильное увеличение скорости тушения вплоть до 10^{14} с^{-1} при малых расстояниях $z < 1 \text{ нм}$.

На рисунке 2 представлена зависимость от расстояния z между молекулой и подложкой скорости передачи энергии от молекулы донора к серебряной поверхности. Частота поверхностных плазмонов на границе «металл – диэлектрик» составляет $\sim 6 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ при проницаемости диэлектрика $\varepsilon_D = 1.5$ и высокочастотной части диэлектрической проницаемости серебра $\varepsilon_\infty = 3.7$. Поэтому максимум функции распределения в спектре испускания донора выбирался на частоте $5.0 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ($\lambda \approx 380 \text{ нм}$, например, молекулы 9-ТМА-антрацена или 1,4-

дигидроксифталонитрила). Полуширина спектральной полосы принималась равной $\gamma_D = 0.5 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$.

Плазменная инициация люминесценции молекулы вблизи плоской проводящей поверхности осуществляется посредством увеличения скорости $w_{sp}(\omega | z_D) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{p}_{eff}(z_D)|^2$ спонтанного радиационного перехода в ней через формирующийся с участием диполя-изображения эффективный дипольный момент $\mathbf{p}_{eff} = \mathbf{p} + \mathbf{p}_{lm}$. Спектральная плотность N_ω числа фотонов, испущенных объединенной системой «молекула-поверхность» на частоте ω , определяется как произведение вероятности w_{sp} спонтанного перехода на функцию формы линии, которую можно считать лоренцевой, с шириной, определяемой общей скоростью диссипации $U_{tot}(\omega | z_D, z_A) = U_{DA}(\omega | z_D, z_A) + U(\omega | z_D)$ и скоростью плазмон-активированного радиационного распада $w_{sp}(\omega | z_D)$

$$N_\omega(\omega | z_D, z_A) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{w_{sp}^2(\omega | z_D) \Gamma(\omega | z_D, z_A)}{(\omega - \omega_{if}^{(D)})^2 + \Gamma^2(\omega | z_D, z_A)}. \quad (15)$$

Здесь, в (15), $\omega_{if}^{(D)}$ - резонансная частота лоренцева контура спектральной полосы люминесценции донора; $\Gamma(\omega | z_D, z_A) = w_{sp}(\omega | z_D) + U_{tot}(\omega | z_D, z_A) + K$ – полная ширина линии возбужденного состояния донора; K – скорость одномолекулярной безызлучательной релаксации донора. При записи (15) учтено, что спонтанное испускание и безызлучательный перенос энергии на молекулу-акцептор и проводящую подложку являются конкурирующими процессами дезактивации возбужденного состояния молекулы донора, и для их совместного учета необходимо определить долю η молекул D, распавшихся радиационным способом (квантовый выход люминесценции)

$$\eta(\omega | z_D, z_A) = \frac{w_{sp}(\omega | z_D)}{w_{sp}(\omega | z_D) + U_{tot}(\omega | z_D, z_A) + K}, \quad (16)$$

где K – скорость безызлучательной дезактивации возбужденной молекулы.

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М., Кислов Д.А. Увеличение скорости межмолекулярного безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения вблизи плоской границы твердого тела // Вестник ОГУ. 2011. №1. С. 170-181.
2. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Безызлучательная трансформация энергии электронного возбуждения в многослойных планарных наноструктурах «металл - диэлектрик» // Вестник ОГУ. 2015. №9 (184). С. 45-53.

3. Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г. Передача энергии между адсорбатами посредством поверхностных плазмонов // Известия высших учебных заведений. Физика. 2011. -№ 3 . – С. 36-41.

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

5. Новотный Л., Хехт Б. Основы нанооптики. Монография / -Пер. с англ. под ред. В.В. Самарцева. –М. Физматлит. 2009. –484 с. –ISBN 978–5–9221–1095–2.

ЗАПИСЬ ФОТОХИМИЧЕСКИХ ГОЛОГРАФИЧЕСКИХ РЕШЕТОК В МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЖЕЛАТИНОВЫХ ПЛЕНКАХ С ОРГАНИЧЕСКИМ КРАСИТЕЛЕМ

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

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Введение

Основными сферами технологических применений желатина являются голография, фотография, медицина и косметология, биотехнологии, пищевая индустрия [1].

Создание лазеров обеспечило голографический эксперимент широким ассортиментом источников излучения разнообразных свойств и параметров. В то же время прогресс в области разработки и создания регистрирующих сред значительно отстает от потребностей практики и сдерживает реализацию огромного потенциала объемной голографии. Особенно это сказывается при решении конкретных научно-технических задач, связанных с созданием высокоселективных голограммных оптических элементов, заменяющих традиционные оптические элементы или имеющих новое качество; созданием систем сверхплотной оптической записи информации.

Одной из проблем использования желатина как функционального материала является недостаточная стабильность технологических свойств. По этой причине усилия разработчиков оптоэлектронных устройств на основе систем краситель – желатиновая матрица направлены на отыскание способов обеспечить постоянство и воспроизводимость свойств таких систем.

Ранее нами в работах [2, 3] были предприняты попытки управления свойствами полимерных функциональных материалов посредством введения в их структуру пластификатора (глицерина). Так, в работе [2], посвященной установлению механизма фотообесцвечивания тиазиновых красителей в твердой пленке поливинилового спирта при записи голограмм He-Ne лазером, показано, что добавление в пленки малых количеств глицерина позволяет управлять соотношением констант скоростей реакционной схемы, а также приводит к полному разрушению голограмм-решеток после окончания записи. В [3] предложен способ управления мономер-димерным равновесием в биополимерных пленках ДНК – акридиновый оранжевый и реализован принцип “гость–хозяин” для получения оптического материала с заранее заданными свойствами.

Цель настоящей работы – разработка метода модификации структуры желатиновых пленок путем формирования полимолекулярных комплексов желатин-хитозан для создания новых материалов оптоэлектроники.

Экспериментальная часть

В работе использовались биополимеры фотографический желатин марки А, хитозан из панцирей креветок со степенью деацетилирования $\geq 75\%$ (MP Biomedicals). Краситель (Кр) метиленовый голубой (МГ) (Sigma-Aldrich) использовали без дополнительной очистки.

Желатин (Ж) заливали дистиллированной водой (10% по массе), после набухания получали однородный золь при 60°C. Хитозан (Х) растворялся в слабой уксусной кислоте. Для приготовления смеси желатина с хитозаном растворы желатина и хитозана смешивались в нужной пропорции. В растворы полимеров вводили растворенный в воде краситель. Плёнки готовили методом полива на стеклянные пластинки. Толщину пленок определяли исходя из объема и площади (а также измеряли микрометрическим индикатором). Концентрацию красителей в сухой пленке оценивали расчетным методом.

Спектры поглощения и флуоресценции пленок регистрировали на оптоволоконном спектрометре AvaSpec 2048 (Avantes), работающем в режиме полихроматора. Для голографической записи использовали DPSS cw лазер KLM-532/SLN (532 нм) (ФТИ-Оптроник). Для измерения энергетических параметров лазеров использовали измеритель мощности и энергии Fieldmaster GS (Coherent).

Голографические решетки с периодом 27 мкм на образцах МГ-биополимер записывались на длине волны 532 нм на установке, аналогичной описанной в работе [4].

Результаты и обсуждение

Желатин имеет в своем составе как основные, так и кислотные ионогенные группы (аминокислотные остатки), может связывать активные центры с зарядом разного знака (в том числе молекулы органических красителей), и поэтому широко используется при создании оптоэлектронных материалов. Однако при комнатной температуре полипептидные цепи желатина в зольных растворах находятся в форме плотного клубка, лишь частично проницаемого для молекул растворителя [5]. По этой причине контакт молекул красителя с соответствующими сайтами внутри клубка затруднен и на его периферии образуются димеры Кр. Это является одной из причин эффекта концентрационного тушения флуоресценции при попытке получить эффективный люминофор на базе системы краситель – желатин за счет увеличения концентрации Кр, а также ухудшает свойства регистрирующих сред на основе желатина.

Для обеспечения доступа молекул красителей к «внутренним зонам» желатиновых клубков нами предложено модифицировать структуру молекул желатина путем связывания с молекулами хитозана. Для этого мы использовали принцип самосборки по типу «молекулярного узнавания» [6]: образование (био)полимолекулярных комплексов между желатином и хитозаном за счет взаимодействия основных Glu и Asp аминокислотных остатков в желатине и

кислотных аминокрупп в структуре хитозана («кооперативное полиэлектролитное взаимодействие»).

Макромолекулы хитозана в кислой среде (раствор уксусной кислоты, pH = 3,5) сильно вытянуты благодаря электростатическому отталкиванию положительно заряженных аминокрупп. Биополиэлектролитные комплексы формируются в результате электростатических взаимодействий между положительно заряженными аминокгруппами хитозана и отрицательно заряженными аминокислотными остатками (глутаминовой Glu и аспарагиновой Asp кислот) желатина. Это проявляется как последовательное заполнение «матрицы» хитозана раскрытыми клубками желатина. Оптимальный диапазон концентраций полисахарида от 0.03 до 0.5 %.

Тиазиновые красители (метиленовый голубой, тионин и др.) отличаются специфическими фотохимическими свойствами [7] и используются в качестве генераторов синглетного кислорода, инициаторов фотополимеризации, светочувствительных компонентов в полимерных регистрирующих средах.

В настоящей работе представлены результаты экспериментов по голографической записи в биополимерных пленках Ж, Х и смеси желатина с хитозаном, содержащих краситель метиленовый голубой. Голографические решетки записывались излучением непрерывного (532 нм) лазера по схеме в попутных пучках равной интенсивности на пространственной частоте 360 см^{-1} . Измерялась интенсивность I пучка в первом порядке самодифракции, дифракционная эффективность (η) оценивалась как отношение I к интенсивности I_0 одного из записывающих пучков. Результаты экспериментов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты экспериментов по голографической записи в биополимерных плёнках Ж, Х и смеси желатина с хитозаном, содержащих краситель метиленовый голубой

Образец	Концентрация красителя в сухой пленке, моль/литр	Оптическая плотность на длине волны записи, D_{532}	I_0 , мВт	η , %
МГ-Ж	$1,2 \times 10^{-2}$	0,45	6,5	$0,8 \times 10^{-5}$
МГ-Х/Ж	$1,2 \times 10^{-2}$	0,28	6,5	$0,9 \times 10^{-6}$
МГ-Х	$4,4 \times 10^{-2}$	0,5	6,5	–

Тип записи – амплитудный вследствие фотохимического обесцвечивания красителя. Ранее нами был предложен механизм фотообесцвечивания тиазиновых красителей в твердой гидроксилсодержащей пленке [2], который заключается в образовании лейкоформы красителя через стадию образования протонированного семихинона.

Более высокая эффективность голограмм-решеток в пленке МГ-Х/Ж с массовым отношением Х/Ж равным 0,05 по сравнению с МГ-Ж достигнута, по нашему мнению, как и в случае с флуоресценцией образцов СРВ-Х/Ж, также благодаря эффективному заполнению молекулами красителей соответствующими

щих сайтов связывания на желатине и уменьшением количества димеров. Отметим, что в образце МГ-хитозан фотохимические голограммы не записывались.

Следует также отметить, что модифицированные по предложенной методике пленки желатина испытывают существенно меньшую (до 80%) усадку после обработки в водных растворах.

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

Список литературы

1. Calixto S. Gelatin as a Photosensitive Material / S. Calixto, N. Ganzherli, S. Gulyaev // *Molecules*. — 2018. — Vol 23. — №8. — P. 1–22.
2. Лантух Ю.Д. Использование среды тиазиновый краситель – поливиниловый спирт для записи голограмм / Ю.Д. Лантух, Г.А. Кецле, С.Н. Пашкевич // Оптик. Лантух Ю.Д. Спектроскопические свойства биополимерных пленок ДНК – акридиновый оранжевый / Ю.Д. Лантух, С.Н. Пашкевич, С.Н. Летута // Оптика и спектроскопия. — 2011. — Том 110. — №6. — С. 932–937.
4. Лантух Ю. Д. Голографическая запись в среде ДНК – органический краситель / Ю. Д. Лантух, С.Н.Пашкевич, С. Н. Летута, Э.К. Алиджанов // Труды 7-й Международной конференции ГОЛОЭКСПО-2010. — 2010. — С.122–127.
5. Измайлова В.Н. Гелеобразование в желатине и многокомпонентных системах на ее основе / В.Н.Измайлова, С.Р. Деркач, М. А. Сакварелидзе // Высокомолекулярные соединения. — 2004. — Том 46. — №12. — С. 2216–2240.
6. Изумрудов В.А. Явления самосборки и молекулярного "узнавания" в растворах (био)полиэлектролитных комплексов / В.А. Изумрудов // Успехи химии. — 2008. — Том 74. — №4. — С. 401–415.
7. Кричевский Г.Е. Фотохимические превращения красителей и светостабилизация окрашенных материалов // Г.Е. Кричевский—М.: Химия, 1986. — 248 с.

МАГНИТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЛИЯЮТ НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ КЛЕТОК *E. COLI* К АНТИБИОТИКАМ

Летута У.Г., канд. физ.-мат. наук, Тихонова Т.А.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Химические элементы, содержащиеся в живых организмах, имеют природные стабильные изотопы, которые отличаются массой и магнитными характеристиками ядра. Различия масс являются причиной фракционирования изотопов в биологических процессах. По разным данным причины этого явления - различия в скоростях реакций или диффузии лёгких и тяжелых изотопов, а также различия в константах равновесия [1]. Наиболее интересные биологические изотопные эффекты обнаружены для ядер водорода $^1\text{H}/^2\text{H}$. Центральные метаболические пути, которые реализуются в микроорганизмах, коррелирует с изотопным составом водорода в липидах [2]. Среди наиболее интересных практических наблюдений изотопных эффектов в биологии можно ещё отметить летальное воздействие дейтерия на большинство организмов; использование соотношений $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ для определения биогенного происхождения углерода в древних породах и соотношения $^{32}\text{S}/^{34}\text{S}$ для определения времени эволюции сернистых бактерий [1].

Кроме атомной массы изотопы отличаются и магнитными характеристиками. Изотопы, ядро которых имеет магнитный момент и, соответственно, ядерный спин, называют магнитными, например, ^{25}Mg , ^{31}P , ^{67}Zn . Все остальные стабильные изотопы этих элементов немагнитны, их ядра не имеют магнитных моментов. Впервые различное влияние магнитных и немагнитных изотопов на биологические объекты было продемонстрировано в опытах с выделенными фосфорилирующими ферментами и изолированными митохондриями [3-4]. Наличие магнитного изотопа магния ^{25}Mg в активном сайте фермента увеличивало выход АТФ по сравнению с немагнитными изотопами $^{24,26}\text{Mg}$. Магний имеет три стабильных изотопа: один магнитный ^{25}Mg (спин ядра $I=5/2$) и два немагнитных ^{24}Mg и ^{26}Mg (спин ядра $I=0$). Физико-химический механизм обнаруженных явлений связан со сверхтонким взаимодействием ядерного спина с электронными спинами из молекулярного окружения. Магнитное взаимодействие способно влиять на ферментативную активность и выход продукта реакции [4].

Оказалось, что микроорганизмы *E. coli* также чувствительны к наличию магнитного момента у ядра изотопа магния. Добавление магнитного магния ^{25}Mg в питательную среду увеличивало показатели КОЕ, скорость роста и внутриклеточное содержание АТФ [5]. Было доказано, что эти изменения обусловлены именно магнитной природой магния [6] и предложена строгая теория [7]. Кроме того обнаружено влияние магнитного изотопа на одно из важнейших свойств микроорганизмов - образование биоплёнок: культивирование бактерий

на среде, содержащей магнитный изотоп магния, стимулирует этот процесс [8]. В данной работе исследовано влияние изотопов магния на другое важное свойство микроорганизмов – чувствительность к антибиотикам.

Объект исследований - штамм *Escherichia coli* K12 TG1. Для культивирования бактерий использовалась минимальная синтетическая питательная среда М9 [6]. Для приготовления сульфатов магния использовались изотопно-чистые оксиды ^{24}MgO , ^{25}MgO и ^{26}MgO с изотопным обогащением 99.8, 98.8 и 97.7 атомных процентов, соответственно (ФГУП «Электрохимприбор», Россия). В качестве контроля использовалась питательная среда М9 с природным соотношением изотопов магния (^{24}Mg – 78.60%, ^{25}Mg – 10.11%, ^{26}Mg – 11.29%).

Для получения суточного инокулята, соответствующего по плотности 0.5 по МакФарланду, использовался LB-бульон (Sigma Aldrich Co.).

Минимальные ингибирующие концентрации (МИК) 7 антибиотиков: цефотаксим (цефалоспорины), фуразидин (нитрофураны), линкомицин (линкозамиды), тобрамицин (аминогликозиды), амоксициллин (пенициллины), меропенем (карбапенемы), ципрофлоксацин (хинолоны/фторхинолоны), - определялись с помощью метода серийных разведений. Подобранные МИК использовались как стартовые концентрации антибиотиков для получения ростовых кривых и определения скорости роста.

Культивирование культуры для получения ростовых кривых осуществлялось при 37°C в 96-луночных полистироловых планшетах при постоянной аэрации путём помещения сред с культурой бактерий на шейкер ST-3 ELMi (200 об/мин). Начальная плотность культуры после добавления инокулята в среды М9 составляла 10^5 КОЕ/мл. Использовались четыре концентрации антибиотиков, полученных методом серийных разведений. Максимальная концентрация соответствовала подобранной МИК при росте на среде М9.

Ростовые кривые (зависимости оптической плотности суспензий от времени культивирования) получались турбидиметрическим методом с помощью измерения оптической плотности суспензий каждый час на иммуноферментном анализаторе АИФР-01 УНИПЛАН (Пикон, Россия). Линейный участок ростовой кривой, соответствующий фазе активного деления клеток, аппроксимировался и определялась величина μ , которая соответствует скорости роста бактериальной культуры. Был выбран именно этот параметр, потому что он наиболее интересен при описании совместного влияния антибиотиков и изотопов магния на бактерии.

Для каждого антибиотика было получено и обработано более 190 кривых (не менее четырёх экспериментальных серий с тремя повторами для всех изотопов и четырёх концентраций). За основной показатель чувствительности бактерий к антибиотику была выбрана скорость роста, которая определялась после аппроксимирования кривых с помощью программного пакета Origin 8.

Обнаружены магнитно-изотопные эффекты ^{25}Mg в чувствительности бактерий к цефотаксиму (рис. 1), тобрамицину (рис. 2), и ципрофлоксацину (рис. 3). Бактерии, обогащенные магнитным магнием, оказываются более чувствительными к цефотаксиму (цефалоспорины) и ципрофлоксацину (хинолоны/

фторхинолоны) в концентрациях, меньших МИК, по сравнению с немагнитными изотопами и природным магнием. Скорость роста бактериальной культуры, растущей с магнитным изотопом ^{25}Mg , оказывается меньше для всех концентраций антибактериального средства в среде М9. Обнаруженный эффект является независимым, надёжным подтверждением негативного влияния магнитного изотопа магния ^{25}Mg на синтез ДНК [9]. Группа хинолонов – единственная из всего тестируемого ряда, препараты которой воздействуют именно на различные стадии синтеза ДНК. При этом изменения в скорости роста только при обогащении магнитным изотопом магния свидетельствует о магнитной природе наблюдаемых эффектов. Для выяснения деталей физико-химического механизма обнаруженных явлений нужны дополнительные исследования.

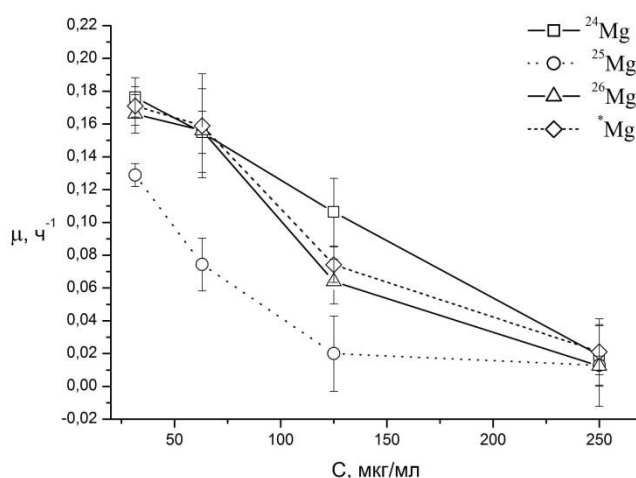


Рисунок 1 – Зависимости скорости бактерий *E. coli*, культивируемые на среде М9 с изотопами магния ^{24}Mg , ^{25}Mg , ^{26}Mg , *Mg, от концентрации цефотаксима. Максимальная концентрация соответствует МИК

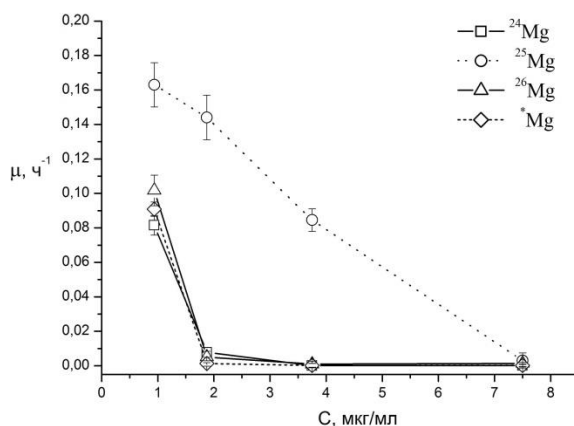


Рисунок 2 - Зависимости скорости бактерий *E. coli*, культивируемые на среде М9 с изотопами магния ^{24}Mg , ^{25}Mg , ^{26}Mg , *Mg, от концентрации тобрамицина. Максимальная концентрация соответствует МИК

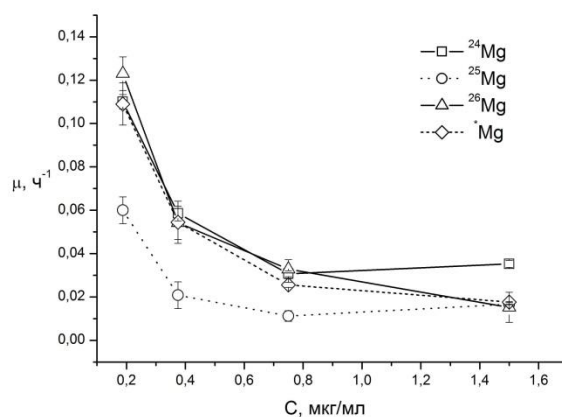


Рисунок 3 – Зависимости скорости бактерий *E. coli*, культивируемые на среде М9 с изотопами магния ^{24}Mg , ^{25}Mg , ^{26}Mg , $^*\text{Mg}$, от концентрации ципрофлоксацина. Максимальная концентрация соответствует МИК

Резистентность к тобрамицину (аминогликозиды) микроорганизмов *E. coli*, обогащенных магнитным изотопом магния, оказывается максимальной: уже при концентрации антибиотика, в 2 раза меньшей МИК, скорость роста возрастает в два раза.

Незначительные изменения в росте были обнаружены для бактерий, которые культивировались на среде с природным соотношением изотопов Mg: при концентрации амоксициллина и фуразидина, в 2 раза меньшей МИК, скорость роста уменьшается на 20-25 % по сравнению с бактериями, культивируемыми на среде с чистыми изотопами. Для линкомицина (линкозамиды) и меропенема (карбапенемы) не было обнаружено различий в скорости роста в зависимости от концентрации антибиотика и содержания изотопов магния среде.

Заключение

При исследовании влияния изотопов магния на чувствительность бактерий *E. coli* разными методами обнаружен совместный эффект магнитного изотопа магния и антибиотиков группы хинолонов. Антибиотикорезистентность таких микроорганизмов уменьшается. Магнитный изотоп ^{25}Mg может быть использован для потенцирования антибактериальных средств этой группы.

Работа выполнена при поддержке Совет по грантам Президента Российской Федерации, заявка СП-225.2019.4.

Список литературы

- 1 **Bowen, H.J.M.** Biological fractionation of isotopes / H.J.M. Bowen // International Journal of Applied Radiation and Isotopes, 1960. – V. 7, № 4. – P. 261-272.
- 2 **Zhang, X.** Large D/H variations in bacterial lipids reflect central metabolic pathways / X. Zhang, A.L. Gillespie, A.L. Sessions // PNAS, 2009. – V. 106. – P. 1–7.

- 3 **Buchachenko, A.L.** Chemistry of enzymatic ATP synthesis: an insight through the isotope window / A.L. Buchachenko, D.A. Kuznetsov, N.N. Breslavskaya // Chemical Review, 2012. – V.112. – P. 2042–2058.
- 4 **Buchachenko, A.L.** Magnetic isotope effect in chemistry and biochemistry / A.L. Buchachenko. – New York: Nova Science Publishers, 2009. – 149 p.
- 5 **Letuta, U.G.** Magnetosensitivity of bacteria *E. coli*: Magnetic isotope and magnetic field effects / U.G. Letuta, V.L. Berdinskiy // Bioelectromagnetics, 2017. – V. 38, Iss. 8. – P. 581-591.
- 6 **Shevchenko, U.G.** Biological effects of the ^{25}Mg magnetic isotope in *E. coli* cells / U.G. Shevchenko, E.I. Avdeeva, V.L. Berdinskii // Russian Journal of Physical Chemistry B, 2012. – V. 6, №4. – P. 531-537.
- 7 **Letuta, U.G.** Enzymatic mechanisms of biological magnetic sensitivity / U.G. Letuta, V.L. Berdinskiy, C. Udagawa, Y. Tanimoto // Bioelectromagnetics, 2017. – V. 38, Iss. 7. – P. 511-521.
- 8 **Letuta, U. G.** Magnetic fields and magnetic isotope ^{25}Mg effects on biofilms formation by bacteria *E. coli* / U. G. Letuta, T. A. Tikhonova // Doklady Biochemistry and Biophysics, 2019. – V. 484, №1. – P. 85-87.
- 9 **Buchachenko, A.L.** Magnetic isotope and magnetic field effects on the DNA synthesis / A.L. Buchachenko, A.P. Orlov, D.A. Kuznetsov, N.N. Breslavskaya // Nucleic Acids Res, 2013. – V. 41. – P. 8300–8307.

К ВОПРОСУ ОБ АКТУАЛЬНОСТИ РАСЧЕТА ПОСТОЯННЫХ МАДЕЛУНГА

Макаров В.Н.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Аннотация

В работе приведены основные результаты в области расчета постоянных Маделунга. Описывается, что исследования в данной области разделяют на два класса. Первый – улучшение скорости расчета постоянных Маделунга, а второй – расчет постоянных Маделунга для сложных кристаллических структур. Рассмотрены основные научные школы, которые занимаются исследованиями в данной области.

Ключевые слова: Постоянная Маделунга, кристаллические структуры, метод Харрисона

Постоянные Маделунга играют важную роль в понимании свойств и поведении кристаллических твердых тел. Постоянная Маделунга является ключевым параметром, определяющим энергию решетки кристаллической структуры и, следовательно, ее стабильность. Оригинальные работы Маделунга были опубликованы в 1918 году [1], а константы Маделунга для обычных типов кристаллов были рассчитаны более 50 лет назад. Однако, в данной области продолжают исследования, которые можно условно разделить на два класса. Первый связан с повышением скорости расчета постоянных Маделунга и предполагает разработку новых алгоритмов расчета с более быстрой сходимостью рядов. Второе направление развивает методики расчетов постоянных Маделунга для сложных кристаллических структур.

Рассмотрим для каких сложных кристаллических структур рассчитывались и рассчитываются постоянные Маделунга. Одними из первых структур со сложной кристаллической решеткой были выбраны интерметаллические соединения. В работе [2] качестве интерметаллида рассматривается MgIn . Его кристаллическая структура была изучена с использованием теории возмущений и псевдопотенциалов, для которых и рассчитывается постоянная Маделунга. Было установлено, что для гранецентрированной кубической решетки постоянная Маделунга равна 1.79175, а для объемноцентрированной кубической – 1.79186. На основании этих расчетов были определены условия возникновения длинно-периодической сверхрешетки типа CuAu .

Позднее расчет постоянной Маделунга стал применяться к сложным органическим соединениям и полимерам, что делает данную область исследований актуальной не только для физики конденсированного состояния, но и, например, для нефтехимии и фармацевтики. В работе [3] рассчитаны значения кристаллической структуры органических солей (рисунок 1), а также показано

как различаются постоянные Маделунга при незначительных изменениях положения ионов в кристалле.

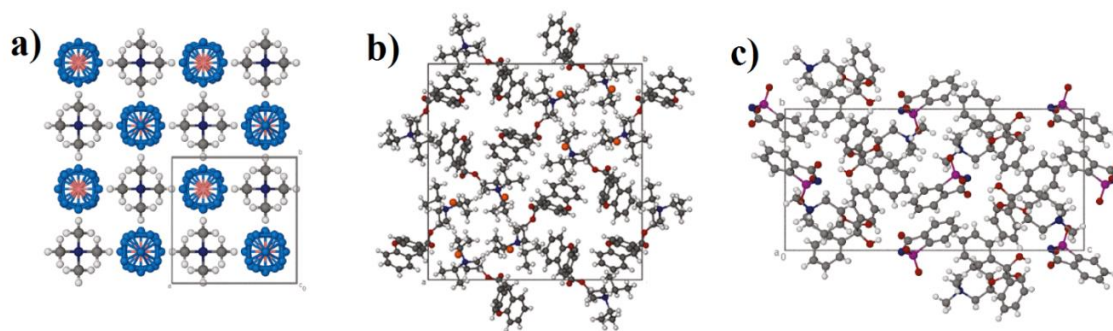


Рисунок 1 – Кристаллические структуры органических солей

a) [NMe₄][BF₄] (кубическая сингония); **b)** [Prop][Br] (кубическая сингония); **c)** [Mer][Sacc] (тетрагональная сингония)

Таким образом, по значению постоянной Маделунга в сложных кристаллических структурах можно судить о. Полученный результат полностью согласуется с результатом работы [4], где вычислялись значения постоянных Маделунга для решеток, в которых задавались случайные расположения ионов. Было показано, что энергия решеток увеличивается с ростом беспорядка расположения ионов.

В последнее время расчет постоянных Маделунга представляет интерес для понимания и прогнозирования свойств поверхностей. В работе [5] постоянные Маделунга были рассчитаны для ионных наноструктур и нанопереходов, таких как нанотрубки MgO. В [6] рассмотрены постоянные Маделунга для структур поверхностей NaCl (100), NaCl (110), CsCl (110), цинковой обманки (110), вюрцита (1120) и рутила (001) после фотоэмиссии.

Оценка постоянных Маделунга для поверхностей, рассмотренных в [5], позволяет строить карты поверхностей, где точками выступают различные значения постоянных Маделунга. Рассчитанные значения для нанотрубок MgO хорошо коррелируют с расчетами, полученными методами DFT (теории функционала плотности). Встречаются работы, для которых были рассчитаны значения энергий для кристаллических структур с помощью DFT, но нет результатов расчета постоянных Маделунга, что еще раз подчеркивает целесообразность использования метода при изучении сложных моделей.

Постоянные Маделунга рассчитываются для структур, которые были помещены в аномальные условия. В работе [7] сделан теоретический анализ экспериментальных результатов получения структурных фазовых переходов в FeI₂, подвергнутых давлению до 20 ГПа. Для установления зависимости потенциалов межатомного взаимодействия в FeI₂ от давления рассчитаны зависимости, связывающие постоянную Маделунга с параметрами решетки, долей ионной связи и углом связи в структуре I–Fe–I. В результате была выявлена сильная корреляция между постоянной Маделунга, процентом ионной связи и углом связи в зависимости от давления. В результате установлены весьма инте-

ресные закономерности: при увеличении давления, кулоновская энергия, которая зависит от постоянной Маделунга и процент ионной связи имеют тенденцию к снижению, тогда как энергия ковалентных связей имеет тенденцию к увеличению. Обнаружено, что при давлении $P=16.9$ ГПа постоянная Маделунга, процент ионной связи и угол связи в структуре I–Fe–I достигают хорошо выраженных минимальных значений. Как следствие, при более высоком давлении энергия связи в кристаллической структуре FeI_2 , состоящая из кулоновской и ковалентной энергий, достигает своего минимального значения в 6.46 эВ, что приводит к дестабилизации структуры и частичному переходу начальной фазы FeI_2 в новую фазу. На основании этого сделан вывод о том, что для FeI_2 и соединений, изоструктурных с этим кристаллом, анализ зависимости константы Маделунга и угла связи от изменения давления может быть полезен в прогнозировании возможных структурных фазовых переходов в условиях высокого давления.

В работе [8] определяется постоянная Маделунга для монокристалла SrF_2 , находящегося в интервале температур 4.2-300 К. Упругие постоянные и постоянная Маделунга SrF_2 рассчитываются из теоретически модели с жесткими ионами. В соответствии с классической теорией ионной решетки объемный модуль упругости K задается как

$$K = \left[(n_0 - 1) \frac{A_M}{9\delta} \right] \left(\frac{q^2}{r_0^4} \right) \quad (1)$$

где A_M – постоянная Маделунга,

δ – постоянная, определяющая сингонию решетки,

n_0 – показатель, характеризующий отталкивающие силы в решетке,

q – электронный заряд ионов.

Полученные результаты были сопоставлены с другими щелочными редкоземельными соединениями (CaF_2 и BaF_2). Поскольку все три щелочноземельных фториды имеют одинаковую кристаллическую структуру, предположительно, они имеют одинаковые постоянные Маделунга и постоянную δ . Следовательно, если эта модель строго применима ко всем трем щелочноземельным фторидам, то приведенный объемный модуль упругости будет равен для всех трех кристаллов. Однако, в работе [8] показано, что это не так, поскольку модель жестких ионов наименее применима к фториду бария.

Из рассмотренных источников только в работе [3] рассматриваются структуры, которые имеют низкосимметричные сингонии, поэтому данная тема актуальна и малоизучена.

Рассмотрим основные методы расчета постоянных Маделунга с их достоинствами и недостатками. Классическим методом расчета постоянных Маделунга является метод прямого суммирования, разработанный Маделунгом в [1]. Этот метод является одним из самых простых подходов, однако, он предполагает очень низкую скорость сходимости рядов и расходимость рядов для сложных кристаллических структур. В [8,9] предложен простой метод, позволяющий улучшить сходимость ряда. Метод Эвьена заключается в выделении элек-

трически нейтральной группы частиц (нейтральные комплексы) так, чтобы общий заряд группы равнялся нулю, для дальнейшего вычисления решеточных сумм. Данный метод предполагает увеличение скорости сходимости рядов по сравнению с методом прямого суммирования, но его затруднительно применять для любых сингоний, кроме кубических, поскольку в сингониях, которые имеют низкую симметричность сложно выделять нейтральные ансамбли ионов.

Одним из наилучших методов по определению постоянной Маделунга считается метод Эвальда [10-12]. Метод суммирования по Эвальду, позволяет вычислять энергии взаимодействия периодических систем, в частности, энергии электростатических взаимодействий в кристаллах. Суммирование по Эвальду является частным случаем формулы суммирования Пуассона, в которой суммирование энергий взаимодействия в реальном пространстве заменяется на эквивалентное суммирование в пространстве Фурье:

$$-\nabla^2\Phi(\vec{r}) = 4\pi \sum_{j=1}^N q_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (2)$$

Достоинством этого подхода является быстрая сходимость рядов в пространстве Фурье по сравнению с эквивалентным суммированием в реальном пространстве (в том случае, если реальные взаимодействия являются дальними). Метод Эвальда применим также для реальных кристаллов, кристаллическая решетка которых отличается от идеальной, однако основным недостатком этого метода является математическая сложность (требуется вычисления тройных сумм от весьма сложных выражений) и недостаточно высокая сходимость рядов. Дополнительная трудность в методе Эвальда связана с выбором оптимального обрезающего фактора, с помощью которого выделяют для расчета некую область в кристалле [13]. В работе [14] сообщалось, что метод не подходит для геометрии нанолита (2D+h) и простых наноструктур. Методами улучшения метода Эвальда являются метод Эвальда-Шолла [15] и метод Эвальда-Авилова [16].

К современному методу расчета постоянных Маделунга относят такие методы как методы Харрисона, Гайо, Сильвестрелли и Сычева, которые можно объединить как метод «расширяющихся кубов» или «the method of expanding cubes» (ЕС). Наибольший вклад в развитие и формирование данного метода принадлежит Харрисону [17], поэтому в данной работе все интерпретации метода ЕС будем называть методом Харрисона. Этот метод имеет высокую скорость сходимости рядов и математическую простоту, поэтому является наиболее актуальным.

На данный момент существует две основные научные школы по исследованию постоянных Маделунга. Первая расположена в Австралии в университете Монаша (Monash University), а вторая в России в Амурском государственном университете во главе с доктором технических наук, профессором И.Е. Ерёмином. Большой вклад в развитие данной области исследований внесен А. Д. Бейкером (A.D. Baker) из колледжа Квинса (Queens College) в США и М.Д. Бейкером (M.D. Baker) из Гуэлфского университета (University of Guelph) в Канаде. На основании рассмотренной информации можно сделать заключение о

том, что расчет постоянных Маделунга для сложных кристаллических структур и реальных кристаллов является актуальной задачей современной физики конденсированного состояния.

Список литературы

1. Madelung E. *Phys. Zs.* 1918, **19**, P. 524-533.
2. Mrosan E. et al. Calculation of the Structural Energy of MgIn. *Phys. stat. sol.*, 1972, **51**(2), P. 793-800.
3. Izgorodina I.E. et al. The Madelung constant of organic salts. *Cryst. Growth Des.* 2009, **9**(11), P. 4834-4839.
4. Banerjee D.S. Direct calculation of Madelung constant. *M.Sc. thesis*, 2010-2012.
5. Baker A.D., Baker M.D. Madelung constants of nanoparticles and nano-surfaces. *J. Phys. Chem. C*, 2009, **113**, P. 14793-14797.
6. Watson R.E. et al. Madelung effects at crystal surfaces: Implications for photoemission. *Physical Review B*, 1981, **24**(4), P. 1792-1797.
7. Harutyunyan V.S. Anomalous behavior of the Madelung constant and I–Fe–I bonding angle at high-pressure induced structural phase transition of FeI₂. *Materials Chemistry and Physics*, 2020, **239**, P. 122315-122324.
8. Ewjen H.M. *Phys. Rev.*, **39**, 675 (1932).
9. Tosi M.P. Cohesion of ionic solids in the Born model. *Solid State Physics*, 1964, **16**, P. 1-120.
10. Ewald P. Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale. *Annalen der Physik*, 1921, **369**(3), P. 253-287.
11. Leibfried G., Hahn H. Zur Temperaturabhängigkeit der elastischen Konstanten von Alkalihalogenidkristallen. *Zeitschrift für Physik*, 1958, **150**(4), P. 457-525.
12. Fuchs K. A quantum mechanical calculation of the elastic constants of monovalent metals. *Proceedings of the Royal Society. Mathematics, physics and engineering sciences*, 1935, **153**(880), P. 622-639.
13. Crandall R. E., Buhler J P. Elementary function expansions for Madelung constants. *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987, **20**(16), P. 5497-5510.
14. Lamba S. Dipolar interaction energy for a system of magnetic nanoparticles. *Phys. Stat. Sol. B.* 2004, **241**(13), P. 3022-3028.
15. Sholl C.A. The calculation of electrostatic energies of metals by plane-wise summation. *Proc. Phys. Soc.*, 1967, **92**, P. 434-445.
16. Авилов В.В. О вычислении постоянной Маделунга кристаллов. *ФТТ*. 1972, **14**(9), С. 2550-2554.
17. Harrison W.A. Simple calculation of Madelung constants. *Physical Review B*, 2006, **73**, P. 212103-212104.

МООК – ТЕХНОЛОГИИ В ON-LINE ОБУЧЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНОМУ КУРСУ ФИЗИКИ: РЕЗУЛЬТАТЫ, ПРОБЛЕМЫ И НОВЫЕ ПОДХОДЫ

**Микушев В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Никольский Д.Ю., PhD, Чирцов А. С., д-р техн. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учрежде-
ние высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет»,
Университет Аляски, Фэрбенкс (США),
Федеральное государственное автономное образовательное учрежде-
ние высшего образования «Санкт-Петербургский государственный элект-
ротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)»**

Идея использования МООС-технологий и складывающихся традиций on-line образования в интересах интенсификации и персонализации работы обучающихся требует серьезного обсуждения и анализа. Необходимость внимания к указанному кругу вопросов обусловлена целом рядом наложившихся во времени и взаимно усиливающих друг друга обстоятельств, к которым относятся:

- Гипер-популярность МООК-курсов, нарастающая на фоне триумфального развития Интернет-культуры;
- Падение привлекательности фундаментального образования;
- Экономический кризис, ориентирующий распределителей ресурсов на оптимизацию расходов в областях, не обеспечивающих быстрой окупаемости вложений.
- Мировые тенденции к снижению персональной ответственности за результаты деятельности и вытеснению форм сущностного контроля и анализа результатов простыми для формального учета и отклонений апелляции рейтинговыми показателями.

On-line курсы привлекли внимание заметной части прежних потребителей традиционного очного обучения своей доступностью и демократичностью, удобством выбора места и времени для просмотра, возможностью виртуального присутствия на ранее труднодоступных лекциях признанных на мировом уровне лидеров науки и лекторского мастерства, а так же необязательностью приложения собственных усилий для активного освоения и прохождения неформального контроля его результатов. Первоначально поставщики образовательных услуг в лице зарубежных ведущих университетов поддерживали развитие МООК-обучения, увидев в нем эффективный канал саморекламы. Однако популярность цифровых форм обучения начала расти столь стремительно и за короткий срок набрала такие масштабы, что сами ведущие университеты начали высказывать серьезные опасения по поводу кризиса традиционных форм классического образования.

В России активность в области разработки МООК пришла с некоторым запозданием и на первых этапах была сопряжена с попытками решения двух

существенно различающихся задач: 1) расширения ассортимента на рынке коммерческих образовательных услуг в востребованных областях обучения экономике, менеджменту, юриспруденции и т.д.; 2) попытке сохранения для будущих поколений уникальных наработок российских научно-образовательных школ в области передачи фундаментальных знаний в естественно-научных и физико-математических дисциплин. Весьма востребованная и быстро развивающаяся область электронного обучения ИТ-технологиям заняла промежуточную позицию между двумя указанными. По мере накопления опыта разработки отечественной MOOK-продукции и расширения практики их создания стал усиливаться интерес «сверху» к этой продукции как к визитной карточке учебных заведений и как к средству оптимизации численности ППС, занятой в области традиционного преподавания. Весьма красноречивой иллюстрацией последнего является озвученный призыв Высшей Школы Экономики к замене электронными средствами обучения преподавателей, не имеющих рейтинговых публикаций по теме читаемых ими курсов. Что же касается отношения к MOOK их потенциальных разработчиков – высококвалифицированных преподавателей, то их отношение к on-line обучению до сих пор остается если не настороженным, то, как минимум, существенно менее заинтересованным, чем к созданию носящих более фрагментарный характер электронных обучающих ресурсов (интерактивных компьютерных моделей, видео, тестов и т.д.) на предшествующих этапах компьютеризации образования.

Определенный интерес представляет анализ аудитории обучающихся с помощью создаваемых ресурсов. Приведенный ниже анализ основан на статистических данных, полученных в ходе Интернет-трансляций курсов физики, ориентированных как на учащихся старших классов средних учебных заведений, так и на студентов младших курсов вузов технических и физико-математических специализаций. Обращает на себя внимание факт сравнительно низкой заинтересованности в дополнительном on-line обучении учащихся, изучающими аналогичные курсы в рамках традиционного очного образования. Заметная доля студентов, стремящаяся облегчить сдачу экзамена по очному курсу путем его замены более простым электронным экзаменом или тестом прекращает посещение MOOK после первой текущей аттестации в тех случаях, если успешное прохождение последней требует овладения материалом на уровне, допускающем активное и творческое использование. Представители указанной категории слушателей малоактивны на электронных форумах, посвященных уточнению не до конца понятных аспектов и дискуссиям по материалам курсов. Во время устных экзаменов, проводимых на очной форме обучения экзаменуемые весьма неохотно используют дополнительную информацию, включенную в параллельно транслируемых on-line курс.

Гораздо более высокую активность в on-line обучении проявляют слушатели, возраст и уровень подготовленности которых свидетельствуют и низкой вероятности их параллельного изучения аналогичного очного курса. К ним относятся мотивированные учащиеся с более низких образовательных уровней и завершившие свое обучение лица, по тем или иным причинам не получившие

качественного образования в областях, соответствующих тематике транслируемого МООК. Вопросы этой категории обучаемых, как правило, носят весьма общий и качественный (не количественный) характер и в большей мере соответствуют дискуссиям, проводимым после научно-популярных лекций.

Категорией слушателей, наиболее полно и качественно осваивающей материалы МООК в современных форматах являются преподаватели, выступающие в качестве обучаемых либо с целью повышения своего профессионального уровня, либо ради общения с коллегой-автором, нередко в форме самоутверждения. Отдельную и весьма активную группу слушателей составляют активисты нетрадиционной науки и представители антинауки, пытающиеся использовать on-line-ресурсы в качестве трибуны для распространения своих идей и попыток дискредитации официальной науки. Кажется, оправданным и полезным пресекать какие-либо попытки дискуссий с этой категорией на учебных страницах и блокировать такого рода активность имеющимися в Интернет аппаратными средствами.

Еще на первых этапах компьютеризации образования авторами этих строк был сформулирован общий принцип, согласно которому замена апробированных и зарекомендовавших себя традиционных форм обучения компьютерными (цифровыми) оправдана лишь в тех случаях, когда последние дают новые возможности и преимущества по сравнению с традиционными подходами и методами. К таким преимуществам МООК-технологий следует отнести:

- Удобство объединения традиционных лекционных форм обучения с оригинальными электронными образовательными ресурсами, расширяющими стандартные возможности (демонстрация ресурсоемких расчетов, учебного видео, компьютерных моделей, on-line трансляций из удаленных лабораторий, историческим мест и т.д.).
- Существенный прогресс в решении проблемы составления расписания для организации встреч в одной пространственно-временной точке все более и более занятых квалифицированных преподавателей и активных мотивированных учащихся путем предоставления обоим сторонам возможности независимого выбора времени и места для чтения и прослушивания курса.
- Возможность решения весьма амбициозной и актуальной задачи организации массового индивидуализированного образования, ориентированного на индивидуальный потребности, запросы и способности учащегося.
- Существенная демократизация и интернационализация образования.

Наличие перечисленных преимуществ не означает целесообразности замены традиционного очного образования электронным ни сегодня, ни в обозримом будущем. Последнее должно стать разумным и дружелюбным дополнением основных форм. Решение сформулированных глобальных задач сегодня сдерживается рядом проблем, с неизбежностью возникших в практике создания и использования МООК:

Наличие серьезных противоречий между возникшей «Интернет-культурой общения», носящей явно лозунговый, предписывающе-констатирующий характер и российскими традициями оцененного на мировом

уровне фундаментального образования, ориентированного не столько на изложение фактов, сколько на рассмотрение лежащих в их основе принципов;

- Отсутствие в имеющихся сегодня средах для разработки и публикации (трансляций) MOOK средств углубленного контроля качества и уровня освоения материала обучаемым, более приближенного к традиционным для очного обучения методам;
- Современная ориентация on-line обучение на создание авторских законченных полных курсов, приводящая к повторам в разработках отдельных модулей курсов различными авторами.
- Наличие многочисленных попыток создания упрощенных поверхностных курсов с многообещающими названиями, а также – курсов с заведомо искаженными (вплоть до явно антинаучных) идеями или результатами.
- Нередко реализуемый в стандартах MOOK приоритет формы над содержанием (например, достаточно жесткое ограничение длительности видео фрагментов, нередко приводящее к удалению из on-line лекций существенных для адекватного понимания фрагментов).

Пути решения перечисленных проблем и результатам апробаций оригинальных идей в реально созданных курсах посвящена достаточно много работ [1-6]. Общим направлением работ является попытка создания многоуровневого интерактивного курса физики, построенного по модульному принципу и позволяющего обучающемуся самостоятельно (или с помощью руководителя) выбирать для себя индивидуальную образовательную траекторию и корректировать ее при необходимости в ходе обучения.

Наряду с модулями официально создаваемых завершенных целостных курсов для сборника в инициативном порядке создаются отдельные модули в условном формате «out-of-doors». При их разработке в порядке эксперимента допускаются определенные нарушения соблюдаемых в MOOK стандартов в тех случаях, когда это кажется оправданным с точки зрения сущностного предметного обучения (выбор соответствующей логике подачи материала длительности фрагментов, внеаудиторная съемка, использование музыкальных фрагментов и т.д.).

Несмотря на гиперпопулярность этой технологии массового образования, практика ее использования демонстрирует ряд серьезных недостатков, к которым прежде всего следует отнести проблему эффективного контроля результатов обучения и трудности включения в on-line формат активных и поисково-исследовательских форм работы обучаемых. Указанные проблемы важны с точки зрения применимости MOOK для предоставления высококачественного образования наиболее подготовленным и мотивированным обучаемым.

Для решения первой из задач разрабатывается среда интерактивного обучающего тестирования, поддерживающая диалог с экзаменуемым путем автоматической генерации подсказок и уточняющих вопросов на основе анализа получаемых ответов. Эффективным путем внедрения в удаленное обучение исследовательской компоненты работы учащихся является

использование интерактивных компьютерных моделей изучаемых явлений и систем. Наибольший интерес представляют интерактивные модели, открывающие возможность организации обучения в форме мини-исследований [7]. Трудоемкость массовой разработки таких продуктов ставит вопрос о создании специализированных программных средств для их производства. В этой связи оказывается весьма перспективным создание простых и удобных для использования электронных конструкторов интерактивных симуляторов физических систем [8-10].

Базой для разработки удовлетворяющих сформулированным требованиям простых и универсальных электронных конструкторов стал предложенный авторами оригинальный подход, названный ими «Физическим объектно-ориентированным моделированием» (ФООМ) [11, 12]. В его основе лежит общая логика построения физики, стремящейся к максимально упрощенному описанию многообразной действительности путем ее представления в виде совокупности элементов, число базовых типов которых невелико. Такой подход хорошо соответствует идеологии объектно-ориентированного программирования, что открывает возможность использования последнего для разработки электронных конструкторов моделей физических систем, максимально приближенных к принятому в физике их описанию как совокупностей элементарных объектов с относительно простыми и легко формализуемыми на языке математики алгоритмами поведения. В рамках классической физики это соответствует представлению тел в виде совокупностей материальных точек или их систем, поведение которых описывается классическими уравнениями динамики или их релятивистскими аналогами. Взаимодействия между материальными точками в рамках такого подхода могут описываться при помощи силовых полей, корректируемых в зависимости от конфигурации моделируемой системы.

Автоматизированная генерация виртуальных систем осуществляется путем их сборки из элементов периодически дополняемых библиотек объектов, порождаемых базовыми классами *_Particle* и *_Field*, основанные на концепции прототипов в языке JavaScript. Другие объекты из различных JavaScript библиотек (WebGL, Three.js, dat.gui, EditableGrid) обеспечивают диалогов с пользователем и визуализацию результатов моделирования в запрашиваемой им форме. Современная HTML5 и JavaScript версия программы содержит около двадцати объектов, принадлежащих этим трем базовым семействам.

В ходе моделирования фокус активности поочередно передается каждому из объектов сгенерированной системы. Активный объект опрашивает все принципиально способные повлиять на его эволюцию объекты об их состояниях, после чего самостоятельно вырабатывает «стратегию своего поведения» на очередном шаге интегрирования в зависимости от собственной настройки и методов его класса.

Использованный подход к моделированию не требует составления систем дифференциальных уравнений, описывающих систему в целом, или разработки каких-либо глобальных алгоритмов для численного моделирования каждой конкретной созданной системы. Любое редактирование модели практически не

изменяет ее описания: уничтожение, добавление или изменение любого элемента системы учитывается автоматически через изменение потоков данных, которыми обмениваются объекты виртуальной системы в ходе диалогов, имитирующих взаимодействия.

В настоящее время ставшие популярными новые подходы к обучению с использованием удаленных on-line курсов в МООС-форматах фокусируют внимание участников учебного процесса на увеличении доли самостоятельной творческой работы обучаемых с элементами исследовательской и поисковой работы. Последнее ставит вопрос о создании открытых для пользователей (преподавателей и учащихся) механизмов создания своих оригинальных моделей физических систем, их сохранения, использования и передачи коллегам по учебному процессу. С другой стороны, современная политика сетевой безопасности существенно ограничила возможности широкого использования электронных моделей, реализованных в формате Java-апплетов.

В этой связи была создана новая версия двух программ - генератора моделей систем движущихся в силовых полях взаимодействующих друг с другом классических и релятивистских частиц и визуализатора полей от произвольно распределенных источников. Вторая из программ дополнена возможностью визуализации потенциалов (скалярного - в виде эквипотенциальных поверхностей и векторного - в виде линий поля **A**). Обе программы объединены в общий блок, допускающий одновременные 3D – визуализации (в виде допускающих вращения 2D-проекций и/или в стереоскопическом варианте) силовых полей и движений частиц в них.

Новый вариант программы выполнен на языке Java-Script, что обеспечивает ее общедоступность. В настоящее время генератор интерактивных моделей размещен на серверных ресурсах университета Аляски по адресу <http://3dspace.alaska.edu/>.

Ресурс содержит пополняемую библиотеку моделей, допускающих редактирование пользователем в on-line режиме. Наиболее важной является открытая для пользователей возможность самостоятельного создания собственных моделей, путем их описания в текстовых файлах, формат которых столь прост и очевиден, что при наличии примера не требует от пользователя сколько-нибудь значительных усилий по его изучению. Последнее позволяет пользователя создавать собственные библиотеки их личных оригинальных разработок и обмениваться ими с участниками учебного процесса с помощью стандартных средств пересылки малообъемных текстовых файлов.

Апробация рассмотренного ресурса в реальном удаленном учебном процессе производится в рамках проектов создания on-line курса «Классическая и релятивистская электродинамика» для студентов бакалавриатов технических университетов, учебного комплекса для смешанного очно-заочного обучения по дисциплине «Концепции современного естествознания» в педагогических университетах, при организации специализированного потока углубленного изучения физики с СПб Электротехническим университетом ЛЭТИ, в экспери-

менте по созданию Интернет-ресурса для непрофессионалов, желающих самостоятельно изучать современную физику.

Разработанный и использованный для создания серий компьютерных моделей электронный конструктор продемонстрировал свою пригодность для решения задач обеспечения развития массового индивидуализированного обучения и организации поисковых форм учебной работы с элементами научных исследований. После апробации нового варианта объединенного конструктора планируется работа по его дополнению возможностями и сервисами, реализованными в других генераторах моделей, разработанных в рамках реализуемого проекта. Параллельно ведутся работы по применению рассмотренных подходов к разработке электронных конструкторов для автоматизированного создания новых электронных ресурсов учебно-научного назначения по квантовой физике, химии и физике нелокальной плазмы [8, 13, 14].

Список литературы

1. Чирцов А.С. Кинематика [Электронный ресурс]: Лекториум [сайт]. – Режим доступа: <https://www.lektorium.tv> (дата обращения: 27.02.2017).
2. Чирцов А.С. Небесная механика [Электронный ресурс]: Лекториум [сайт]. – Режим доступа: <https://www.lektorium.tv> (дата обращения: 27.02.2017).
3. Чирцов А.С. Физическая оптика [Электронный ресурс]: Открытое образование [сайт]. – Режим доступа: <https://openedu.ru/course/ITMOUniversity/PHYOPT/> (дата обращения 01.04,2018).
4. Чирцов А.С. Многоуровневый интерактивный курс физики [Электронный ресурс]: Utube [сайт]. - Режим доступа: https://www.youtube.com/channel/UC8KoVY1Rk1ygi5bRCJDLL_g/playlists?view_as=subscriber&sort=dd&shelf_id=10&view=50 (дата обращения 01.04,2018).
5. Чирцов А.С. Серия электронных сборников мультимедийных материалов по курсу общей физики: новые подходы к созданию электронных конструкторов виртуальных физических моделей с простым удаленным доступом /А.С. Чирцов// Компьютерные инструменты в образовании. – 2010. - № 6. - С. 42 – 56.
6. Микушев В.М. Использование компьютерного моделирования для организации активного изучения студентами курса физики /В.М. Микушев, А.С. Чирцов// Вестник Псковского государственного университета. Серия: естественные и физико-математические науки. – 2015. - № 7. – С. 127-132.
7. Чирцов А.С. Использование компьютерных технологий и моделирования для приближения лабораторных работ к научным исследованиям /А.С.Чирцов, В.П.Марек// Компьютерные инструменты в образовании. - 2014. - №1. - С. 44 -59.
8. Бутиков Е.И. Законы движения макроскопических тел. – Пакет обучающих и демонстрационных программ по курсу общей физики /Е.И.Бутиков, А.С.Чирцов// Model - oriented Data Analysis: сб. тр. III Международной конференции. Секция: Моделирование, оптимизация и обработка данных/ С.-Петербург, 1992. - Ч.2. - С.27.

9. Чирцов А.С. Использование физического объектно-ориентированного моделирования для развития индивидуализированного обучения и организации мини-исследований в курсах механики. /А.С.Чирцов и др.// Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. - 2017. - Т. 17. - № 2. - С. 201–214.
10. Chirtsov A.S. Automation of Creation of Educational Content for a Courses of Physics and Chemistry for Mass Individualized Education. /A.S.Chirtsov, S.V.Sychov// Science and Society. —2016. — №2. — P. 34 - 47.
11. Чирцов А.С. Физическое объектно-ориентированное моделирование в курсах механики: Монография: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2015. - 148 с.
12. Микушев В.М. Использование физического объектно-ориентированного моделирования в МООС по механике: Монография /Микушев В.М., Чайковская О.Н., Чирцов А.С.; Томск: Изд-во НТЛ, 2015. – 36 с.
13. Chirtsov A.S. Numerical Simulation of Glow Discharge in Air Mixtures under Low Pressure Conditions/ A.S. Chirtsov, V.M. Mikushev, E.V. Lebedeva// International Journal of Applied Engineering Research. - 2016. - Vol. 11. - № 24. - P. 11836 –11846.
14. Chirtsov A. Training software apparatus for a plasma physics course /A.Chirtsov, S. Sychov, V. Mikushev// Proceedings of the 2nd World Conference on Smart Trends in Systems, Security and Sustainability, World S4 2018/ London: IEEE, 2019. – P. 292-296.

ПРОБЛЕМА ПРЕЕМСТВЕННОСТИ ЗНАНИЙ ПО ФИЗИКЕ В СРЕДНЕЙ И ВЫСШЕЙ ШКОЛЕ

**Огерчук А.А. канд. пед. наук, Пискарьёва Т.И., канд. техн. наук,
Анисина И.Н., канд. техн. наук,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

В настоящее время главной целью образования является формирование разносторонне развитой личности, способной реализовать свой потенциал в динамичных условиях, адекватно реагировать на ситуацию, работать в коллективе. Для этого необходимо создание благоприятных условий и возможностей, которые предполагают полноценное развитие личности и систематическое обновление образования.

Основная современная проблема технического образования связана со слабой подготовкой школьников по физике. Количество выпускников средних школ в последние годы существенно сократилось, более сильные поступают в высшие учебные заведения крупных городов. Это приводит к тому, что проходной балл по физике в последние несколько лет при поступлении в периферийные вузы значительно снижен. В настоящее время вузы лишены права проводить вступительные экзамены и вынуждены принимать абитуриентов с низким уровнем подготовки по таким предметам, как физика и математика, тем самым им навязали абитуриентов с низким уровнем подготовки [1].

Физика в высшей школе начинается с первого курса и опирается на фундамент школьной программы, который часто оказывается не сформированным. Слабая подготовка школьников по физике не позволяет должным образом усвоить материал вузовского курса. Отметим наиболее характерные черты, присущие большинству первокурсников, которые не позволяют им надлежащим образом изучать физику и затем эффективно применять физические знания в решении прикладных задач. Это и неумение отличать истинное рассуждение от ложного, необходимые условия от достаточных, главное от второстепенного, то, что необходимо помнить, а что можно и забыть. Прослеживаются стереотипность восприятия информации, искаженные и даже неверные стереотипы, снижение общего культурного уровня. Несмотря на то, что изучение физики имеет важное значение в современном мире, в процессе преподавания возникают следующие проблемы:

- 1) отсутствие интереса к изучаемому предмету;
- 2) отсутствие у студентов критического отношения к своим знаниям;
- 3) недостаточно сформированное в процессе изучения школьной физики логическое мышление;
- 4) умение студентом понять вопрос преподавателя и сформулировать свой вопрос и ответить на него;
- 5) невозможность воспринять связи с законами других естественных наук.

6) недостаточность математической подготовки в школе для успешного и комфортного продолжения образования в техническом вузе;

7) сокращение числа часов на преподавание, что приводит к невозможности должным образом изложить материал.

Таким образом, цель преподавания физики в современной школе заключается в развитии у учащихся способности размышлять, наблюдать, зарождать у них интерес к явлениям и процессам окружающего мира [2,3].

На первой неделе обучения в Оренбургском государственном университете принято проводить тестирование по физике с целью выявить студентов, нуждающихся в особом внимании со стороны преподавателей, обозначить темы, вызывающие наибольшие трудности, в связи с этим скорректировать планы семинаров, правильно организовать самостоятельную работу студентов. Это позволяет вчерашним школьникам «плавно» и быстрее перейти от задач школьной программы к более содержательным задачам общей физики. Тест, который традиционно предлагается первокурсникам, содержит десять задач [4]:

Вариант №...

1. Выразите плотность $\rho = 3 \text{ г/см}^3$ в кг/м^3 .

2. Опыт Штерна по определению скорости молекул.

3. Конденсатор и катушка соединены последовательно. Ёмкостное сопротивление равно 5 кОм. Какой должна быть индуктивность катушки, чтобы резонанс напряжений наступил при частоте тока 20 кГц?

А) 0,10 Гн **В) 0,08 Гн** С) 0,06 Гн Д) 0,04 Гн Е) 0,02 Гн

4. За какое время сделает 100 оборотов колесо, имеющее угловую скорость $4\pi \text{ рад/с}$?

А) 25с В) 20 с С) 40 с **Д) 50 с** Е) 400 с

5. Во сколько раз возрастает импульс тела при увеличении его кинетической энергии в три раза?

А) в 9 раз **В) в $\sqrt{3}$ раз** С) в 3 раза Д) в 2 раза Е) не меняется

6. Тело массы 0,5 кг бросили вертикально вверх со скоростью 20 м/с. Если за все время полета силы сопротивления воздуха совершили работу, модуль которой равен 36 Дж, то тело упало обратно на землю со скоростью

А) 20м/с В) 8 м/с С) 12 м/с Д) 10 м/с **Е) 16 м/с**

7. К валу приложен вращающий момент 100 Н·м. На вал насажено колесо диаметром 0,5 м. Какую минимальную касательную тормозящую силу следует приложить к ободу колеса, чтобы колесо не вращалось?

А) 200 Н **В) 400 Н** С) 100 Н Д) 50 Н Е) 800 Н

8. Гальванический элемент с внутренним сопротивлением $r=6 \text{ Ом}$ замкнут на сопротивление $R=24 \text{ Ом}$. При каком другом внешнем сопротивлении полезная мощность цепи будет такой же?

А) 9,5 Ом В) 6,5 Ом С) 4,5 Ом Д) 2,5 Ом **Е) 1,5 Ом**

9. Какой из приборов используют для регистрации альфа – частиц?

А) спектрограф В) циклотрон С) фотоэлемент **Д) камера Вильсона** Е) лазер

10. Расстояние между источником света и экраном равно 1,6 м. Когда между ними поместили собирающую линзу на расстоянии 0,4 м от источника,

то на экране получилось его четкое изображение. Чему равно главное фокусное расстояние линзы?

- А) 0,8 м В) 0,6 м С) 0,5 м Д) 0,4 м **Е) 0,3 м**

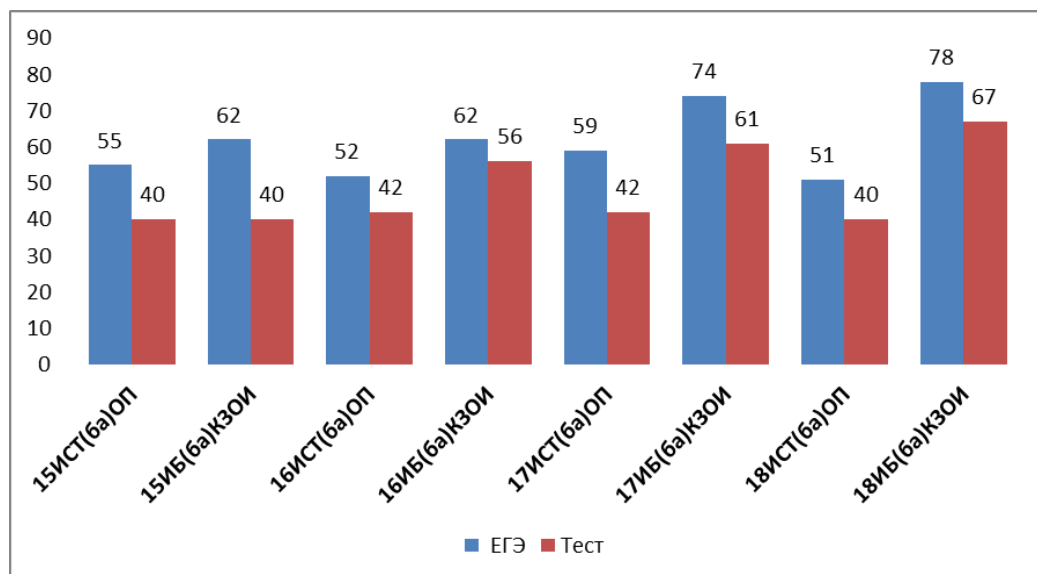


Рисунок 1. Среднее значение балла по ЕГЭ и входного теста.

На рисунке 1 представлены средние значения балла ЕГЭ по физике и теста студентов направлений подготовки 10.03.01 «Информационная безопасность» и 09.03.02 «Информационные системы и технологии» с 2015 по 2018 год. Видим некоторое увеличение баллов за прошедшие 3 года. Несмотря на то, что каждый год происходят какие-то реформы и перестроения в образовании, порядка 20% студентов ежегодно не справляются с тестовым заданием. Наиболее плохо первокурсники справляются с преобразованиями единиц измерения (система СИ) и качественными заданиями, совершают ошибки в математических преобразованиях с буквенными выражениями и не справляются с графическими задачами и задачами, требующими для решения геометрических построений и использования векторной алгебры.

Распределение оценок первой экзаменационной сессии, представленные на рисунке 2, коррелируют с результатами вводного тестирования. Нужно отметить, что студенты, поступающие на направления «Информационная безопасность» являются более подготовленными по физике и, следовательно, успешнее сдают экзамен.

Для устранения разрыва между потребностями вузовской программы по физике и уровнем подготовки студентов необходимо в курс физики первого семестра включить повторение необходимых тем школьной физики, плавно интегрируя его в процесс изучения нового материала.

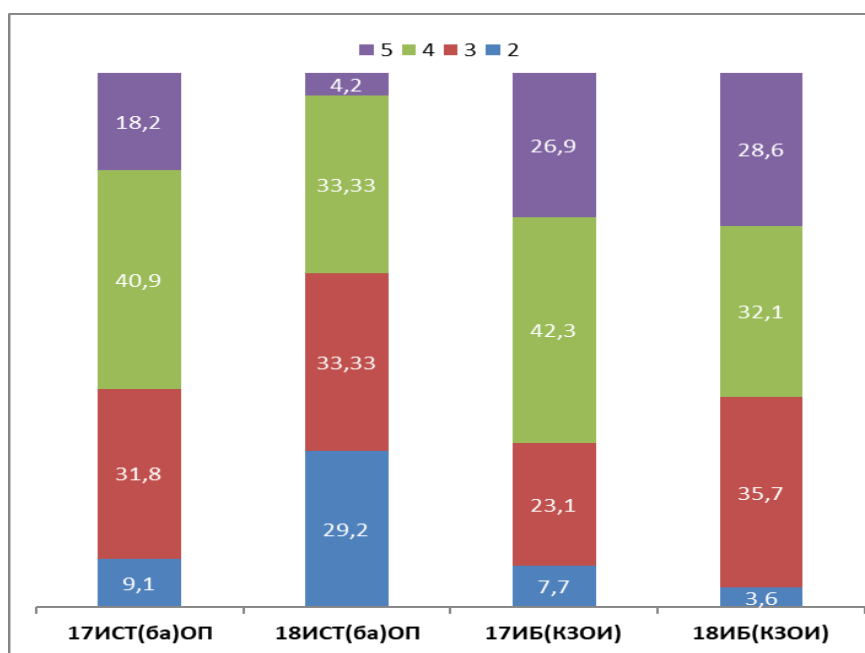


Рисунок 2. Результаты экзамена по физике в первом семестре.

Преподаватели, ведущие занятия в группах, должны помочь студентам, показавшим на тестировании низкий результат, восполнить пробелы школьной физики. Здесь важна правильная организация самостоятельной работы, в том числе, с учебно-методической литературой, использование дистанционных форм обучения, непосредственный контакт преподавателя со студентом на занятиях.

Для повышения качества преподавания физики необходимо, во-первых, использовать самые современные электронные технологии, современное оборудование. Во-вторых, нужно объяснить студентам значимость данной дисциплины; обеспечить методами физического исследования при изучении базовых разделов физики; сформировать понимание физического содержания в своем направлении подготовки. Процесс обучения физике должен быть непрерывным, так как физика является основой дисциплин технического направления. Для преодоления указанных проблем вузам необходимо работать в тесном контакте со школами по совершенствованию программ профильного инженерно-технического обучения по физике, добиваясь преемственности в образовании на разных уровнях обучения, сближению форм и методик преподавания.

Список литературы

1. Ефремова, Н.А. О некоторых проблемах обучения физике в вузе / Н.А. Ефремова, В.Ф. Рудковская, Е.С. Витюк // Современные наукоемкие технологии. – 2016. – № 8-1. – С. 116-120. [Электронный ресурс] <http://top-technologies.ru/ru/article/view?id=36114>
2. Ерофеева, Г.В. Физика - проблемы обучения [Текст] : научное издание / Г.В.Ерофеева, Е. А.Склярова, А. М. Лидер // Фундаментальные исследования –

2013. – № 6. – С. 982-984. [Электронный ресурс] <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=31676>

3. Попцов, А.Н. Использование информационно-коммуникационных технологий в процессе учебной адаптации студентов первого курса при обучении физике / А.Н. Попцов, С.А. Суровикина // Современные проблемы науки и образования. –2012. – № 5. [Электронный ресурс] <https://science-education.ru/ru/article/view?id=7327>

4. Чакак, А. А. Реальные тесты по физике и ответы [Текст]: учеб. пособие по физике для подгот. к единому гос. экзамену / А. А. Чакак; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. агентство по образованию, Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования "Оренбург. гос. ун-т", Каф. общ. физики. - Оренбург : ГОУ ОГУ, 2007. - 732 с.

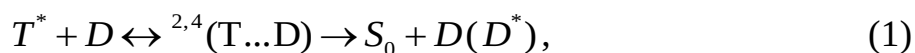
МАГНИТНЫЙ ОТКЛИК ВЫХОДА РЕАКЦИИ ТРИПЛЕТ-ДУБЛЕТНОГО ТУШЕНИЯ В СФЕРИЧЕСКОЙ НАНООБЛАСТИ

Пеньков С.А., Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор
Центр лазерной и информационной биофизики,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Среди спин-селективных процессов с участием возбужденного триплетного состояния, наибольший интерес исследователей вызывает процесс триплет-триплетной аннигиляции (ТТА), известный тем, что энергии триплетов складываются в процессе аннигиляции, образуя при этом антистоксову компоненту в спектрах излучения, тогда как в процессе тушения возбужденного триплетного состояния спиновым дублетом (Т-D тушение), энергия триплета теряется. Однако для создания ТТА требуются особые условия, такие как высокая интенсивность возбуждающего света, низкая температура и т.д., которые не всегда совместимы с условиями в прикладных задачах. Вместе с тем, спиновые дублеты, такие как свободные радикалы, электроны и дырки, могут образовываться как естественным путем, под воздействием внешних факторов (УФ излучение, химические реакции и т.д.), так и специальным допированием, облучением УФ излучением, пропусканием электрического тока и т.д., делая относительно доступным получение Т-D тушения в прикладных задачах.

Особый интерес представляют спин-селективные реакции, где реагенты локализованы в областях нанометровых размеров, исследованию которых, различными методами, были посвящены работы [1-7]. Однако в упомянутых работах, для описания диффузии реагентов не применялся удобный для таких задач метод функций Грина. Для расчетов магнитопольевых эффектов реакции Т-D-тушения в нанобласти здесь мы используем именно этот метод решения краевой задачи уравнения диффузии.

В ходе протекания реакции тушения возбужденного триплетного (Т) состояния дублетом (D), реагенты проходят стадию формирования парного спин-нового состояния. В частности, для Т-D-пары:



где S_0 – основное состояние донора энергии, а ${}^{2,4}(T...D)$ – спин-коррелированная триплет-дублетная пара со спиновыми состояниями:

$$\begin{aligned} |3/2, +3/2\rangle &= | +1, +1/2\rangle = |Q_{+3/2}\rangle, \\ |3/2, +1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \{ | +1, -1/2\rangle + \sqrt{2} | 0, +1/2\rangle \} = |Q_{+1/2}\rangle, \end{aligned}$$

$$|3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |-1, +1/2\rangle + \sqrt{2} |0, -1/2\rangle \} = |Q_{-1/2}\rangle, \quad (2)$$

$$|3/2, -3/2\rangle = |-1, -1/2\rangle = |Q_{-3/2}\rangle;$$

$$|1/2, +1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \sqrt{2} |+1, -1/2\rangle - |0, +1/2\rangle \} = |D_{+1/2}\rangle,$$

$$|1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ \sqrt{2} |-1, +1/2\rangle - |0, -1/2\rangle \} = |D_{-1/2}\rangle.$$

Спин-гамильтониан такой Т-D-пары имеет вид [8-9]:

$$H = g_T \mu_B B S_{Tz} + g_D \mu_B B S_{Dz} - 2J_{exc} \mathbf{S}_D \mathbf{S}_T - \mathbf{S}_T \tilde{\mathbf{D}} \mathbf{S}_T, \quad (3)$$

где два первых слагаемых правой части определяют энергию зеемановского взаимодействия триплетной и дублетной молекул с магнитным полем индукции $\mathbf{B}$; третье слагаемое определяет межмолекулярное обменное взаимодействие, а четвертое – внутритриплетное спин-спиновое взаимодействие. Операторы $\mathbf{S}_T, \mathbf{S}_D$ – векторные операторы электронных спинов молекул T и D ; $\tilde{\mathbf{D}}$ – тензор внутритриплетного спин-дипольного взаимодействия. $J_{exc}(r)$ – обменный интеграл.

Описание кинетики спин-селективной реакции тушения триплетных электронных возбуждений дублетами произведено на основе парного оператора плотности $\rho(t)$, удовлетворяющего уравнению со спин-гамильтонианом Т-D-пары (3):

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho(t)] - \frac{1}{2} \{ \rho \Lambda + \Lambda \rho \}, \quad (4)$$

где реакционный оператор Λ в (4) определяется через проектор $P_D = \sum_{M=\pm 1/2} |D_M\rangle \langle D_M|$ на дублетное состояние Т-D-пары и фиксированную скорость K_D на радиусе реакции r_D . Тогда $\Lambda = K_D \mathbf{e} \sum_{M=\pm 1/2} |1/2, M\rangle \langle 1/2, M|$.

Ранее было показано, что решение системы уравнений для матричных элементов оператора плотности с матрицей размера 6×6 , полученной на основе (4), с учетом спин-гамильтониана (3) и всех шести зеемановских уровней Т-D-пары, может быть представлено в аналитическом виде [8-9]. Поскольку реакция Т-D-тушения протекает через состояния $|D_M\rangle$, наибольший интерес представляет эволюция населенности именно парного спин-дублета. Подробное решение задачи спиновой эволюции для Т-D-пары было произведено в работе [8].

Диффузия реагентов в нанобласти шаровой формы (рис. 1) описывалась функцией Грина $G_1(r, \theta, \varphi; t)$, уравнение для которой определяется диффузионным оператором вида:

$$\hat{\Lambda}(r, \theta, \varphi; t) = \frac{\partial}{\partial t} - D_{diff} \frac{1}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right], \quad (5)$$

где граничные условия на поверхности сферы S_R отвечают краевой задаче Неймана (нулевой поток на границу). Полное описание решения рассмотренной задачи приведено в работе [10].

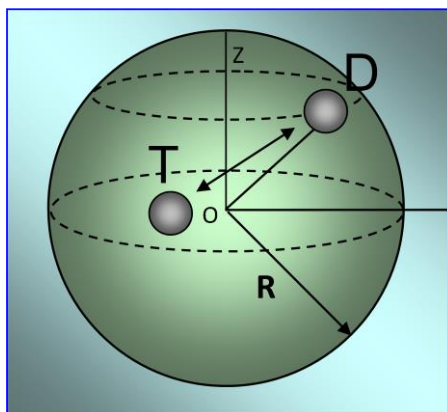


Рис. 1. Шаровая нанобласть объемом V_R с отражающей поверхностью – сферой S_R диффузии-реакции Т- и D-частиц.

Расчеты неселективной по спине средней скорости $\chi(t | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2)$ реакции тушения производились на основе аналогичного выражения для средней скорости аннигиляции [7, 10]:

$$\chi(t | \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \iint_{V_R} U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) G_1(\mathbf{r}_1, t | \mathbf{r}'_1) G_1(\mathbf{r}_2, t | \mathbf{r}'_2) d^3 r_1 d^3 r_2, \quad (7)$$

где $G_1(r, \theta, t | r', 0)$ - одночастичные функции Грина, а $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ - изотропная скорость дистанционного тушения.

Расчеты магнитопольевых эффектов $\gamma(B)$ (рис. 2-5), произведенные на основе выражения (8), показали сильное влияние геометрических, конфигурационных, кинетических и силовых параметров системы на абсолютную величину и «ширину линии» относительного изменения скорости реакции тушения [11]. Магнитопольевые зависимости определялись на основе модифицированного выражения (8), приведенного ранее в работах [8, 9]:

$$\gamma(B) = \frac{1 + c \int_0^{\infty} \rho(t|0) K_D \chi(t|r_1', r_2') dt}{1 + c \int_0^{\infty} \rho(t|B) K_D \chi(t|r_1', r_2') dt} . \quad (8)$$

Здесь, в (8) параметр c зависит от концентрации молекул тушителя и ряда кинетических параметров, характеризующих систему [8].

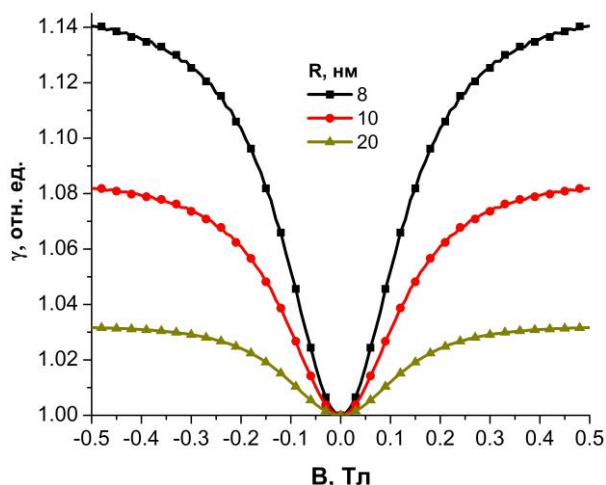


Рис. 2 Магнитополевые зависимости скорости Т-Д-тушения при различных значениях радиуса наночастицы R .

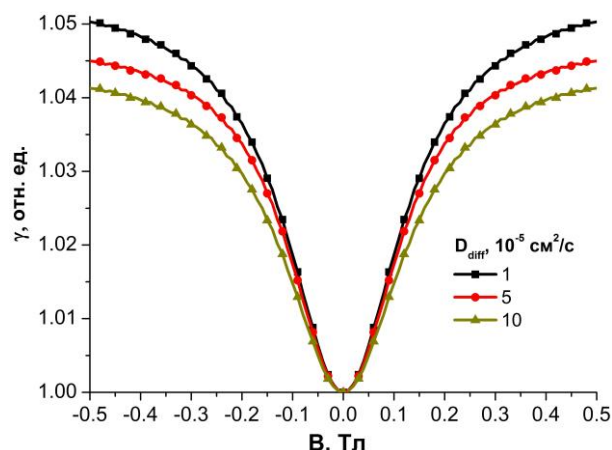


Рис. 3 Магнитополевые зависимости скорости Т-Д-тушения при различных значениях коэффициента диффузии D_{diff} Т-молекулы и неподвижного D-тушителя.

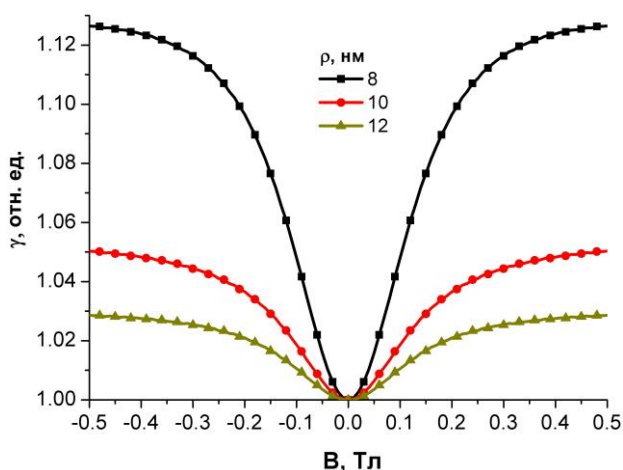


Рис. 4 Магнитополевые зависимости скорости Т-Д-тушения при различных значениях начального расстояния ρ между реагентами.

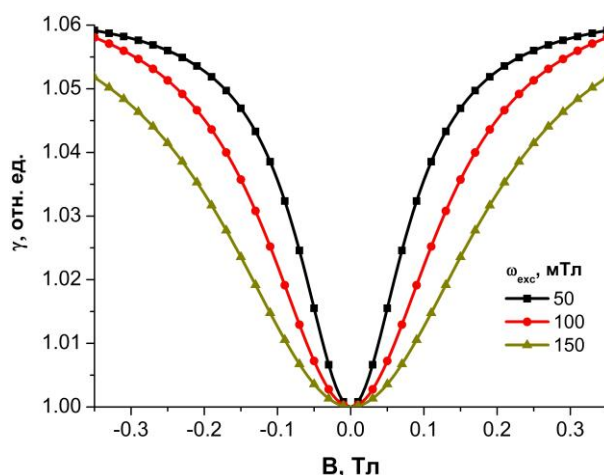


Рис. 5 Магнитополевые зависимости скорости Т-Д-тушения при различных значениях частоты ω_{exc} обменного взаимодействия в Т-Д-паре.

Обнаружено сильное возрастание абсолютного значения (амплитуды) магнитополевого эффекта в зависимости от радиуса R наночаровой области, при уменьшении которого от 20 нм до 8 нм относительное увеличение $\gamma(B)$ составляет $\sim 4,6$ раза (рис. 2). Влияние коэффициента диффузии на форму спектров магнитополевого эффекта схоже с влиянием параметров R и ρ . Однако при изменении коэффициента диффузии в широком диапазоне от $1 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, отвечающем жидким средам при комнатной температуре, до $10 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, отвечающей нижней границе для органических полупроводников (рис.3), изменения абсолютного значения магнитополевого эффекта не столь сильны по сравнению с зависимостями от параметров R и ρ . Еще более резкое возрастание абсолютного значения наблюдается в зависимости магнитополевого эффекта от начального расстояния $\rho = |\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}'_2|$ между реагентами в Т-D-паре. Так, при уменьшении начального расстояния между реагентами с 12 нм до 8 нм относительное увеличение $\gamma(B)$ составляет $\sim 4,1$ раза (рис. 4). Также, из рисунка 4 видно, что зависимость абсолютного значения магнитополевого эффекта от начального расстояния имеет нелинейный характер. Анализ уширения линий на рис. 2-4 требует дополнительных расчетов, которые не проводились в данной работе. Однако анализ уширения линий оптически детектируемого магнитного резонанса, сделанный в работе [7], показал экспоненциальный характер данных зависимостей, который позволяет предположить аналогичный характер зависимостей ширины от R , ρ и D_{diff} и в рассматриваемом случае. Вместе с тем, расчеты показали уширение в спектре магнитополевого эффекта, связанное с обменным взаимодействием в Т-D-паре (рис. 5).

Таким образом, в данной работе рассчитаны и проанализированы магнитополовые эффекты реакции триплет-дублетного тушения в шаровой нанобласти, решение уравнения диффузии для молекул-реагентов в которой построено на основе функции Грина краевой задачи Неймана.

Работа выполнена при поддержке грантом Минобрнауки РФ (Госзадание Министерства. Проект № 3.7758.2017/БЧ)

Список литературы

1. Кучеренко, М.Г. Влияние внешнего магнитного поля на скорость взаимной аннигиляции триплетных электронных возбуждений в наноструктурах с бистабильными пространственными состояниями / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Химическая физика и мезоскопия. 2014. Т. 16. № 4. С. 574-587.
2. Kucherenko, M.G. Cross-annihilation of triplet electronic excitations in nanostructures with two-pit potential and big zeeman's splitting / M.G. Kucherenko, S.A. Pen'kov // Материалы Российско-Японской конференции "Химическая физика молекул и полифункциональных материалов". 2014. С. 44-46.
3. Кучеренко, М.Г. Спектры RYDMR тушения возбужденных триплетных состояний молекул спин-дублетными акцепторами в наноструктурах / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Материалы Всероссийской научно-методической конференции «Университетский комплекс как региональный центр образования,

науки и культуры». Оренбургский государственный университет. 2017. С. 1796-1802.

4. Pen'kov, S.A. Fluorescence detected magnetic resonance spectra of annihilated molecular triplet pairs in spherical nanopores / S.A. Pen'kov, M.G. Kucherenko // Russian-Japanese Conference "Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials": proceedings. 2018. С. 44-46.

5. Пеньков, С.А. Размерный эффект магнитного отклика фотореакций в органических полупроводниках // Материалы Всероссийской научно-методической конференции «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский государственный университет. 2019. С. 2931-2934.

6. Пеньков, С.А. Оптическое детектирование магнитного резонанса мобильных триплетных молекул в нанопорах с парамагнитными центрами / С.А. Пеньков, М.Г. Кучеренко // В сборнике: VIII Международная конференция по фотонике и информационной оптике. Сборник научных трудов. 2019. С. 473-474.

7. Кучеренко, М.Г. Особенности детектирования магнитного резонанса реакций триплетных молекул по аннигиляционной замедленной флуоресценции в наноструктурированных средах / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Химическая физика и мезоскопия. 2019. Т. 21. № 2. С. 278-289.

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

9. Кучеренко, М.Г. Спин-селективные реакции и спиновая динамика когерентных триплет-триплетных и триплет-дублетных пар молекул в магнитном поле / М.Г. Кучеренко, С.А. Пеньков // Сборник материалов Международной научной конференции, посвященной 60-летию Оренбургского государственного университета «Наука и образование: фундаментальные основы, технологии, инновации». 2015. С. 161-167.

10. Кучеренко, М.Г. Кинетика диффузионно-ускоренной аннигиляции частиц в круговой или сферической области нанометрового радиуса // Вестник ОГУ. 2017. №7 (207). С. 97-104.

11. Пеньков, С.А. Влияние магнитного поля на люминесценцию органического полупроводника МЕН-PPV при атмосферном давлении и в условиях низкого вакуума / С.А. Пеньков, М.Г. Кучеренко // Материалы Всероссийской научно-методической конференции «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры». Оренбургский государственный университет. 2018. С. 2594-2598.

ИЗМЕНЕНИЕ МЕХАНИЗМОВ НЕЛИНЕЙНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕТИЛЕНОВОГО ГОЛУБОГО В ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ

Русинов А.П. канд.физ.-мат.наук, доцент;

Бардин В.Д., Николаев Н.А.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»,

Центр лазерной и информационной биофизики

Ключевые слова: *Нелинейная оптика, метод Z-сканирования, метиленовый голубой, плазмонные наночастицы, нелинейный коэффициент поглощения*

Методом Z-сканирования при непрерывной накачке исследованы нелинейно-оптические характеристики растворов метиленового голубого при различных концентрациях в водных и водно-спиртовых растворах. Показано, что в зависимости от концентрации красителя и вида растворителя меняется механизм нелинейного поглощения растворов. Произведена оценка нелинейно-оптических свойств растворов наночастиц серебра и квантовых точек CdSe и исследовано влияние плазмонных наночастиц на нелинейные характеристики растворов метиленового голубого. Так, при добавлении в раствор наночастиц Ag амплитуда нелинейного насыщения поглощения молекул красителя в перетяжке пучка накачки монотонно возрастает. При максимальной концентрации наночастиц просветление раствора увеличивается в 2.5 раза.

Введение

Нелинейные свойства оптических материалов, связанные с 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]

В качестве нелинейно-оптических сред широко используются жидкие растворы содержащие фотоактивные центры. По сравнению, например, с кристаллическими средами они более универсальны, параметры таких систем могут варьироваться в широчайших пределах за счет выбора состава. В качестве фотоактивных компонент растворов традиционно используются органические красители, в последнее время в этой роли выступают наночастицы металлов, полупроводниковые квантовые точки, углеродные наночастицы и их композиции [3-4].

Среди прямых методов измерения нелинейно-оптических свойств веществ в последнее время большое развитие получил метод Z-сканирования. Этот метод основан на измерении зависимости изменения интенсивности воз-

буждающего лазерного пучка, прошедшего через образец в дальней зоне, от положения образца относительно фокальной плоскости линзы. Это позволяет в 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 [1].

Материалы и методы

Для изучения нелинейно-оптических характеристик растворов реализована установка Z-сканирования на основе непрерывного полупроводникового лазера работающего на длине волны 650 нм. Оптическая схема установки показана на рисунке 1. Мощность лазера может варьироваться в диапазоне 50-150 мВт, радиус перетяжки пучка накачки в фокальной плоскости линзы w_0 равен 15 мкм, рэлеевская длина z_R – 1 мм и максимальная интенсивность светового потока в перетяжке $I_{\max}$ – 20 кВт/см². Диафрагма D_1 ограничивает диаметр пучка накачки, а с помощью диафрагмы D_2 осуществляется переключение режимов работы установки. В режиме открытой апертуры измеряется коэффициент нелинейного поглощения образца, а в режиме ограниченной (закрытой) апертуры определяется индекс нелинейной рефракции среды. Исследуемые растворы помещаются в кварцевую кювету толщиной 1 мм.

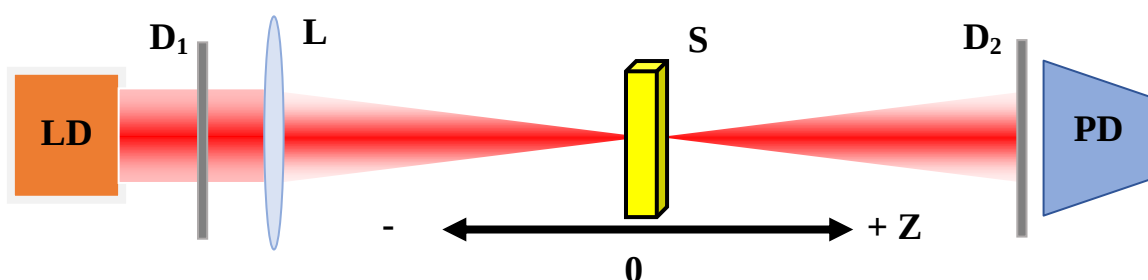


Рисунок 1. Схема Z-сканирования [3]. Здесь z – положение образца относительно фокуса линзы. LD-источник излучения, D_1 , D_2 -диафрагмы; L-линза, PD – фотодетектор, S-образец

Спектры оптической плотности исследуемых образцов регистрировались на спектрофотометре T70 (Великобритания).

Для сенсibilизации образцов к излучению лазера накачки и в качестве нелинейно-оптического зонда при исследовании растворов плазмонных наночастиц использовался органический краситель метиленовый голубой (Sigma-Aldrich, Германия) в воде или в водно-спиртовом растворе в концентрациях от 10^{-5} до 10^{-3} М. Молекулярная структура и спектры поглощения красителя приведены на рисунке 2.

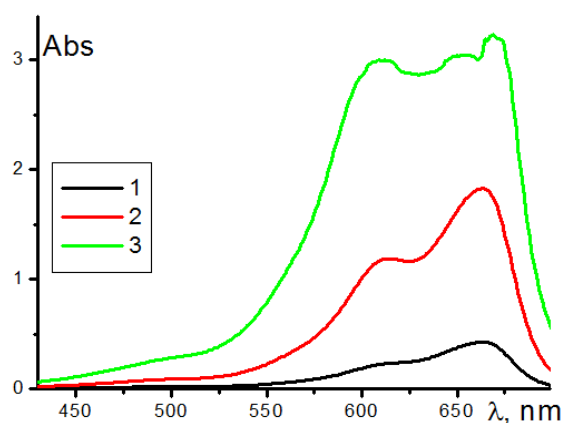


Рисунок 2. Молекулярная структура и спектры поглощения метиленового голубого с концентрациями 10^{-5} М, $5 \cdot 10^{-5}$, $1.2 \cdot 10^{-4}$ М.

В качестве плазмонных компонент синтезированы растворы наночастиц серебра по методике жидкофазного химического восстановления борогидридом натрия из соли нитрата серебра [5]. Плазмонный пик поглощения раствора металлических наночастиц лежит в области 410 нм при средних размерах частиц порядка 20-30 нм и концентрациях порядка 10^{14} см⁻³.

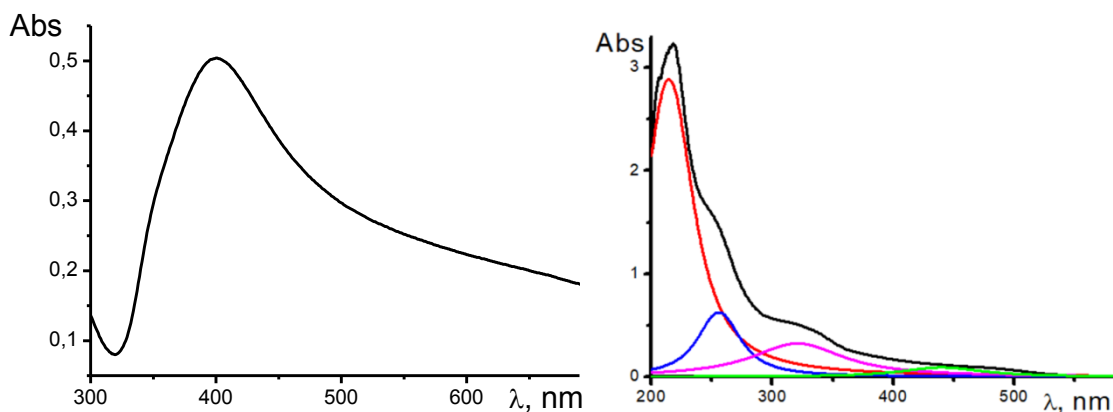


Рисунок 3. Спектр поглощения растворов наночастиц серебра и квантовых точек CdSe.

Коллоидный раствор квантовых точек CdSe получен методом гидротермального синтеза в водной среде из растворов ацетата кадмия и селенита натрия при стабилизации поверхности частиц тиогликолевой кислотой [6]. Полосы поглощения раствора квантовых точек расположены в диапазоне 300-450 нм.

Нелинейное поглощение водно-спиртовых растворов метиленового голубого

Методом Z-сканирования с открытой апертурой определяется нелинейное поглощение растворов органического красителя метиленового голубого. В зависимости от концентрации водные растворы данного красителя в режиме от-

крытой апертуры демонстрируют различные механизмы нелинейности (рисунок 4).

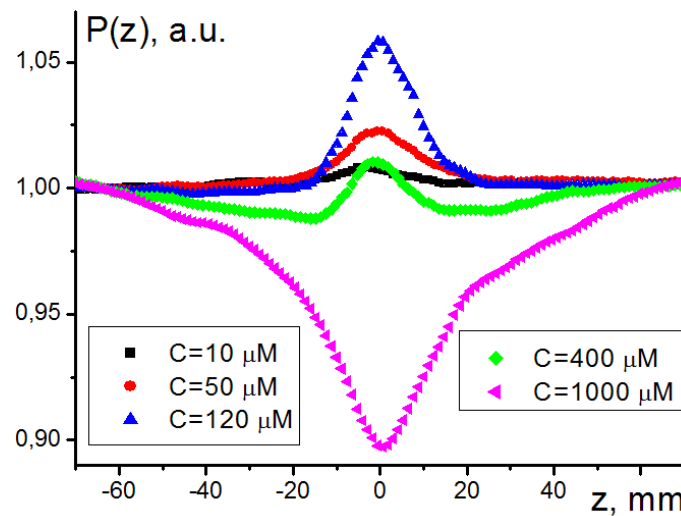


Рисунок 4. Сигналы Z-сканирования с открытой апертурой водных растворов метиленового голубого при различных концентрациях красителя

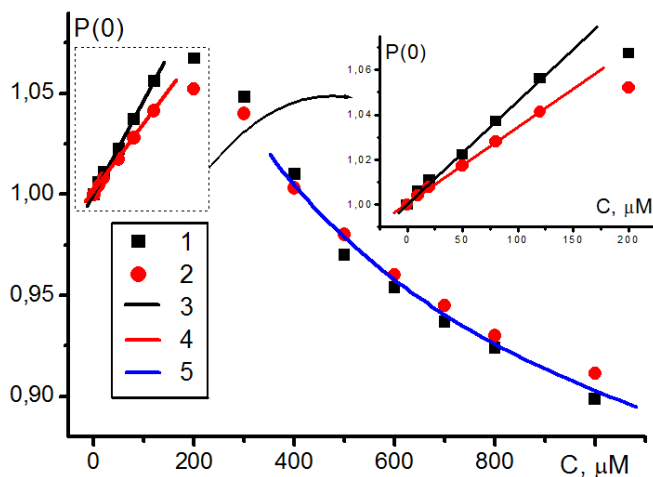


Рисунок 5. Зависимость амплитуды сигнала Z-сканирования в перетяжке пучка от концентрации красителя метиленового голубого в водном растворе. Сканирование вперед (1), сканирование назад (2), аппроксимирующие линии (3-4)

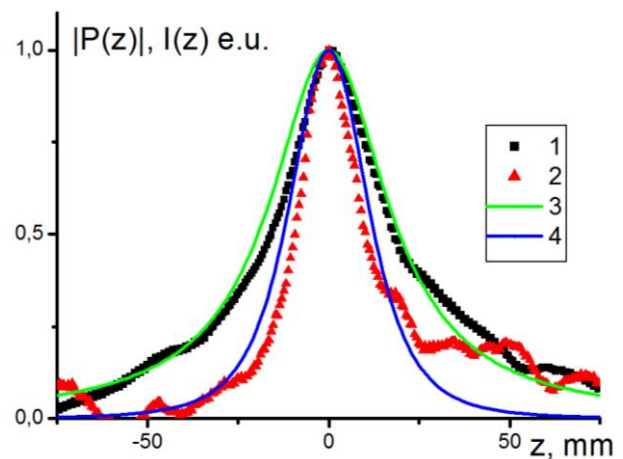


Рисунок 6. Относительная амплитуда нелинейного поглощения растворов метиленового голубого при концентрации 10^{-3} М (1), относительная амплитуда нелинейного просветления при концентрации $5 \cdot 10^{-5}$ М (2), интенсивность пучка накачки (3) и квадрат интенсивности пучка накачки.

При малых концентрациях метиленового голубого, порядка $C = 10^{-5}$ моль/л, сигнал в области фокуса пучка накачки (± 7 мм) начинает возрастать, что говорит об оптическом просветлении раствора. Данный эффект, как правило, связан с некогерентным насыщением поглощения, вследствие накопления

поглощающих молекул в возбужденных состояниях. С увеличением концентрации красителя амплитуда просветления возрастает, достигая максимальной относительной величины в 5% при $C = 1,2 \times 10^{-4}$ моль/л. Зная отношение амплитуд сигнала Z-сканирования в перетяжке и в крайних точках, можно определить вклад нелинейного просветления поглощения для раствора метиленового голубого.

При дальнейшем увеличении концентрации красителя сигнал Z-сканирования изменяется, в диапазоне (± 20 мм) его амплитуда начинает уменьшаться, т.е. имеет место усиление поглощения раствора, а вблизи фокуса процесс оптического просветления снова превалирует. При концентрации метиленового голубого выше 10^{-3} моль/л нелинейное усиление поглощения раствора становится преобладающим. Данный эффект может быть связан с агрегацией молекул красителя в димерные и тримерные формы, имеющей место при концентрациях свыше $1,2 \times 10^{-4}$ моль/л. В этом случае агрегированные молекулы взаимодействуют с излучением накачки слабее мономерных форм, но при большой плотности мощности агрегаты разрушаются, что ведет к увеличению концентрации мономеров и, следовательно, к усилению поглощения раствора.

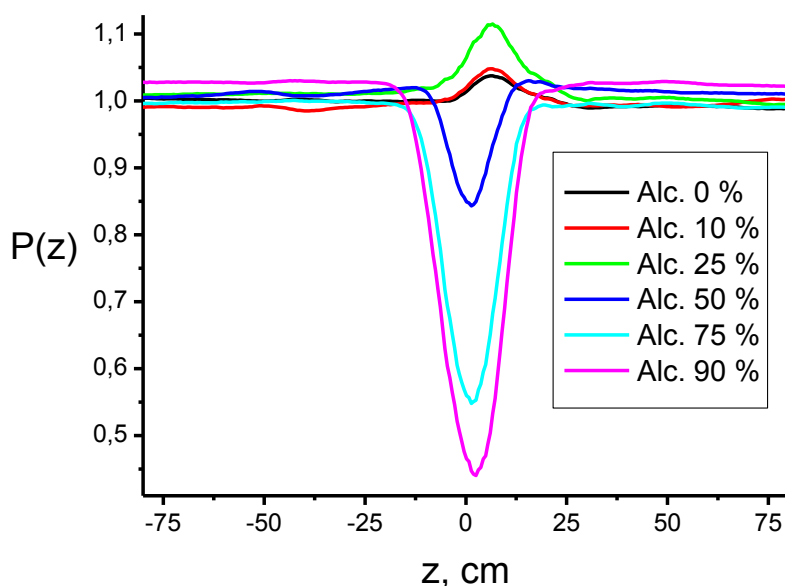


Рисунок 7. Сигналы Z-сканирования с открытой апертурой водно-спиртовых растворов метиленового голубого с концентрацией 5×10^{-5} моль/л при различных соотношениях этанол-вода.

Нелинейно-оптические свойства метиленового голубого также существенно зависят от вида растворителя. На рисунке 7 приведены сигналы Z-сканирования в смеси вода-этанол при неизменной концентрации красителя. Из графиков видно, что при увеличении доли спирта в растворе от 0 до 25% усиливается насыщение поглощения образцов до относительной величины в 10%. Это может быть связано с увеличением времени жизни возбужденных состояний молекул метиленового голубого в спиртовых растворах и, следовательно, с

увеличением их заселенности. Дальнейшее увеличение доли спирта в растворе (50 % и более) изменяет вид сигналов Z-сканирования, в перетяжке имеет место существенное ослабление сигнала, т.е. в растворе красителя проявляется нелинейное усиление поглощения. При этом амплитуда данного эффекта превышает 50%. Обсуждение механизмов изменения нелинейного поглощения водно-спиртовых растворов требует отдельной дискуссии, возможно это связано с поглощением света молекулами метиленового голубого в возбужденных состояниях.

Теоретическая модель формирования нелинейного отклика растворов молекул органического красителя

При теоретическом анализе спектров Z-сканирования в режиме открытой апертуры, как правило, рассматривается одномерная геометрия взаимодействия излучения и исследуемой среды на основе формализма нелинейного уравнения Ламберта-Бера

$$\frac{dI(z)}{dz} = -(\alpha_0 + \beta[I(z)])I(z),$$

где α_0 , β линейная и нелинейная части коэффициента поглощения $\alpha(I)$, z – координата вдоль оси пучка накачки.

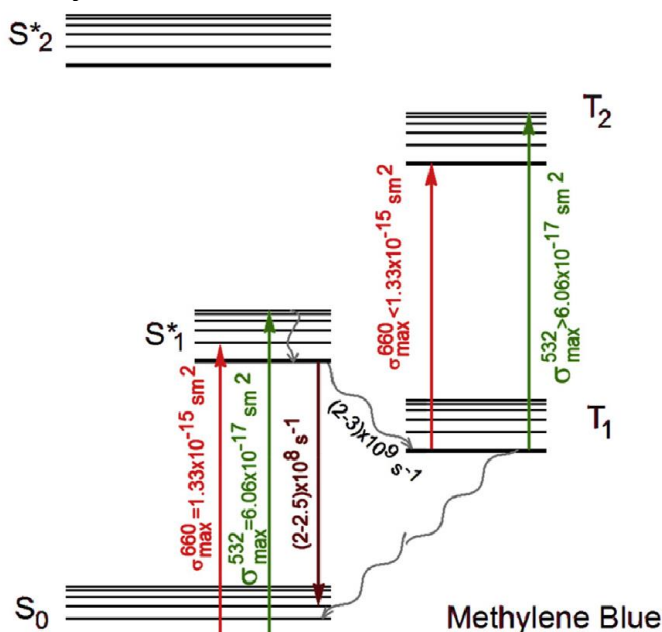


Рисунок 8. Энергетическая схема молекулы метиленового голубого [8]

В первом приближении гауссов радиальный профиль пучка накачки можно заменить однородным – с радиусом пучка $w(z)$ и интенсивностью $I(z)$. В приближении плоской волны,

$$w(z)^2 = w_0^2 \left(1 + \frac{z^2}{z_{Rl}^2} \right) \text{ и, соответственно } I(z) = I_0 \left(1 + \frac{z^2}{z_{Rl}^2} \right)^{-1},$$

где $z_{Rl} = \pi w_0^2 / \lambda$ - рэлеевская длина каустики гауссового пучка, λ - длина волны, w_0 - радиус и I_0 - интенсивность поля в перетяжке пучка отвечающей координате $z=0$.

Считая скорость перемещения образца вдоль оси пучка (скорость изменения интенсивности) малой по сравнению с характерными временами переходных процессов в среде, дальнейшее рассмотрение можно провести на основе анализа населённостей различных энергетических состояний поглощающих центров при постоянной накачке. Для описания энергетической структуры молекул органических красителей обычно используется 5-уровневая схема, где обозначено через S_0 – основное состояние молекулы, S_1 и S_2 нижнее и вышележащие по энергии синглетные, T_1 и T_2 нижнее и вышележащие по энергии триплетные возбужденные энергетические состояния соответственно.

На рисунке 8 показана схема уровней для молекулы метиленового голубого и приведены типичные сечения переходов для спектрального диапазона 500-700 нм [7]. При этом учитывая высокую скорость дезактивации состояний S_2 и T_2 (порядка 10^{13} - 10^{14} с⁻¹) можно считать их населенность близкой к нулю и, таким образом, ограничиться рассмотрением трехуровневой схемы [8].

Система балансных кинетических уравнений для населенностей n_0 , n_S , n_T может быть записана в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial n_0}{\partial t} = -[\sigma_{0S}n_0(t) - \sigma_{S0}n_S(t)]I + \frac{1}{\tau_S}n_S(t) + \frac{1}{\tau_T}n_T(t) \\ \frac{\partial n_S}{\partial t} = [\sigma_{0S}n_0(t) - \sigma_{S0}n_S(t)]I - \frac{1}{\tau_S}n_S(t) - K_{ST}n_S(t), \\ \frac{\partial n_T}{\partial t} = K_{ST}n_S(t) - \frac{1}{\tau_T}n_T(t) \end{cases}$$

где σ_{0S} , σ_{S0} - сечения поглощения индуцированных переходов $0 \rightarrow S$ и $S \rightarrow 0$, τ_S , τ_T - времена жизни синглетного и триплетного возбужденных состояний, K_{ST} - скорость интеркомбинационной конверсии $S \rightarrow T$ и I - интенсивность (плотность потока фотонов) пучка накачки параметрически зависящая от z и измеряемая в [фотон/см²]. В любой момент времени t выполняется условие интегрального баланса $n_0(t) + n_S(t) + n_T(t) = n$, ($n = \text{const}$) отражающее факт отсутствия необратимого расхода реагентов.

В квазистационарном приближении, при $t \rightarrow \infty$, решение данной системы запишется в виде

$$\begin{cases} n_0(I) = \frac{\tau_S^{-1} + K_{ST} + \sigma_{S0}I}{\tau_S^{-1} + K_{ST} + [\sigma_{0S}(1 + K_{ST}\tau_T) + \sigma_{S0}]I} n \\ n_S(I) = \frac{\sigma_{0S}I}{\tau_S^{-1} + K_{ST} + [\sigma_{0S}(1 + K_{ST}\tau_T) + \sigma_{S0}]I} n. \\ n_T(I) = \frac{K_{ST}\sigma_{0S}I\tau_T}{\tau_S^{-1} + K_{ST} + [\sigma_{0S}(1 + K_{ST}\tau_T) + \sigma_{S0}]I} n \end{cases}$$

Тогда коэффициент поглощения, с учетом переходов на высоковозбужденные уровни S_2 и T_2 определяется как

$$\alpha(I) = \sigma_{0S}n_0(I) - \sigma_{S0}n_S(I) + \sigma_{SN}n_S(I) + \sigma_{TN}n_T(I)$$

где σ_{SN} , σ_{TN} сечения переходов на высоковозбужденные уровни S_2 и T_2 . Первые два слагаемых описывают некогерентное насыщение поглощения в переходе между 0 и S состояниями.

$$\alpha_{Sat}(I) = \sigma_{0S}n_0(I) - \sigma_{S0}n_S(I) = \frac{\alpha_0}{1 + I/I_S},$$

здесь $\alpha_0 = \sigma_{0S}n$ - линейный коэффициент поглощения,

$$I_S = \frac{\tau_S^{-1} + K_{ST}}{\sigma_{0S}(1 + K_{ST}\tau_T) + \sigma_{S0}} - \text{интенсивность насыщения раствора.}$$

Для водных растворов метиленового голубого характерен именно этот механизм нелинейности, что говорит об отсутствии накопления молекул красителя в триплетном состоянии.

Так как время жизни триплетного возбужденного состояния много больше, накопление молекул красителя будет именно в данном состоянии, поэтому главную часть наведенного дополнительного поглощения будет давать четвертое слагаемое

$$\alpha_{Add}(I) = \sigma_{TN}n_T(I) = \frac{\beta I}{1 + I/I_S}$$

$$\text{где } \beta = \frac{\sigma_{TN}\tau_T}{1 + (K_{ST}\tau_S)^{-1}}$$

В водно-этанольных растворах с увеличением доли спирта наблюдается усиление поглощения, однако, зависимость $\alpha_{Add}(I)$ более высокого порядка, чем линейный. Это возможно связано с многофотонным характером поглощения света в полосе $T_2 \rightarrow T_2$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Оренбургской области в рамках научного проекта № 19-43-560003.

Список литературы

1. M. Sheik-Bahae, A.A. Said, T.H. Wei et al *IEEE Journal of Quant. Electron.*, **26**, №4, 760-769, (1990).
2. V.V. Semashko, O.R. Akhtyamov, A.A. Shavelev et al *Laser Phys. Lett.*, **15**, 035702, (2018).
3. Р.А. Ганеев, Т. Усманов *Квант. электр.*, **37**, №7, 605-621, (2007).
4. D.M.A.S. Dissanayake, M.P. Cifuentes, M.G. Humphrey *Coord. Chem. Rev.*, **375**, 489–513, (2018).
5. M.G. Kucherenko, D.A. Kislov *Journ. of Photochem. and Photobiol. A: Chemistry*, **354**, 25–32, 2018.
6. Т.М. Chmereva, M.G. Kucherenko, D.A. Kislov et al *Opt. and Spectr.*, **125**, №5, 729–736, (2018).
7. R.A. Ganeev et al. / *Dyes and Pigments* **149** (2018) 236e241.
8. Кучеренко М.Г., Русинов А.П. *Квантовая электроника*. Т.34. №8. 2004, С.779-784.

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО ЗАРЯДА ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С МОЛЕКУЛЯРНЫМ ОКРУЖЕНИЕМ

Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент

Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук

Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук

Бондаренко Е.Н., Тлеубергенова Ж.Т.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»,

Центр лазерной и информационной биофизики

Наночастицы благородных металлов в последнее время находят широкое применение в различных областях нанoeлектроники, нанофотоники, медицины, биосенсорики и т.д. При этом функциональность наночастиц во многом определяется особенностями их взаимодействия с ближайшим окружением. В биомедицинских приложениях важным является использование плазмонных наночастиц, которые при взаимодействии с белковыми и полимерными системами не вызывают в них необратимых изменений. Столь низкой интенсивностью, в частности, обладают Ван-дер-Ваальсовы силы или **водородная связь, заключающаяся в кулоновском притяжении разноименно заряженных участков полимерной молекулы**. С целью изучения влияния заряда наночастиц на их агрегацию с органическими и биополимерными молекулами были синтезированы наночастицы золота и серебра двух типов: отрицательно заряженные, стабилизированные цитрат-ионами и положительно заряженные, стабилизированные катионом **цетилтриметиламмония (ЦТМА)**.

Синтез отрицательно заряженных наночастиц (НЧ) золота и серебра был осуществлен по методу Туркевича-Френса [1, 2]. В данном методе восстановителем металла и стабилизатором поверхности наночастиц выступал цитрат натрия, а в качестве источников атомов золота использовался тетрахлораурат водорода (в параллельной методике синтеза источником атомов серебра – AgNO_3). Преимущества метода заключаются в относительно узком распределении по размерам синтезированных частиц, порядка 20 нм, интенсивной полосе поглощения в водных растворах на 520 нм для золота и 420 нм для серебра, а также в способности относительно легко агрегировать в присутствии биополимерных соединений.

Для осуществления синтеза в стеклянную колбу, помещенную на нагреватель MR Hei-Standard с магнитной мешалкой, вносили 100 мл деионизованной воды и 1 мл 50 мМ (миллимоль) водного раствора HAuCl_4 (или AgNO_3) и доводили до кипения. Затем, при перемешивании, добавляли к горячему раствору 1,5 мл 80 мМ раствора цитрата натрия. После того как раствор менял окраску, магнитный якорек извлекали, а раствор нагревали и кипятили в течение 5 минут до появления устойчивой рубиновой (для наночастиц Au) или опа-

лесцирующее-желтой (для наночастиц Ag) окраски. Затем смесь охлаждали при перемешивании. Полученный раствор выдерживали в темном месте в течение 1 суток для полной стабилизации наночастиц и завершения процессов перекристаллизации. Концентрация наночастиц, синтезированных таким образом, равнялась 120 мкг/мл (или 0,6 мМ). Согласно [3] данные наночастицы заряжены отрицательно, измеренный методом динамического рассеяния света ζ -потенциал равен -18 мВ.

Синтез наночастиц золота, стабилизированных ЦТМА, осуществляли по боргидридной методике, подобно описанной в [2, 4]. В данной методике в качестве восстановителя использовался боргидрид натрия, в качестве стабилизатора – ЦТМА, источником атомов золота также выступал тетрахлораурат водорода (в параллельной методике синтеза источником атомов серебра – AgNO_3).

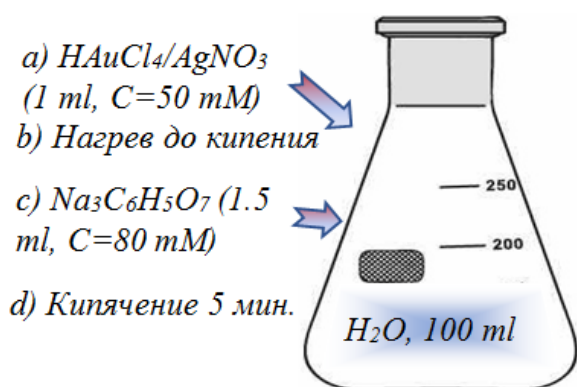


Рисунок 1 – Схема синтеза наночастиц золота и серебра цитратным восстановлением

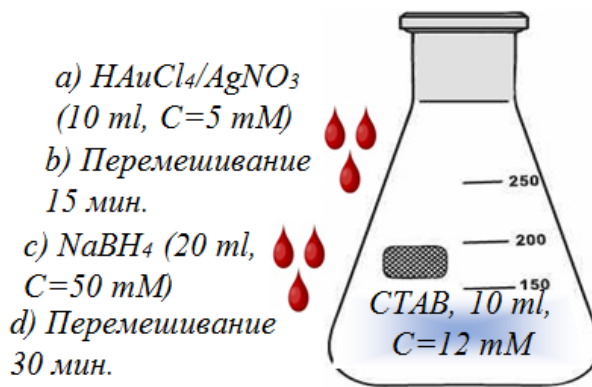


Рисунок 2 – Схема синтеза наночастиц золота и серебра боргидридным восстановлением

Для осуществления синтеза в стеклянную колбу, помещенную на нагреватель MR Hei-Standard с магнитной мешалкой, вносили 10 мл 12 мМ раствора бромид ЦТМА, затем по каплям, при интенсивном перемешивании, добавляли 10 мл 5 мМ раствора HAuCl_4 (или AgNO_3), полученный раствор перемешивали 15 мин. Затем по каплям при перемешивании добавляли 20 мл 50 мМ раствора NaBH_4 . После перемешивания в течение 30 мин раствор выдерживали 1 сутки для полной стабилизации наночастиц и завершения процессов перекристаллизации.

Концентрация НЧ золота, синтезированных таким образом, равна 140 мкг/мл (0,7 мМ по золоту). Согласно [3] данные наночастицы заряжены положительно, измеренный методом динамического рассеяния света ζ -потенциал равен +40 мВ. На рисунке 3 приведены спектры поглощения наночастиц серебра с плазмонным пиком на 435 нм и золота с максимумом поглощения вблизи 525 нм. Максимумы спектров поглощения золотых наночастиц, полученных по разным методикам, достаточно близки и незначительно отличаются только амплитудой и шириной полосы плазмонного резонанса.

Из рисунка 4 следует, что средний радиус НЧ серебра составляет 15 нм, наночастицы золота, полученные цитратным восстановлением, крупнее, их

средний радиус – 40 нм. Золотые НЧ синтезированные по боргидридной методике имеют более широкий разброс по размерам (сравнительно с цитратным методом) и средний радиус 5-7 нм.

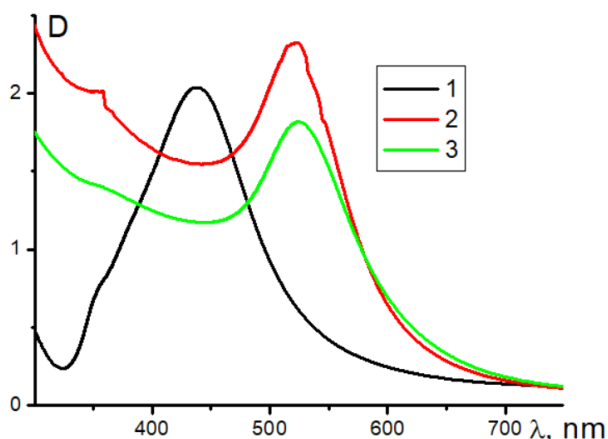


Рисунок 3 – Спектры поглощения водных золей наночастиц серебра, полученных методом цитратного восстановления, (1) и золота, полученных боргидридным (2) и цитратным методом (3)

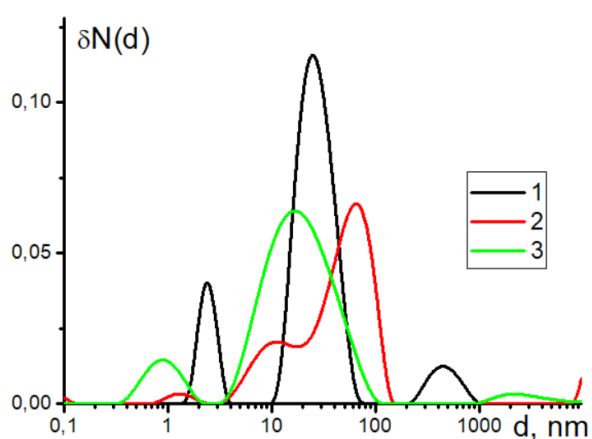


Рисунок 4 – Распределение по размерам для синтезированных наночастиц серебра, полученных методом цитратного восстановления (1) и золота полученных цитратным (2) и боргидридным методом (3)

Используемые в эксперименте полимеры: трипсин, трансферрин, лизоцим и альбумин были приготовлены в виде водных растворов с концентрацией 2 мМ. Из спектров поглощения указанных полимеров следует, что в полосе плазмонного резонанса наночастиц поглощение биомолекул сравнительно мало, следовательно, по изменениям в области плазмонного пика для наночастиц, можно судить об их взаимодействии.

Для формирования люминесцентного отклика к раствору плазмонных наночастиц или полимерным растворам добавляли раствор органического красителя с концентрацией 0.1 мМ. В качестве красителя использовались молекулы родамина 6G, в водном растворе заряженные отрицательно, и эритрозина – заряженные положительно.

Непосредственно перед проведением эксперимента образцы получали смешиванием одной части раствора содержащего наночастицы и одной части раствора биополимера или одной части раствора красителя.

Из спектров на рисунке 5 следует, что эффективность взаимодействия полимера и плазмонных наночастиц существенно зависит от соотношения их знаков заряда. Так добавление лизоцима к золотым наночастицам синтезированным боргидридным способом не приводит к изменению их спектра поглощения в видимой области, а для наночастиц полученных цитратным восстановлением в присутствии полимера плазмонный пик увеличивается и сдвигается в длинноволновую область на 15-20 нм. Это связано с тем, что молекула лизоцима в воде заряжена положительно (+7e) и эффективно взаимодействует с отрицательно заряженными наночастицами стабилизированными цитрат-ионами.

Аналогичный эффект наблюдается для наночастиц золота и серебра синтезированных методом цитратного восстановления и имеющих отрицательный заряд. Сильное взаимодействие с наночастицами обнаруживает другой биополимер – трипсин, также имеющий слабый положительный заряд (+1e). На рисунке 6 представлен сильный сдвиг плазмонной полосы у различных наночастиц в присутствии трипсина и отсутствие подобного сдвига при добавлении в раствор альбумина, имеющего в воде отрицательный заряд.

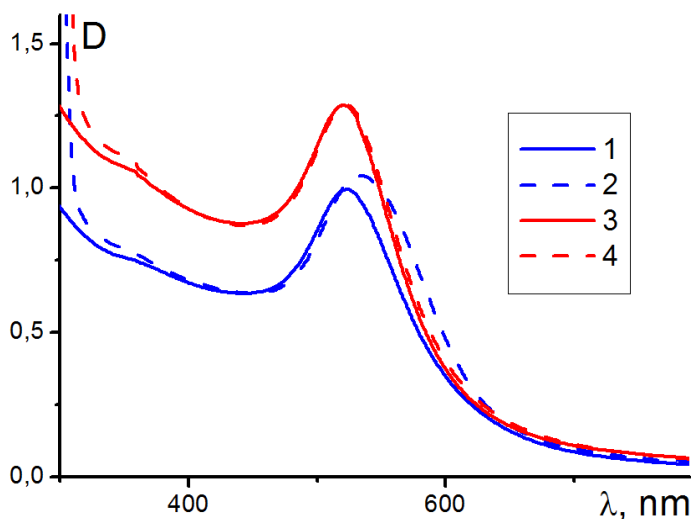


Рисунок 5 – Спектр поглощения водных растворов наночастиц золота полученных боргидридным восстановлением без лизоцима (1), с лизоцимом (2) и цитратным восстановлением без лизоцима (3), с лизо-

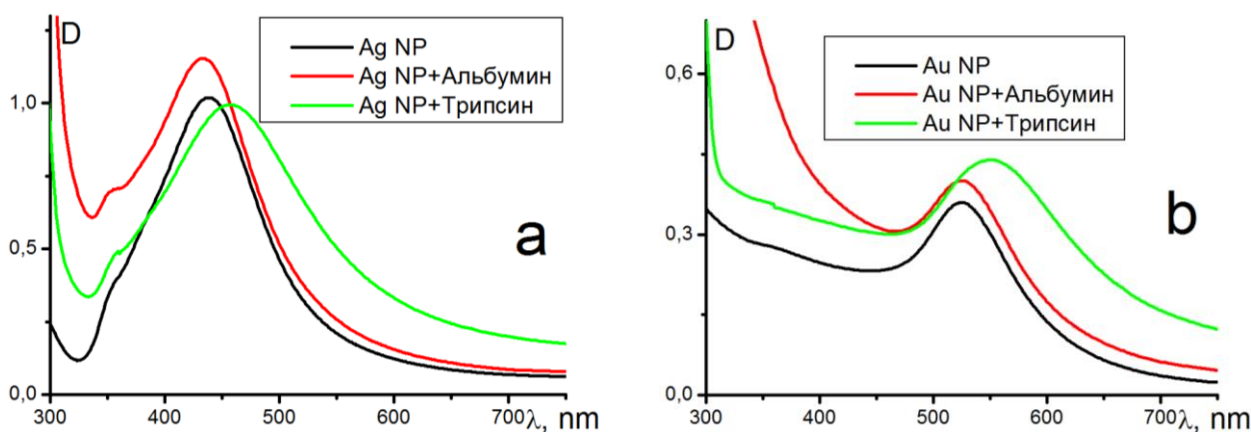


Рисунок 6 – Спектр поглощения водных растворов наночастиц серебра (а) и золота (б) полученных цитратным методом в присутствии белковых молекул

Аналогичные особенности взаимодействия полимерных макромолекул и плазмонных наночастиц имеют место и при наличии в растворе молекул органического красителя. Как видно на рисунке 7а максимум спектра поглощения родамина 6G (R6G) приходится на длину волны 525 нм. Для растворов R6G+лизоцим и R6G+ПВС сдвига максимума линии поглощения не наблюдается, а в случае смеси R6G с альбумином заметно смещение в длинноволновую область (красная кривая), что говорит о существенном взаимодействии полимера и красителя. Наблюдаемый эффект легко объяснить тем, что родамин в воде является положительно заряженным, также как и лизоцим, ПВС в целом электронейтрален, а альбумин в растворе имеет отрицательный заряд, поэтому наилучшее взаимодействие данного красителя наблюдается именно с альбуми-

ном. Спектр люминесценции данного красителя (рисунок 8а) также показывает, что из рассмотренного перечня полимерных молекул именно альбумин сдвигает максимум полосы свечения на длину волны 570 нм с 556 нм для красителя без полимера или с лизоцимом и ПВС.

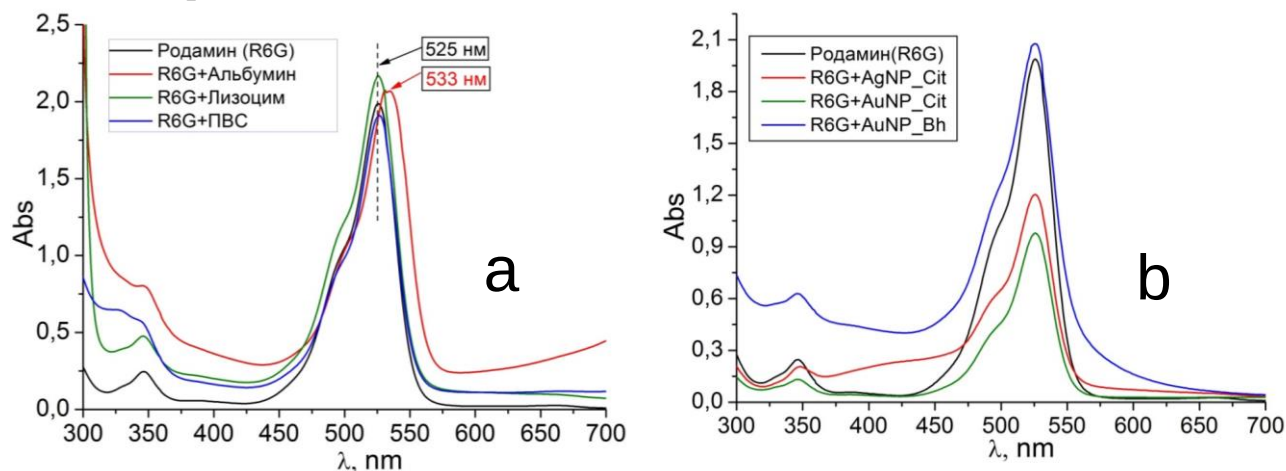


Рисунок 7 – Спектры поглощения водных растворов родамина 6G ($2.5 \cdot 10^{-5}$ М) в присутствии белковых и полимерных молекул (а) и плазмонных наночастиц (б)

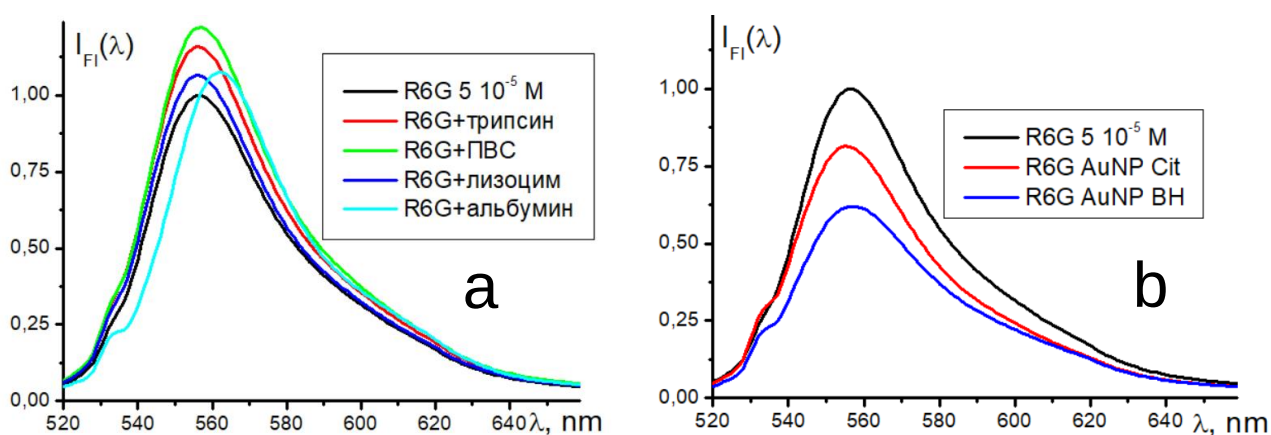


Рисунок 8 – Спектры люминесценции водных растворов родамина 6G ($5 \cdot 10^{-5}$ М) в присутствии белковых и полимерных молекул (а) и плазмонных наночастиц (б)

Взаимодействие плазмонных наночастиц с молекулами родамина 6G в растворе также обнаруживает ряд особенностей. Из рисунка 8b следует, что наличие наночастиц золота в растворе приводит к тушению люминесценции красителя независимо от знака заряда НЧ, однако для НЧ заряженных отрицательно (синтезированных цитратным методом) уменьшение свечения может быть связано с ослаблением поглощения комплекса «наночастица-краситель». Для родамина 6G с положительными НЧ (синтезированными боргидридным методом) уменьшение поглощения не наблюдается, но эффект тушения люминесценции красителя в 2 раза сильнее, чем в случае отрицательных НЧ. На наш взгляд это связано с образованием более тесных комплексов «краситель-наночастица» при их разноименной заряженности, а как показано в [5] вероятность безызлучательного переноса энергии от возбужденной молекулы на

плазмонные моды НЧ зависит от расстояния как r^{-6} , поэтому при почти неизменной вероятности поглощения люминесценция красителя сильно уменьшена.

Аналогичные измерения также выполнены для другого красителя – эритрозина. В водном растворе последний заряжен положительно, следовательно наилучшее взаимодействие будет проявляться с другими макромолекулами и наночастицами.

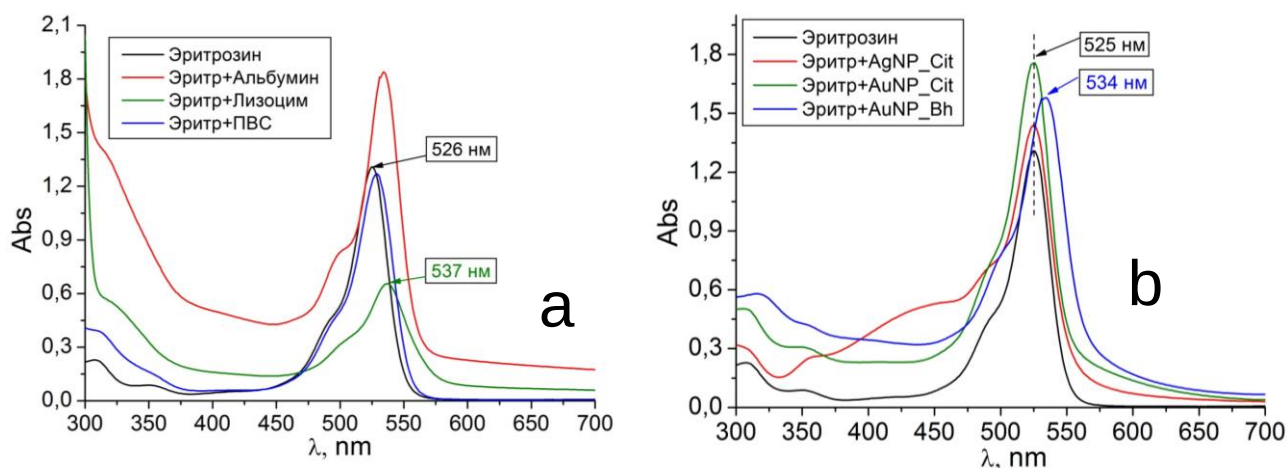


Рисунок 9 – Спектры поглощения водных растворов эритрозина ($2.5 \cdot 10^{-5}$ М) в присутствии белковых и полимерных молекул (а) и плазмонных наночастиц (б)

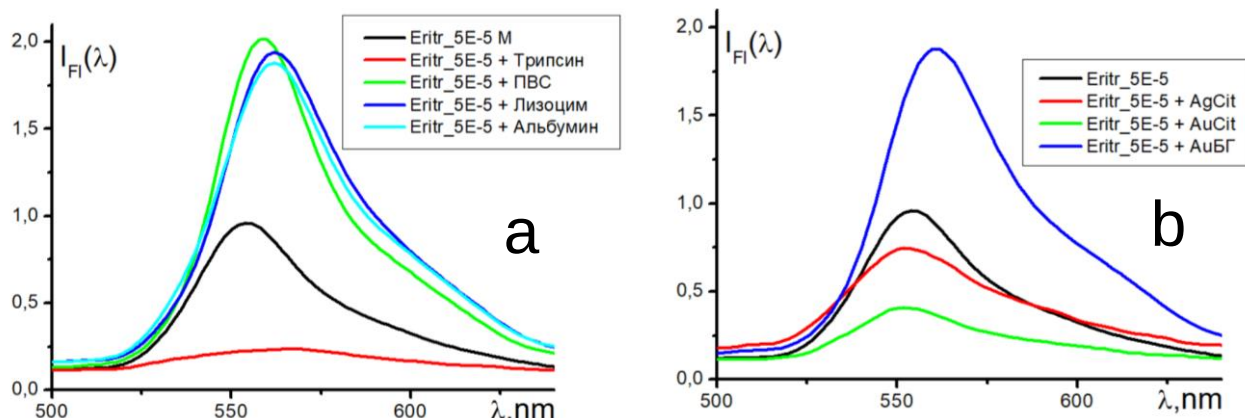


Рисунок 10 – Спектры люминесценции водных растворов эритрозина ($5 \cdot 10^{-5}$ М) в присутствии белковых и полимерных молекул (а) и плазмонных наночастиц (б)

Так из рисунка 9а следует, что отрицательно заряженные молекулы эритрозина лучше взаимодействуют с положительно заряженными веществами, например с лизоцимом. Спектр поглощения смеси красителя с лизоцимом значительно уменьшен по амплитуде и смещен в длинноволновую область на 11 нм, по сравнению с поглощением чистого красителя. Как следует из рисунка 9б, разноименность зарядов наночастиц золота, полученных боргидридным восстановлением, и эритрозина, способствует лучшему взаимодействию, поэтому спектр поглощения данного раствора смещен в длинноволновую область на 9 нм.

Спектры люминесценции растворов данного красителя в сочетании с биополимерами также существенно меняются (рисунок 10а). Для лизоцима, альбумина и ПВС имеет место практически двукратное усиление свечения и слабый сдвиг спектра. Тогда как для трипсина, имеющего слабый положительный заряд, люминесценция ослабляется на порядок и максимум спектра смещается на 20 нм в длинноволновую область, что говорит о сильном взаимодействии эритрозина и трипсина. Из рисунка 10b следует, что плазмонные наночастицы приготовленные цитратным методом (отрицательно заряженные) вызывают тушение его люминесценции. Положительные наночастицы золота, сильнее взаимодействующие с отрицательными молекулами красителя приводят к значительному, практически в 2 раза, усилению свечения. Различия во влиянии разноименно заряженных наночастиц на спектры люминесценции красителя, очевидно, связаны со сложной дистанционной зависимостью и конкуренцией процессов вынужденного поглощения, спонтанной эмиссии и безызлучательного тушения возбужденного состояния молекулы красителя в ближнем поле плазмонной наночастицы [6].

В рамках данной работы предпринята попытка управления конформационной структурой молекул полипептидов, адсорбированных на поверхности плазмонных наночастиц, при внешнем воздействии электрического поля сверхвысокой частоты. Важно отметить, что для эффективного воздействия СВЧ поля на структуру адсорбированной полипептидной цепочки необходимо, чтобы энергия связи молекулы с поверхностью должна быть сравнима с энергией кванта СВЧ поля, т.е. иметь порядок 10^{-4} - 10^{-5} эВ. Физически этому отвечают Ван-дер-Ваальсово взаимодействие. Так, например, соединения, содержащие тиольные группы, вступают с поверхностью золота или серебра в химическое взаимодействие с энергией связи порядка 0.1-0.5 эВ и, тем самым, формируют жесткую пространственную структуру, практически не взаимодействующую с СВЧ полем. При этом наличие в структуре полимерной цепочки разноименно заряженных участков позволяет электрической компоненте СВЧ поля вызывать их относительные колебания, что приводит к ее конформационной перестройке или отрыву от поверхности наночастицы.

Взаимодействие полимерных молекул с наночастицами в водном растворе, а также изменение конформационной структуры полимера при воздействии СВЧ поля, регистрировалось по спектрам поглощения растворов, полученным с помощью спектрофотометра Т70. Кварцевая кювета с исследуемым раствором помещалась в измерительную ячейку спектрофотометра. Для создания поля внутри кюветы ее непрозрачные грани были металлизированы и внешне электрически изолированы. К металлизированным контактам по коаксиальному кабелю подводилось СВЧ поле от генератора PLG06-11F. Возможности генератора позволяли плавно регулировать частоту СВЧ поля в диапазоне от 25 МГц до 6 ГГц и уровень выдаваемой мощности – от -40 до 10 дБм (от 0,3 мВт до 10 мВт).

При воздействии СВЧ поля на исследуемые образцы в ряде случаев наблюдаются изменения в их спектрах поглощения. Показано, что на растворы

полимеров без плазмонных наночастиц СВЧ поле не влияет. Влияние СВЧ наблюдаются для растворов самих наночастиц (и золотых и серебряных) и для двойных систем «биополимер-наночастица».

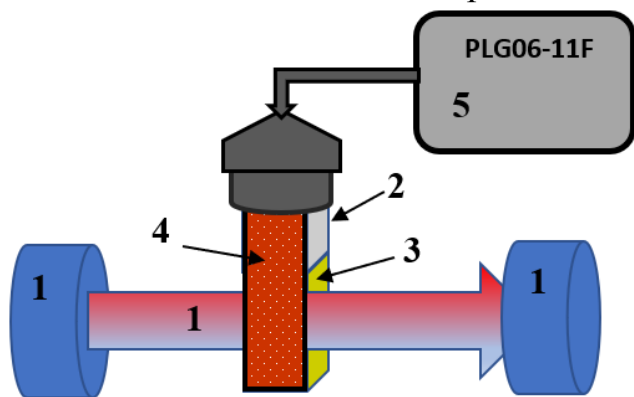


Рисунок 11 - Схема экспериментальной установки. 1 – оптический измерительный тракт спектрофотометра, 2 – кварцевая кювета, 3 – исследуемый раствор, 4 – металлизированная грань кюветы, 5 – СВЧ генератор

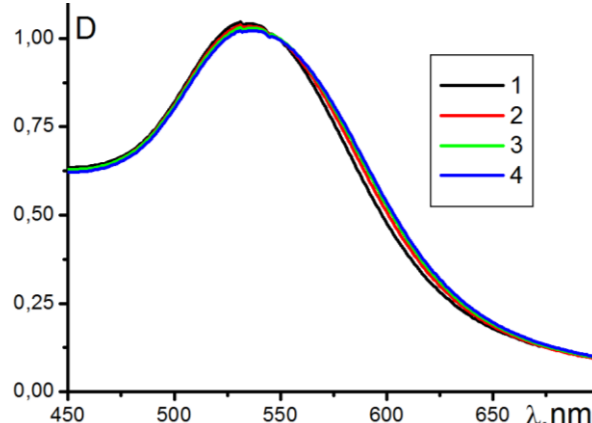


Рисунок 12 – Спектр поглощения водного раствора наночастиц золота полученного цитратным методом в присутствии молекул лизоцима при экспозиции СВЧ полем 0 мин (1), 2 мин (2), 4 мин (3), 8 мин (4)

В двойных системах под действием СВЧ, главным образом, протекают необратимые процессы, заключающиеся в сдвиге плазмонной полосы наночастиц в область больших длин волн (см. рисунок 12). Похожий результат с влиянием СВЧ поля на спектры поглощения наблюдается в бинарной системе «трипсин–Au НЧ». Заметно уменьшение величины максимума поглощения наночастицы. Предполагаемый нами механизм необратимых изменений исследуемых систем в СВЧ поле возможно связан с нарушением зарядового слоя на поверхности наночастиц, что приводит к нарушению их стабильности, агрегации и последующему выпадению в осадок.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Оренбургской области в рамках научного проекта № 19-43-560003.

Список литературы

1. Li X., Chen Y., Huang X. // **J. Inorg. Biochem.** 2007. V. 101. P. 918 – 924.
2. Frens G. // **Nat. Phys. Sci.** 1973. V. 241. P. 20 – 22.
3. Li Z.P., Duan X.R., Liu C.H., Du B.N. // **Anal. Biochem.** 2006. V. 351. P. 18-25.
4. Andreu-Navarro A., Fernandez-Romero J.M., Gomez-Hens A.. // **Anal. Chim. Acta.** 2012. V. 713. P. 1 – 6.
5. Кучеренко М.Г. // **Вестник ОГУ.** – 2012. – №1. – Т.137, – С. 141-149.
6. Русинов А. П., Кучеренко М. Г. // **Вестник ОГУ,** 2015. - № 13. - С. 195-202.

МОДЕЛЬ «МНИМОЙ ЧАСТИЦЫ» КАК МЕТОД ОПИСАНИЯ СЕДИМЕНТАЦИИ В ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ ГЛИНИСТЫХ ВОДНЫХ СУСПЕНЗИЯХ

Савинов В.В., Алпысбаева Г.Ж.,
Каныгина О.Н., д-р физ.-мат.наук, профессор,
Цветкова Е.В.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Введение

Разработка новых технологий керамических материалов с заданными свойствами из доступного сырья является насущной проблемой в ряду программ импортозамещения. Керамические материалы все чаще используются в качестве комплектующих деталей при разработке современного оборудования. Многообразие свойств керамики по сравнению с другими типами материалов, доступность сырья, низкая энергоемкость технологий, долговечность керамических конструкций в агрессивных средах позволяют расширить области её применения. В связи с этим изучение возможностей применения представительных типов глин Оренбуржья и их внедрение в новые производства делает вклад в экономическое развитие региона.

Для современных технологий представляют интерес глинистые минералы из 4-х групп глин: монтмориллонитовая, каолинитовая, палыгорскитовая, гидрослюдистая – наибольший интерес представляют две первые. В особенности глина, содержащая ультрадисперсные частицы монтмориллонита, имеющего формулу $(\text{OH})_4\text{Si}_8\text{Al}_4\text{O}_{20}\text{nH}_2\text{O}$. Кремний в ячейке монтмориллонита может замещаться на ионы Al^{3+} , $\text{Fe}^{2+,3+}$, Zn^{2+} , Cu^{2+} , Mg^{2+} , Li^{+} . Монтмориллонит имеет белый с сероватым или синеватым оттенком, а чаще всего розово-красный цвет. Частицы монтмориллонита обладают гидрофильными поверхностями. Глинисто – водная суспензия, содержащая частицы монтмориллонита, отличается пластичностью и хорошей формуемостью. Такие суспензии характеризуются активным взаимодействием поверхностей частиц с водой, интенсивность и механизмы которого зависят от дисперсного состава, формы частиц и качества их поверхности [3]. Изображения монтмориллонит содержащей глины и отдельных частиц представлены на рисунке 1.

Монтмориллонит обладает высокой адсорбционной, и ионообменной способностью, поглощает и выделяет слабосвязанную воду в зависимости от влажности окружающей среды. Химический и фазовый составы монтмориллонит содержащей глины представлены в таблицах 1 и 2 [5].

Таблица 1 – Химический состав монтмориллонит содержащей глины

оксид	п.п.п	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	TiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Na ₂ O	K ₂ O	Σ, %
%, м.	7,08	55,90	9,51	0,86	18,83	0,72	2,05	1,90	3,24	99,89

Таблица 2 – Фазовый состав частиц монтмориллонит содержащей глины [5]

Компонент	Объем. доля, %
β -кварц, SiO_2	35
монтмориллонит	50
хлорит, $(\text{Mg,Fe})_{6-2x}(\text{Al,Fe})_{2x}[\text{OH}]_8\{\text{Si}_{4-2x}\text{Al}_{2x}\text{O}_{10}\}$	5
кristобалит, SiO_2	5
α – корунд, Al_2O_3	5

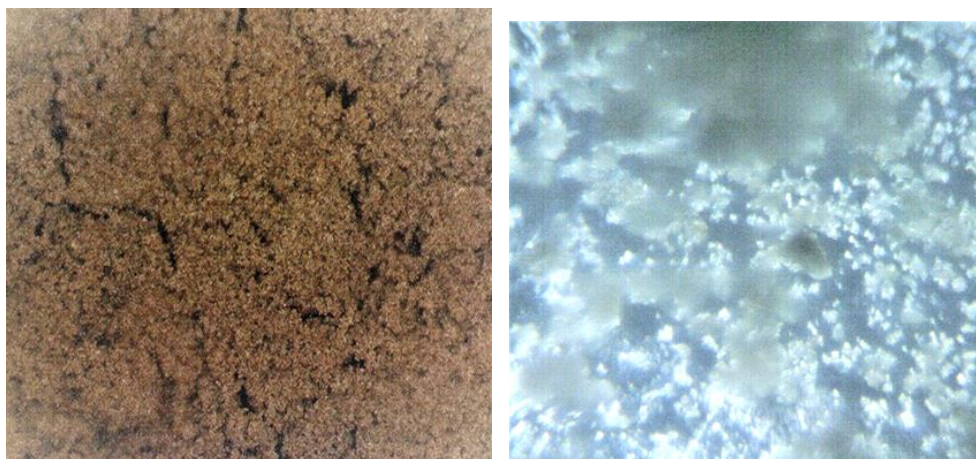


Рисунок 1 – Изображения частиц монтмориллонит содержащей глины при увеличении 100 и 400 крат соответственно. На правом снимке видны белые частицы оксидов алюминия и кремния, и области набухших монтморилло-нитовых частиц.

Вторая группа – каолинитовая, имеет формулу $(\text{OH})_8\text{Si}_4\text{Al}_4\text{O}_{10}n\text{H}_2\text{O}$. Као-линит почти не набухает в воде, обладает небольшой емкостью поглощения ка-тионов и адсорбционной способностью. Изображения каолиновой глины и ее частиц представлены на рисунке 2.

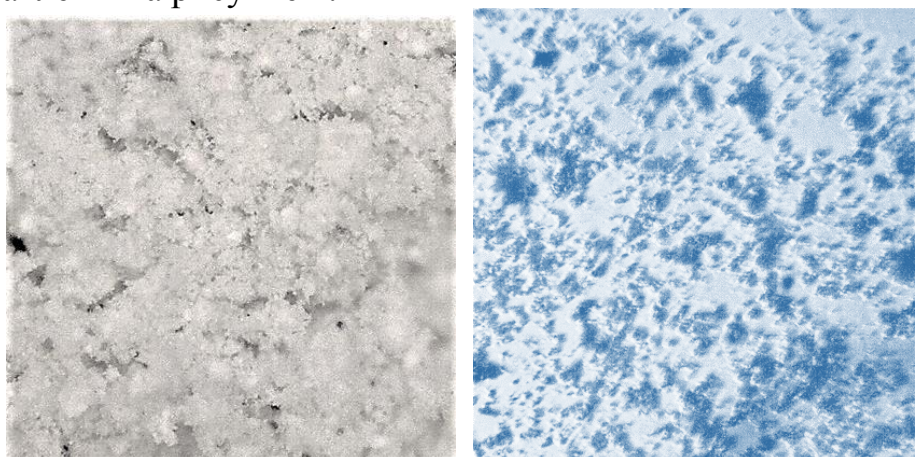


Рисунок 2 – Микроскопия каолиновой глины при увеличении 100 и 400 крат соответственно.

В Оренбургской области есть перспективные месторождения монтмориллонитовых глин, в частности, Южно-Оренбургское, служащих сырьем при получении монтмориллонитовых наночастиц.

Наноразмерность частиц минерала достигается мельничным дроблением, истиранием до получения ультрадисперсной системы с последующим модифицированием и полимеризацией [4]. Однако возможен подход к выделению наноразмерных частиц посредством образования суспензии и осаждении седиментационно устойчивых наночастиц монтмориллонита [2].

Закон Стокса [1] дает возможность путем седиментации выделить частицы определенных размеров (эффективных диаметров) в течение контролируемого времени осаждения, а также сепарировать монтмориллонит от частиц прочих фазовых составов. Из уравнения Стокса можно определить время седиментации τ частицы с эффективным диаметром d :

$$\tau = \frac{18h\eta}{d^2(\rho - \rho_0)g}, \quad (1)$$

где h – высота падения частицы; η – динамическая вязкость среды; эффективный диаметр частицы; ρ и ρ_0 – плотности вещества и среды соответственно; g – ускорение свободного падения.

Однако, частицы монтмориллонита, обладающего сильными сорбирующими свойствами, способны коагулировать уже на начальных этапах седиментации. Поэтому реальные скорости седиментации монтмориллонит содержащей глины существенно отличаются от скоростей, рассчитанных по уравнению Стокса. Расчет, выполненный по формуле Стокса для частиц размером менее 40 мкм, позволяет построить зависимость размеров осевших частиц от времени седиментации ($h=1$ см). Результаты расчета приведены на рисунке 3.

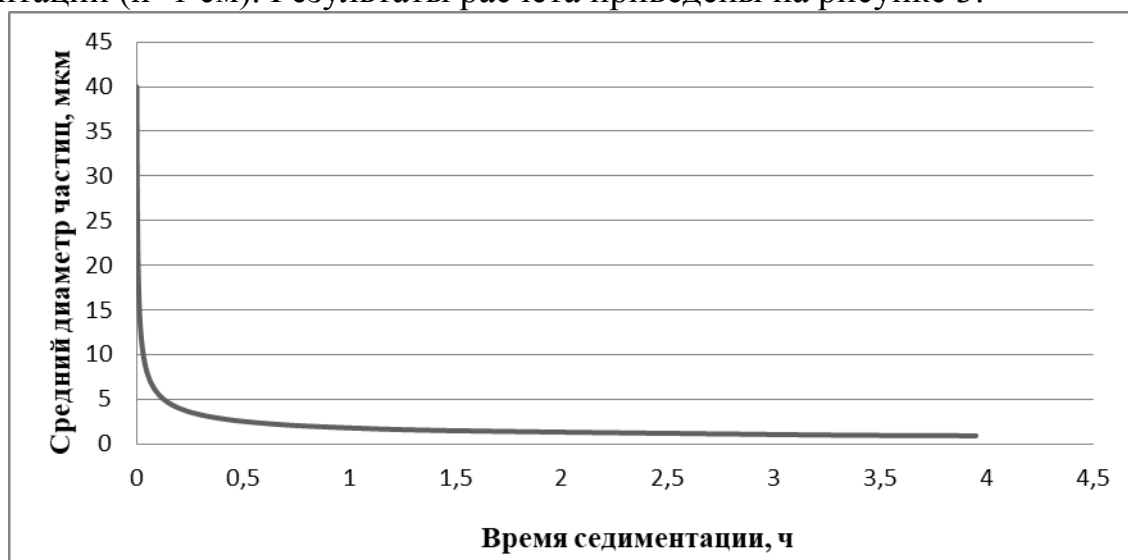


Рисунок 3 – Зависимость размеров оседающих частиц от времени.

Данная зависимость отражает седиментацию частиц, не обладающих способностями к коагуляции и набуханию (примером могут являться частицы корунда и кварца). Образование агрегатов при уменьшении удельной поверхности

частиц влияет на процессы осаждения частиц монтмориллонита и поэтому возникает необходимость корреляции описания процесса.

Цель работы заключается в изучении возможности выделения наноразмерных частиц монтмориллонита из высокодисперсной фракции путем седиментации в водной среде. Для этого разработана модель, которая позволит использовать закон Стокса (1) с учетом набухания и коагуляции частиц. В работе предлагается метод «мнимой частицы».

Метод «мнимой частицы»

Мнимая частица – виртуальная частица в модели, заполняющая «пустое пространство» между реальными частицами. Основная идея метода «мнимой частицы» заключается в следующем: реальные частицы, способные к коагуляции, распределяются в некотором объеме так, что в пространстве между ними плотно размещаются виртуальные частицы (также этими частицами могут являться корунд и кварц). При этом учитывается набухание реальных частиц и необходимое расстояние между ними, на котором вероятность коагуляции пренебрежимо мала.

В работе выбрана система, состоящая из частиц с эффективными диаметрами меньше 40 мкм ($0 \leq d \leq 40$ мкм). Такое условие позволило упростить модель и ввести грубые приближения. Форма частиц принималась за сферическую, а суммарный радиус набухшей частицы с двойным электрическим слоем (ДЭС) в растворе – равным трехкратному радиусу частицы:

$$r_{\text{ДЭС}} = 3r \quad (2)$$

Связь между гидратированным и сухим объемами вещества устанавливали с помощью коэффициента набухания:

$$k = \frac{V_{\text{сухВ}}}{V_{\text{набухВ}}} \quad (3)$$

Коэффициент набухания монтмориллонит содержащей глины был определен экспериментально и оказался равным 0,69.

Взаимное расположение частиц в пространстве можно представить как двумерную фрактальную модель (рисунок 4). Наименьшим элементом фрактала является гидратированная частица (r), две окружности, описанные вокруг которой, показывают двойной электрический слой ($3r$). Частицы равноудалены друг от друга с расстоянием $6r$, так, чтобы между границами ДЭС могла уместиться еще одна частица (мнимая) с двойным электрическим слоем. Наибольшие элементы фрактала, плотноупакованные окружности, центры которых совпадают с центрами частиц, представляют собой «мнимые» частицы с радиусом $6r$ (рисунок 5).

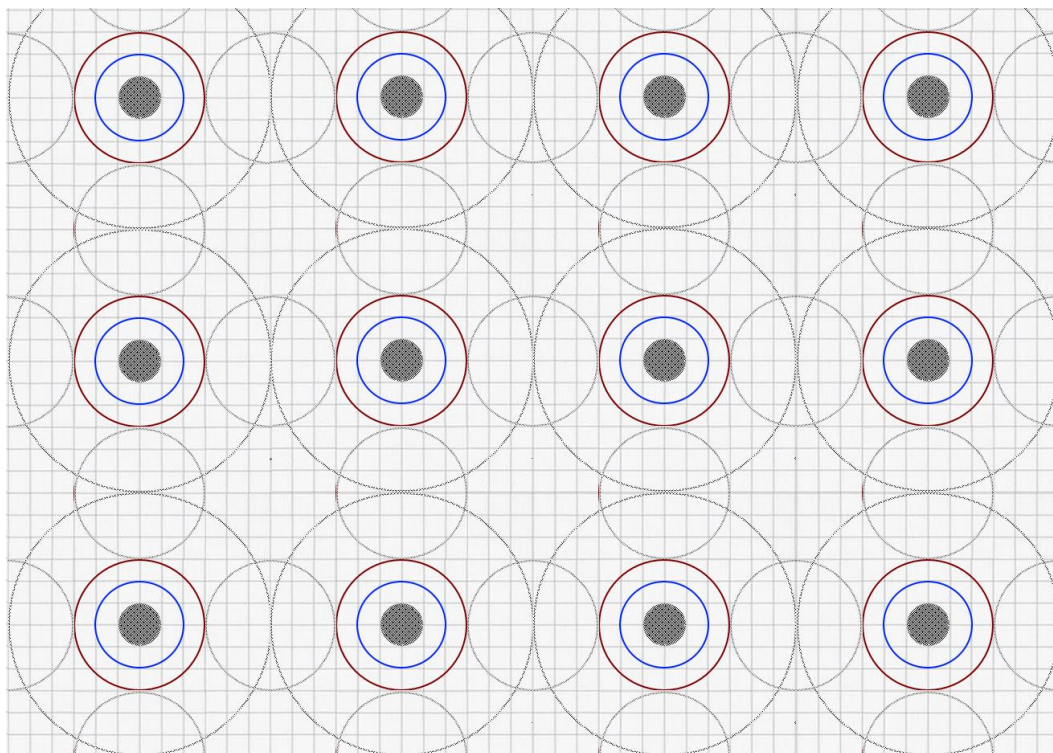


Рисунок 4 – Двумерная фрактальная модель дисперсной системы частиц, способных к коагуляции: штрихованная окружность – реальная частица; синяя окружность – границы адсорбционного слоя; коричневая – диффузионного слоя. Серые окружности – границы мнимых частиц.

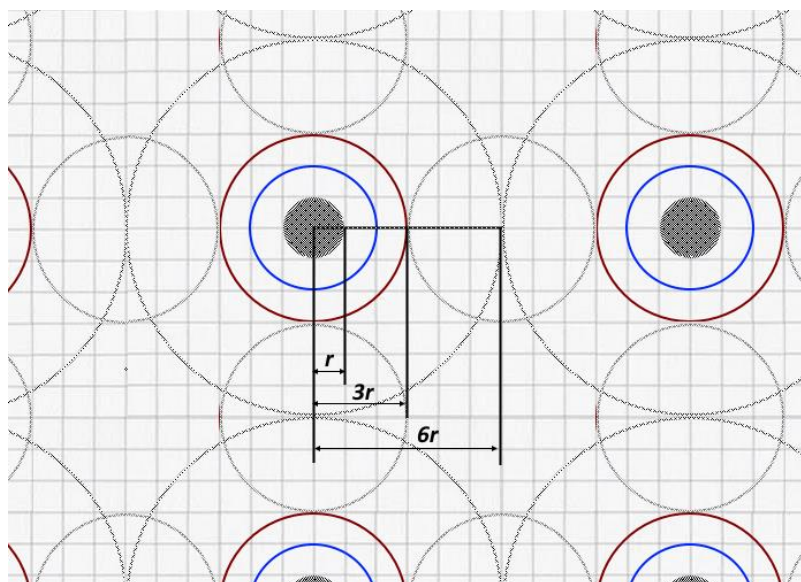


Рисунок 5 – Размерности элементов фрактала: r – радиус частицы; $3r$ – радиус частицы с ДЭС; $6r$ – радиус «мнимой» частицы.

При радиусе виртуальной частицы $R = 6r$ ее объем равен:

$$V_{\text{м.ч.}} = 72\pi r^3$$

Количество «мнимых» частиц, помещающихся в единице объема системы, равно: ⁽⁴⁾

$$n = \frac{V_c}{V_{м.ч.}} \quad (5)$$

Через количество частиц (5) и коэффициент набухания (3) можно выразить объем вещества:

$$V_{г.в-ва} = nV_{г.ч.} \quad (6)$$

$$V_{в-ва} = V_{г.в-ва}k \quad (7)$$

где $V_{г.в-ва}$ – объем гидратированного вещества; $V_{в-ва}$ – объем сухого вещества.

Основным количественным параметром в реальной системе является масса вещества m в единице объема системы V_c . Тогда, выполняя ряд преобразований, получим формулу для определения критической массы вещества в реальной системе:

$$m = V_{в-ва}\rho \quad (8)$$

$$m = V_{г.в-ва}\rho k \quad (9)$$

$$m = nV_{г.ч.}\rho k \quad (10)$$

$$m = \frac{V_c V_{г.ч.} \rho k}{V_{м.ч.}} \quad (11)$$

$$m = \frac{V_c \pi r^3 \rho k}{3 \times 72 \pi r^3} \quad (12)$$

$$m = \frac{V_c \rho k}{216} \quad (13)$$

где ρ – средняя плотность вещества.

Формула (13) позволила рассчитать критическую массу вещества, которое способно седиментировать, в соответствии с законом Стокса, с учетом набухания частиц и их возможной коагуляции.

Для частиц каолинита, составляющих большую часть каолиновой глины, из модели следует убрать коэффициент набухания и расстояние между частицами, предотвращающее коагуляцию. Экспериментально определенный коэффициент набухания $k = 1$. Формула расчета «критической» массы выглядит следующим образом:

$$m = \frac{V_c \rho}{27} \quad (14)$$

Стандартизация наноразмерных частиц является одним из основных этапов при синтезе нанокompозита, так как размеры частиц наполнителя вносят основной вклад в свойства материала. Применение разработанной модели к седиментации набухающих веществ, подобных монтмориллонит содержащей глине, даёт возможность получать коллоидную систему наночастиц с заданным диапазоном эффективных диаметров для дальнейшего синтеза.

Модель является грубым приближением, однако позволяет рассчитать количественные параметры системы. Достоверность модели была проверена путем экспериментально определенной зависимости концентрации образующейся коллоидной системы от массы частиц монтмориллонитовой глины.

Обсуждение результатов

Методом нефелометрии определены коэффициенты светопропускания серии для проб коллоидных растворов каолин и монтмориллонит содержащих глин на приборе КФК-2МП при длине волны 540 нм.

По формуле (13) рассчитана предельная масса монтмориллонитовой глины на объем воды 200 мл (1,66 г). Массы проб составили 0,5; 1; 1,66; 3; 6 г. Построены зависимости концентрации коллоидных частиц от массы пробы (рисунок 6). На кривой для монтмориллонит содержащей глины видно, что до точки с массой 1,66 г идет увеличение концентрации коллоидных частиц с коэффициентом 16,8 %/г, при дальнейшем увеличении массы их концентрация вырастает незначительно; с коэффициентом 2,5 %/г. Снижение в 7 раз скорости роста концентрации коллоидной системы свидетельствует о том, что после выбранной точки коагуляция частиц влияет на дальнейшую концентрацию коллоидной системы, замедляя ее.

В каолиновой глине концентрация коллоидных частиц весьма невелика. Этот тип глины не подходит для метода выделения наночастиц, представленного в работе.

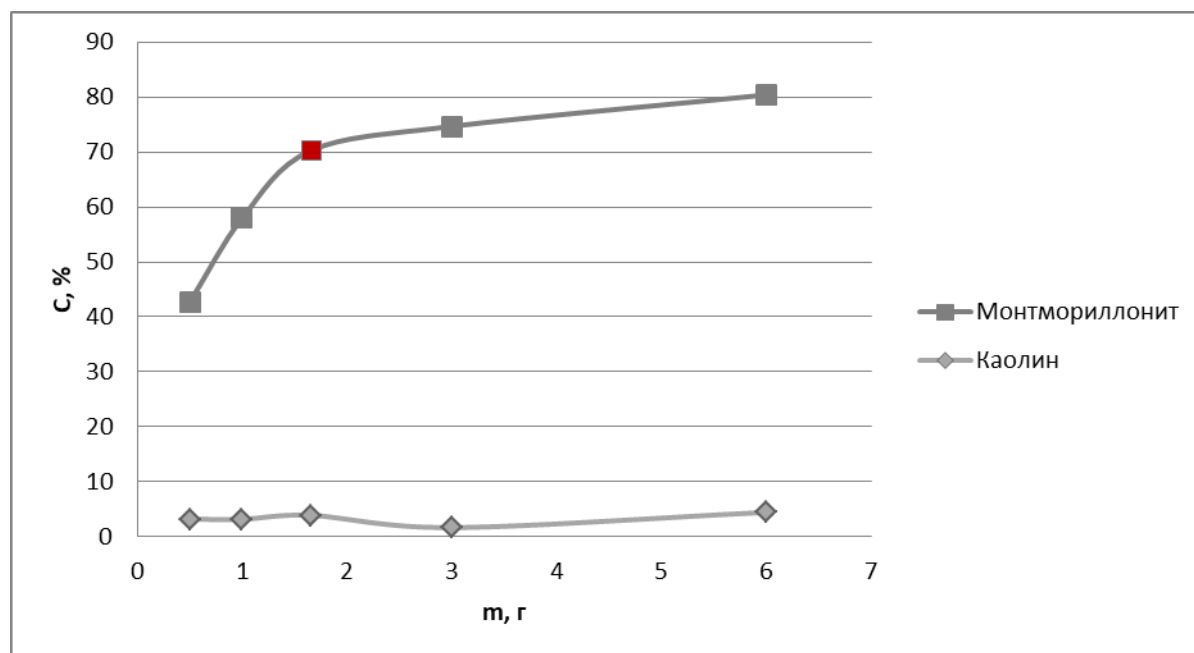


Рисунок 6 – Зависимость концентрации коллоидных частиц от массы глины. Красная точка – критическая масса, рассчитанная по формуле (13).

Заключение

Производство нанокompозитных материалов с заданными свойствами включает в себя применение наночастиц как структурообразующего и предопределяющего свойства компонента. Нативные компоненты в данной сфере производств не только существенно удешевляет производство, но и придают особые свойства изделию. Наиболее простой метод синтеза нанокompозитов подразумевает перевод минерала в жидкую среду с последующей стандартизацией методом седиментации. Однако контролируемая седиментация многих минералов осложнена их коагуляцией и набуханием.

Необходим коррелирующий подход в описании данного процесса, а именно, нахождение количественного соотношения концентрации коллоидной системы в суспензии со временем седиментации.

Модель «мнимая частица» позволяет определить критические концентрации глинистых минералов, способных к набуханию и коагуляции, необходимые для образования коллоидной системы, оседающей в контрольный интервал времени.

Однако данная модель имеет ряд недостатков:

- не описывает полидисперсные системы;
- не учитывает тепловое движение частиц.

Эти вопросы требуют дальнейшей проработки.

Список литературы

1. Воюцкий, С. С. Курс коллоидной химии. Изд. 2-е, перераб. И доп. М., «Химия», 1976. – 512 с.
2. Евсеев Н. Е., Простой метод получения полимерных нанокомпози- тов с большим содержанием наполнителя / Н. Е. Евсеев, А. А. Сизова, Д. В. Плешаков. – Успехи в химии и химической технологии. Том XXXI. – 2017. – № 13. – 98 с.
3. Каныгина, О. Н. Микроструктурные и реологические характери- ки водно-глинистой суспензии, содержащей частицы монтмориллонитовой глины [Электронный ресурс] / Каныгина О. Н., Цветкова Е. В. // Стекло и ке- рамика, 2019. - № 9. – С. 41-44.
4. Михайлов М. Д. Химические методы получения наночастиц и наноматериалов / М. Д. Михайлов. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. – 259 с.
5. Цветкова Е В. Влияние температурного воздействия на вязкость водно-глинистых суспензий [Электронный ресурс] / Цветкова Е.В. // 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 978-5-4418-0022-8.

УЧЕТ РАЗЛИЧИЙ В НАПРАВЛЕНИЯХ ПОДГОТОВКИ БАКАЛАВРОВ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ФИЗИКЕ

Сидоров А.В.

**Бузулукский гуманитарно-технологический институт (филиал)
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

Для более глубокого понимания студентами сущности физических законов, формирования умений применения их для решения задач прикладного характера необходим учет индивидуальных особенностей личности, в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования [1].

В зависимости от выбора направления подготовки будущих бакалавров при выполнении одних и тех же лабораторных работ необходимо обеспечить формирование у них соответствующих компетенций, которые могут быть различными.

Дисциплина «Физика» ставит перед преподавателем, ведущим дисциплину и обучающимися следующие цели:

- знакомство с основными физическими явлениями;
- знакомство с основными физическими величинами, знание их определения, способов и единиц измерения;
- представление фундаментальных физических опытов и их роли в развитии науки;
- знание назначения и принципов действия важнейших физических приборов.

Задачи, которые необходимо решить для достижения данных целей, одинаковы, независимо от того, на кого учится будущий бакалавр [2]. Но при этом все же необходимо учитывать предрасположенность учащихся к определенному виду деятельности. Только в этом случае результаты обучения будут наиболее успешными. Необходимо учитывать особенности изучаемой дисциплины, возможность использования умений и навыков, получаемых в ходе выполнения лабораторных работ в дальнейшей профессиональной деятельности бакалавра.

На лабораторно-практических занятиях студенты выполняют лабораторные работы в составе мини-групп. При выполнении работ необходимо контролировать работу каждого из студентов группы, следить чтобы они в равной степени участвовали в проведении измерений и самостоятельно, не ссылаясь на расчеты участников группы, рассчитывали результаты. Выводы по каждой лабораторной работе студентов должны быть самостоятельными. По ним можно судить о том, насколько студент усвоил тематику данной лабораторной работы [3].

В зависимости от направления подготовки бакалавров должна отличаться и тематика выполняемых лабораторных работ.

При изучении раздела «Механика» бакалавры направления подготовки «Эксплуатация транспортно-технологических машин и комплексов» выполняют такие работы как: «Исследование зависимости мощности на валу двигателя от нагрузки и угловой скорости вращения вала», «Законы сохранения импульса и энергии в механике. Проверка основного закона динамики вращательного движения». Такой выбор тематики лабораторных работ тесно связан с будущей профессией, изучением работы основных механизмов двигателя автомобиля [4].

При изучении механики жидкостей и газов выполняется работа «Законы гидродинамики. Определение коэффициента вязкости жидкости методом Стокса». Знания, получаемые при выполнении данной работы, позволяют углубленно изучать процессы, которые встречаются в работе таких систем автомобиля, как система питания, смазки и система охлаждения двигателя внутреннего сгорания.

Бакалаврам направления подготовки «Биология» профиль «Биоэкология» не требуются знания особенностей работы того же двигателя. В дальнейшем, при работе, например, в лаборатории им понадобятся умения и навыки работы с измерительными приборами, такими как штангенциркуль, микрометр, знания методики расчета погрешностей измерений. Поэтому при изучении раздела «Механика» им рекомендуется проведение следующей работы: «Изучение методики измерения линейных величин штангенциркулем и микрометром; взвешивания на технических весах; обработки результатов прямых и косвенных измерений».

Бакалаврам направления «Строительство» также можно рекомендовать для проведения лабораторные работы из раздела «Механика», связанные с их будущей деятельностью такие как: «Соударение шаров. Определение коэффициентов восстановления скорости и энергии при ударе шаров», «Изучение механических свойств твердых тел. Определение модуля Юнга методом изгиба». Умения и навыки, получаемые в ходе проведения данных лабораторных работ, могут пригодиться в дальнейшем при изучении таких дисциплин как «Теоретическая механика», «Сопротивление материалов».

Студентам направления подготовки «Профессиональное обучение», профиль «Энергетика» следует уделить особое внимание изучению раздела «Электричество». Им рекомендуются к выполнению следующие работы: «Изучение вольт-амперной характеристики прибора (резистора), исследование зависимости силы тока от сопротивления, определение сопротивления резистора», «Изучение вольт-амперной характеристики вакуумного диода, определение контактной разности потенциалов между катодом и анодом», «Законы Кирхгофа. Знакомство с работой моста Уитстона и определение с его помощью сопротивления резисторов», «Расширение предела измерения вольтметра».

Обучающимся по направлению подготовки «Биология» таких глубоких знаний данного раздела не требуется, им достаточно знаний на уровне основных законов. Поэтому им рекомендуется к выполнению следующая лаборатор-

ная работа: «Изучение закона Ома для однородного и неоднородного участков электрической цепи».

При изучении оптических явлений бакалаврам направления подготовки «Строительство» необходимо больше внимания уделить изучению законов геометрической оптики, которая лежит в основе таких приборов как оптический нивелир, теодолит. Следовательно, и работы, рекомендуется связывать с данными темами. Примером могут служить работы «Изучение законов геометрической оптики. Определение показателя преломления стекла при помощи микроскопа», «Законы фотометрии. Исследование зависимости освещенности от расстояния до источника, света, угла падения лучей и падающего светового потока».

Студентам направления подготовки «Биология» рекомендуется связать вид деятельности со спецификой их будущей профессии. Например, при изучении раздела «Оптика» можно предложить работу «Определение размеров эритроцитов с помощью дифракции лазерного излучения на мазке крови». В дальнейшем при изучении курса «Биофизика» они могут закрепить полученные знания изучением других методов исследования мельчайших частиц.

Учет различий в направлениях подготовки бакалавров при проведении лабораторных работ по физике не требует наличия огромного числа дорогостоящих лабораторных установок. Многие установки имеют блочную конструкцию, взаимозаменяемые части. При выполнении, например, лабораторных работ по разделу «Механика» используются установки, одним из основных элементов которых является штатив, на котором крепится установка и счетчик-секундомер. При выполнении работ связанных с электрическими явлениями исследуемая цепь собирается из амперметров, вольтметров, реостатов и т.д. То есть практически не требует отдельных элементов установки как чего-то целого.

Многие работы связанные с оптическими явлениями выполняются на оптической скамье. Меняя элементы которой, можно собирать различные установки, исследовать различные оптические явления. В качестве источника света рекомендуется использовать полупроводниковый лазер, стоимость которого невелика и который есть в свободном доступе, например, в Интернет-магазинах.

Список литературы:

1 Pavlutsкая, N.M. Multilevel Laboratory Works as a Form of Common Cultural Competence Formation at Physics Teaching of Bachelors of Technical Training Areas / N.M. Pavlutsкая. – Scholarly Notes 2014. Number 6 (59). Theory and Methods of Physics Teaching. – P. 135-138.

2 Кирюшин, А.В. Проблемы лабораторного физического эксперимента в ТОГУ / А.В. Кирюшин. – Режим доступа: http://pnu.edu.ru/media/ejournal/articles-2015/TGU_6_5.pdf.

3 Фролов, И.В. Формирование профессиональных компетенций будущих учителей физики при выполнении лабораторных работ / И.В. Фролов // Совре-

менные проблемы науки и образования. – 2014. – № 6. – Режим доступа: <http://science-education.ru/ru/article/view?id=15575>.

4 Физика: методические указания к лабораторным работам / составитель А.В. Сидоров; Бузулукский гуманитарно-технологический институт (филиал) ОГУ. – Бузулук: БГТИ (филиал) ОГУ, 2019. – 83 с.

ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe

Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент,

Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»,

Центр лазерной и информационной биофизики

В настоящее время в различных областях научной и технической деятельности человека нашли широкое применение наноразмерные объекты из полупроводниковых (квантовые точки) и металлических (плазмонные наночастицы) материалов, а также комплексы из подобных частиц. При этом представляется важным изучение взаимодействия и влияния данных нанообъектов друг на друга. В ряде теоретических работ было показано, что вследствие поверхностного плазмонного резонанса локальное электромагнитное поле вблизи металлической наночастицы (ПНЧ) значительно усиливается, что, в свою очередь, приводит к изменению интенсивности излучения квантовых точек (КТ).

Так, в работе [1] исследовано изменение интенсивности фотolumинесценции слоя КТ в зависимости от его удаления от поверхности стекла с плазмонными металлическими наночастицами. Наблюдалось повышение интенсивности фотolumинесценции КТ при её возбуждении в спектральной области плазмонного поглощения наночастиц серебра, а также продемонстрировано значительно увеличение интенсивности люминесценции гибридных КТ ядро/оболочка CdSe/ZnS вблизи поверхности nanoостровковых пленок серебра.

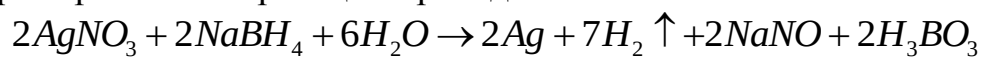
Авторами [2] показано, что в системе «плазмонная металлическая наночастица-квантовая точка» наблюдается снижение интенсивности люминесценции КТ в результате безызлучательного переноса энергии возбуждения от КТ к металлической наночастице в случае малого расстояния между ними. Данный эффект может быть использован при создании высокочувствительных оптических и биологических сенсоров [3,4].

В работах [5-6] теоретически исследованы режимы слабой и сильной связи квантовых точек с поверхностными плазмонами и установлено влияние геометрических и электродинамических параметров системы на скорость энергетической релаксации КТ, а также влияние магнитного поля на спонтанные радиационные переходы. В общем случае характер влияния плазмонных металлических наночастиц на интенсивность люминесценции КТ определяется совокупностью факторов: расстоянием между НЧ и КТ, их размерами и формой, длиной волны возбуждаемого света и т.д.

Однако отметим, что в вышеупомянутых работах исследовались преимущественно ансамбли НЧ и КТ на диэлектрических подложках, поэтому здесь мы рассмотрим взаимодействие наночастиц серебра и квантовых точек CdSe в сплошной среде – водном растворе с использованием спектрофотометрических

и флуорометрических методов. Для регистрации спектров поглощения использовался спектрофотометр PG Instr. T70 UV/VIS, спектры люминесценции регистрировались на спектрофлуориметрической установке, реализованной на базе монохроматора МДР-204. Для возбуждения флуоресценции КТ применялся УФ светодиод с длиной волны 365 нм.

Синтез наночастиц серебра проводился по методу борогидридного восстановления, примерная схема реакции приведена ниже:



Для этого в раствор борогидрида натрия NaBH_4 с концентрацией 2·мМ охлажденный до температуры 0°С при интенсивном перемешивании по капле (с частотой 1 капля в секунду) добавляли водный раствор AgNO_3 с концентрацией 1·мМ. При этом менялась окраска раствора – сначала с бесцветной на светло-жёлтую, а затем на тёмно-коричневую, что свидетельствовало об образовании в объёме раствора нанокластеров серебра. Концентрация НЧ, синтезированных таким образом составила 0,15 мМ.

Для предотвращения агрегации коллоидных наночастиц серебра в раствор вносили 2% (по массе) порошкообразного поливинилового спирта (ПВС). На рисунке 1 приведены спектры поглощения полученных растворов, как с добавлением полимера и без него. Сдвиг пика плазмонного резонанса на 10 нм в длинноволновую область для растворов с ПВС связан с изменением диэлектрической проницаемости ближнего окружения НЧ, что свидетельствует о преимущественном размещении полимерных молекул в данной области и их агрегации с поверхностью металла.

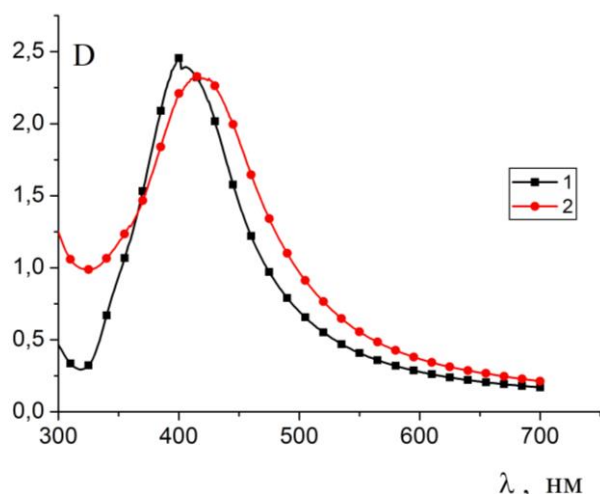


Рисунок 1 - Спектры поглощения коллоидных растворов наночастиц серебра 1 – без ПВС; 2 – с добавлением ПВС

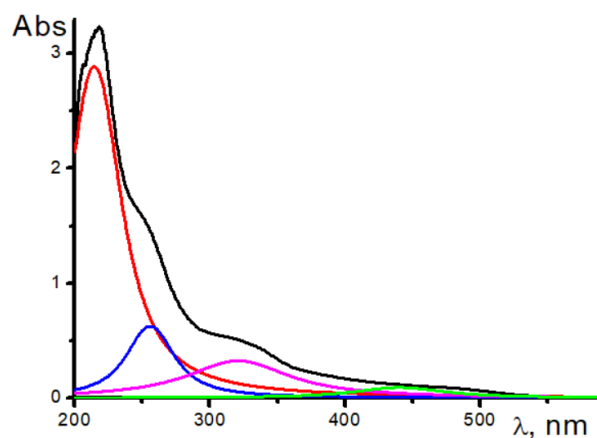


Рисунок 2 – Спектр поглощения водного раствора КТ и его разложение по лоренцевым кривым для разных переходов

Для синтеза КТ CdSe использовались водные растворы $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ – 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 происходило при повышении температуры раствора выше 50-60 °С, в этом случае химическая реакция с осаждением CdSe активируется и начинается стадия нуклеации (зародышеобразования) КТ. В дальнейшем, при уменьшении концентрации реагентов в растворе, образование новых центров прекращается и процесс переходит в стадию Освальдовского созревания, в котором и происходит рост размеров квантовых точек. Типичный спектр поглощения синтезированных растворов КТ приведен на рисунке 2, на нем хорошо различимы несколько полос поглощения различной интенсивности, которые соответствуют различным переходам между уровнями размерного квантования в полупроводниковом нанокристалле.

Для определения взаимного влияния НЧ и КТ их растворы смешивались так, чтобы концентрация КТ в них оставалась неизменной, а концентрация наночастиц серебра линейно возрастала. Кривые оптической плотности данных образцов (см. рисунок 3) показывают хорошее спектральное перекрытие низко-частотной полосы поглощения КТ и пика плазмонного резонанса НЧ. При этом, с увеличением концентрации НЧ амплитуда плазмонного резонанса возрастает. Также отметим здесь, что спектры поглощения смешанных образцов с соответствующей концентрацией в области 350-700 нм для плазмонных наночастиц с ПВС и без него практически совпадают.

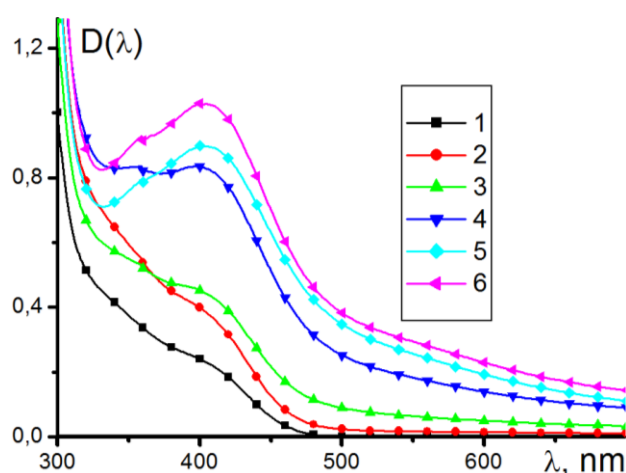


Рисунок 3 – Спектры поглощения системы КТ+НЧ (без ПВС) при увеличении концентрации наночастиц серебра (10^{-2} мМ): 1 – 0; 2 – 1; 3 – 4; 4 – 9; 5 – 11; 6 – 15.

На рисунках 4-5 приведены спектры флуоресценции квантовых точек при различной концентрации наночастиц серебра в растворе и соответствующая им зависимость максимума интенсивности флуоресценции КТ в координатах Штерна-Фольмера (ШФ). Из приведенных графиков видно, что интенсивность свечения квантовых точек с увеличением от концентрации наночастиц серебра монотонно убывает. При этом зависимость, приведенная на рисунке 5, хорошо

аппроксимируется прямой линией, что позволяет определить константу тушения ШФ.

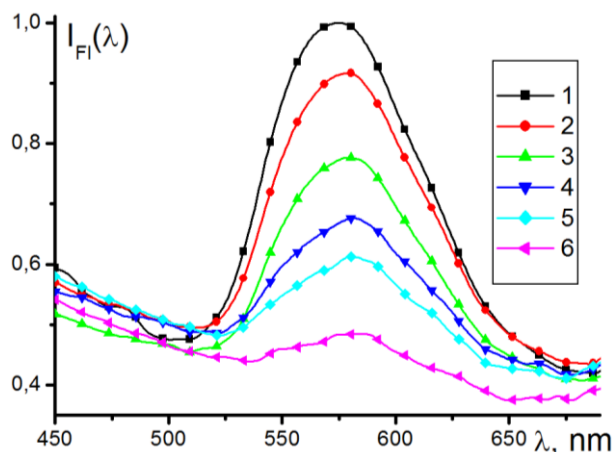


Рисунок 4 – Спектры люминесценции системы КТ+НЧ (без ПВС) при увеличении концентрации наночастиц серебра (10^{-2} mM):

1 – 0; 2 – 1; 3 – 3; 4 – 8; 5 – 11; 6 – 15.

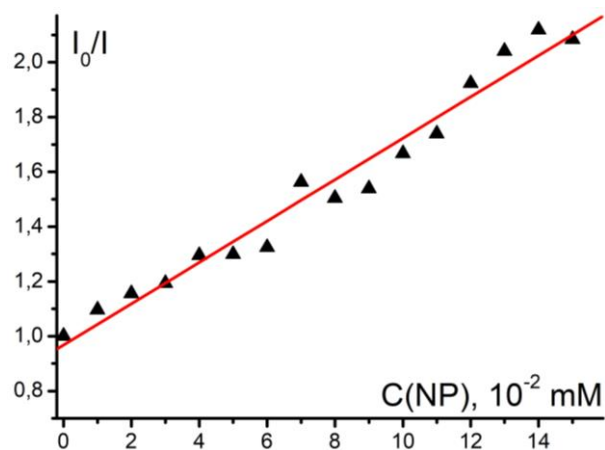


Рисунок 5 – Зависимость эффективности тушения люминесценции КТ от концентрации наночастиц серебра в координатах Штерна-Фольмера

На рисунках 6-7 приведены аналогичные зависимости для спектров флуоресценции КТ, только с использованием наночастиц серебра покрытых оболочкой из ПВС. Здесь также имеет место монотонное тушение люминесценции КТ наночастицами металла, в координатах ШФ также хорошо описываемое линейной зависимостью. Однако константа тушения, в данном случае, уменьшается в 4 раза по сравнению со случаем наночастиц без полимерной оболочки.

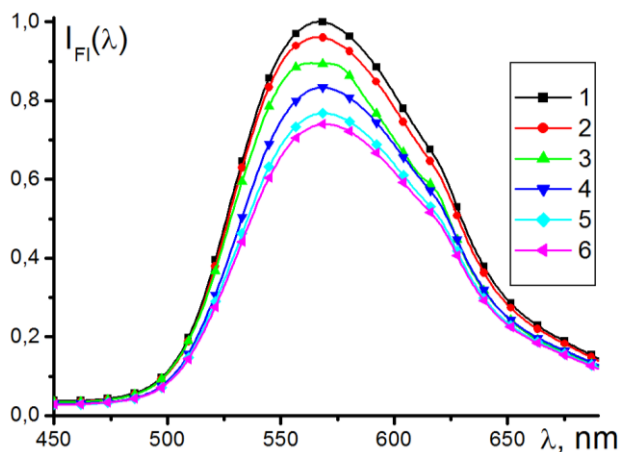


Рисунок 6 – Спектры люминесценции системы КТ+НЧ (с ПВС) при увеличении концентрации наночастиц серебра (10^{-2} mM): 1 – 0; 2 – 1; 3 – 3; 4 – 8; 5 – 11; 6 – 15.

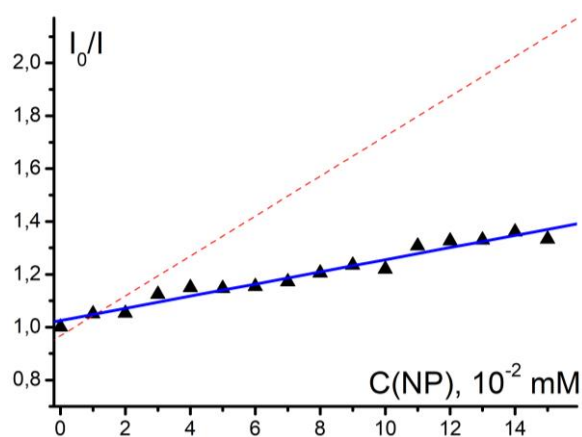


Рисунок 7 – Зависимость эффективности тушения люминесценции КТ от концентрации наночастиц серебра покрытых ПВС в координатах Штерна-Фольмера

Полученный результат хорошо согласуется с теоретическими моделями развитыми в [5-6], где уменьшение квантового выхода люминесценции с ростом концентрации тушителя описывается как результат экситон-плазмонного взаимодействия КТ и наночастиц серебра, вследствие чего происходит безызлучательный перенос энергии от КТ на НЧ с последующей деградацией энергии возбуждения в тепло. При этом различие в константах тушения для чистого водного раствора наночастиц и НЧ покрытых оболочкой ПВС говорит о том, что полимерный слой в последнем случае играет роль буфера, ограничивающего расстояние минимального сближения наночастиц серебра и полупроводникового кристалла. Вследствие резкой дистанционной зависимости скорости безызлучательного переноса это проявляется в уменьшении эффекта тушения люминесценции квантовых точек.

Список литературы

1. Soganci I.M., Nizamoglu S., Mutlugun E., Akin ODemir H.V. // Opt. Express. 2007. Vol. 15. N 22. P. 14 289–14 298.
2. Pons T., Medintz I.L., Sapsford K.E., Higashiya S, Grimes A.F., English D.S., Mattoussi H. // Nano Lett. 2007. Vol. 7. N 10. P. 3157–3164.
3. Zhang M., Cao X., Li H., Guan F. Guo J., Shen F, Luo Y., Sun C., Zhang L. // Food Chemistry. 2012. Vol. 135. P. 1894–1900.
4. Wang L., Zhang J., Bai H., Li X., Lv P., Guo A. // App Biochem. Biotechnol. 2014. Vol. 173. N 5. P. 1073–1082.
5. Т.М. Чмерева, М.Г Кучеренко, Д.А. Кислов, Налбандян В.М Плазмон-экситонное взаимодействие в планарных наноструктурах с квантовыми точками // Оптика и спектроскопия. 2018. Т.125. № 5. С. 670-677.
6. М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян, Т.М. Чмерева Люминесценция комплексов из квантовых точек и плазмонных наночастиц в магнитном поле / Сборник трудов XI Международной конференции «Фундаментальные проблемы оптики – 2019». Санкт-Петербург. 21-25 октября 2019 / Под ред. проф. С.А. Козлова.– СПб: Университет ИТМО, 2019. – 406 с.: с ил. ISBN 978-5-7577-0607-8.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ОБРАЗОВАНИЕ БИОПЛЁНОК БАКТЕРИЯМИ *E. COLI*

Тихонова Т.А., Летута У.Г., канд. физ.-мат. наук,

Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

В естественной среде больше чем 99% всех бактерий находятся в виде биопленок [1]. Сообщества микроорганизмов, объединенные в биоплёнки, представляют собой сложную структуру, состоящую из самих микробов и синтезируемого ими полисахаридного матрикса. Биоплёнки – это естественный способ защиты микробных сообществ от воздействия внешних физико-химических факторов: антибиотиков, ультрафиолетового облучения, механического воздействия [1]. Зрелые биоплёнки сложно разрушить, что приводит к развитию хронических инфекций. Микроорганизмы в составе биоплёнок обладают более высокой устойчивостью к лекарственным препаратам. В связи с этим поиск способов управления формированием и разрушением биопленок является актуальной междисциплинарной научной проблемой. На данный момент о влиянии магнитного поля на формирование биоплёнок известно только для бактерий *Pseudomonas aeruginosa* [1]. При этом планктонные микроорганизмы достаточно чувствительны к магнитно-полевому воздействию. Например, рост бактериальной культуры *E. coli* подавляется пропорционально увеличению магнитного поля от 30 до 100 мТл [2].

В статье [3] доказаны эффекты слабых статических магнитного поля на рост трех бактериальных штаммов (*Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus* и *Bacillus subtilis*), которые играют универсальную роль в раневых инфекциях. Жизнеспособность этих бактерий измерялась без магнитного поля и в присутствии различных магнитных полей 30, 50 и 80 мТл спустя 24 часа. Результаты показывают, что магнитное поле уменьшало скорость роста бактерий *Escherichia coli* и *Staphylococcus aureus*, а также увеличивало скорость роста *Bacillus subtilis* после 24 часов воздействия. Все образцы, подвергшиеся воздействию магнитного поля, демонстрировали изменения в их скорости роста по сравнению с контрольными образцами. Результаты дают важное указание на выбор оптимальных параметров для содействия терапевтическому эффекту при лечении заболеваний и инфицированных тканей.

В данной работе исследовалось образование биоплёнок бактериями *E. coli* под воздействием внешнего постоянного магнитного поля. Объект исследования - *Escherichia coli*, типичный представитель кишечной микрофлоры млекопитающих. В работе использовался штамм *K12 TG1*, культивируемый в питательной среде LB. Суточная культура культивировалась в питательной среде LB (Luria-Bertani), содержащей 1% триптона, 0,5% дрожжевого экстракта и 0,64% KCl, pH 7,1–7,2. Измерение биоплёнок производилось через 24 часа ро-

ста бактерий при $T = 37\text{ }^{\circ}\text{C}$ в полистироловых планшетах. Инкубировали в термостате, помещенном в поле электромагнита (“Takeda Richen Ltd.” (Япония)), которым создавалось поле в термостате диапазона 2,2–100 мТл. Бактерии культивировали одновременно в 24 контрольных точках, соответствующих 11 стационарным магнитным полям.

Способность к образованию биоплёнок оценивали по степени связывания красителя кристаллического фиолетового. После экстракции красителя этиловым спиртом измеряли оптическую плотность на приборе иммуноферментный анализатор УНИПЛАН Пикон при длине волны 530 нм. Метод позволяет получить относительные показатели плотности всей биопленки на поверхности подложки. Все экспериментальные данные статистически обрабатывались с помощью прикладного программного пакета Origin 8.0 с применением критерия Стьюдента.

На рисунке 1 представлена экспериментальная магнитно-полевая зависимость образования биоплёнок бактериями *E. coli*

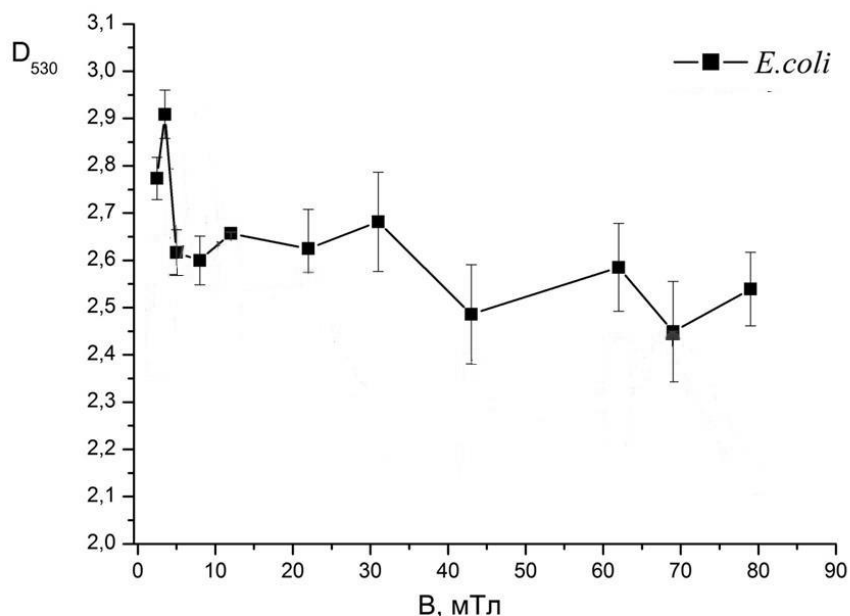


Рисунок 1 – Магнитно-полевая зависимость образования биоплёнок бактериями *E. coli*

Наиболее интересные магнитно-полевые эффекты обнаружены диапазоне магнитного поля: 2-10 мТл (рис. 1). В соответствии с теорией, приведенной в работе [4.] Магнитно-полевые эффекты, обусловленные магниточувствительностью ферментативных процессов, должны наблюдаться в исследуемом диапазоне. Ключевая магниточувствительная стадия таких ферментативных реакций – синглет-триплетная конверсия образующихся в активных сайтах ферментов пар ион-радикал. Индуцировать конверсию могут зеемановские и/или сверхтонкие взаимодействия электронных и ядерных спинов с магнитным полем. Образующиеся в результате таких спин-зависимых ферментативных про-

цессов трансформируют магнитно-изотопные и магнитно-полевые эффекты на молекулярном и клеточном уровне в физиологический отклик живых организмов, доступный для регистрации в экспериментах *in vivo*. При исследовании влияния постоянного магнитного поля и изотопов магния на бактерии *E. coli* [5] пиковые значения в диапазоне 0-10 мТл были обнаружены для всех исследуемых показателей роста и метаболизма: колониеобразующая способность, скорость роста, внутриклеточный элементный состав и пул АТФ. Магниточувствительность биологических процессов в данных полях обусловлена участием частиц, имеющих магнитные моменты, например, стабильные магнитные изотопы ^1H , ^{13}C , ^{31}P , ^{25}Mg , ^{23}Na , всегда присутствующие в живых организмах. Константы сверхтонких взаимодействий для этих изотопов и для органических радикалов, в структуру которых они входят, одинаковы для всех исследуемых групп бактерий и лежат в диапазоне 0,1–4 мТл.

Заключение

Слабое постоянное магнитное поле 2-10 мТл стимулирует биоплёнкообразование, что связано с участием магнитных ядер во внутриклеточных ферментативных процессах. При увеличении магнитного поля до 80 мТл способность формировать биоплёнки снижается.

Список литературы

1. **Bandaraa H.M.**, Magnetic fields suppress *Pseudomonas aeruginosa* biofilms and enhance ciprofloxacin activity / H.M. Bandaraa, H.N., Nguyena D., Mogaralaa S., Osińskib M., H.D.C. Smyth // *Biofouling*, 2015, no. 31(5), pp. 443–457.
2. **Albuquerque, W.W.**, Magnetic fields and magnetic isotope ^{25}Mg effects on biofilms formation by bacteria *E. coli* / W.W. Albuquerque, R.M. Costa, Tde S. Fernandes, A.L. Porto, // *Prog. Biophys. Mol. Biol.*, 2016. V. 121, P. 16–28.
3. **Khaled, A.**, The Effect of Static Magnetic Field on *E. coli*, *S. aureus* and *B. subtilis* Viability / A. Khaled, A., Abdullah // *Journal of Natural Sciences*, 2015. Research. 5, – P. 153-157.
4. **Letuta, U.G.** Enzymatic mechanisms of biological magnetic sensitivity / U.G. Letuta, V.L. Berdinskiy, C. Udagawa, Y. Tanimoto // *Bioelectromagnetics*, 2017. – V. 38, Iss. 7. – P. 511-521.
5. **Letuta, U.G.** Magnetosensitivity of bacteria *E. coli*: Magnetic isotope and magnetic field effects / U.G. Letuta, V.L. Berdinskiy // *Bioelectromagnetics*, 2017. – V. 38, Iss. 8. – P. 581-591.

РОЛЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ИНФОРМАЦИОННО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ УНИВЕРСИТЕТА В ПОДГОТОВКЕ БАКАЛАВРОВ И МАГИСТРОВ ФИЗИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

В перспективах развития системы высшего образования присутствует ряд проблем, решение которых должно привести к ее прогрессу и усовершенствованию. Основными стоящими перед университетами актуальными задачами являются глобализация университетского образования и науки, практическая ориентированность, цифровизация научного и образовательного контента и индивидуализация обучения [1-2].

Современный образовательный процесс невозможен без информационных технологий, благодаря которым возникла доступность образовательного продукта вне зависимости от конкретного местоположения обучающегося. В настоящий момент происходит переход от печатной литературы: учебников и учебных пособий, к электронным ресурсам. Появление сетевых образовательных ресурсов неизбежно влечет за собой снижение доли аудиторной нагрузки. Многие зарубежные и Российские ведущие университеты предлагают широкий выбор on-line курсов по различным учебным дисциплинам, что предоставляет студенту свободу выбора при самостоятельном конструировании плана своего обучения. С развитием skure-технологии стало возможным дистанционное взаимодействие обучающегося и преподавателя в режиме on-line. Это существенно расширяет количество слушателей лекции, которые могут находиться не только в разных регионах, но и в разных странах. Одной из основных тенденций современного образования служит выработка навыков работы с информацией, использование при самообразовании информации, размещенной в глобальной сети Интернет.

Как отмечается в работе [3], информатизация и цифровизация приводят к усилению конкуренции в сфере образовательных услуг, поскольку требования современного рынка труда заставляют молодых людей стремиться получить наиболее качественное образование, которое затем позволит им быть востребованными и получать достойную оплату труда. Ожидалось, что такая конкуренция приведет к повышению качества образования, однако она повлекла за собой ряд проблем, среди которых повышение стоимости образовательных услуг и отток студентов и преподавателей из региональных университетов. Студенты пытаются поступить в более престижный университет, чтобы затем быть успешными в жизни, а профессорско-преподавательский состав стремится к более выгодным условиям труда, что в итоге отрицательно сказывается на региональной экономике.

Поэтому, чтобы быть конкурентоспособными, университетам необходимо развивать информационную инфраструктуру, осваивать и внедрять в образовательный процесс новые цифровые технологии. Информатизация и цифровизация требуют перестройки и коррекции не только содержания образования, но и его организации, поскольку образовательные программы, как правило, не успевают за развитием технологий. Современное программное обеспечение компьютеров расширяет возможности работы с текстами и графикой, расчетами и чертежами, информационными моделями объектов и процессов. В работе [4] отмечается, что наличие цифровых технологий является необходимым, но не достаточным условием для повышения эффективности образовательного процесса, поскольку важным фактором является творческое использование цифровых технологий, например, в научных исследованиях, а не простое выполнение лишь некоторого стандартного набора операций. Одним из инструментов, предназначенных обеспечить современный образовательный процесс, является электронная информационно-образовательная среда (ЭИОС). ЭИОС – это системно организованная совокупность информационных и образовательных ресурсов, средств вычислительной техники, информационных, телекоммуникационных технологий, аппаратно-программного и организационно-методического обеспечения, необходимых и достаточных для организации опосредованного (на расстоянии) взаимодействия всех участников образовательного процесса. В последнее время появилось достаточно большое количество работ, в которых исследовалось и доказывалось влияние ЭИОС университета на повышение качества образования [5-6].

Согласно требованиям действующего законодательства Российской Федерации в сфере образования и Федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования в Оренбургском государственном университете разработана и внедрена ЭИОС для обеспечения информационной открытости вуза и повышения эффективности образовательного процесса. ЭИОС ОГУ обеспечивает доступ к электронным информационным и образовательным ресурсам, фиксацию хода образовательного процесса, формирование электронного портфолио обучающегося, проведение всех видов занятий, реализация которых предусмотрена с применением электронного обучения или дистанционных образовательных технологий [7].

При подготовке бакалавров и магистров физического профиля (направления подготовки 03.03.02 Физика, 03.03.03 Радиофизика и 03.04.02 Физика) необходимо совмещение традиционного аудиторного и интерактивного электронного обучения, поскольку в учебных планах по данным направлениям подготовки значительная доля часов отведена на самостоятельную работу. На официальном сайте ОГУ имеется доступ к учебному плану образовательной программы, которую осваивает обучающийся, и к рабочим программам всех дисциплин. В рабочих программах указаны электронные образовательные ресурсы, доступ к которым обеспечивает ЭИОС ОГУ: полнотекстовые электронные версии учебных пособий и методических указаний, электронные курсы лекций, прикладные программы и т. п. Это позволяет обучающемуся оптимально орга-

низовывать свою самостоятельную работу: прорабатывать учебный материал, готовиться к практическим и лабораторным занятиям, к зачетам и экзаменам. В личном кабинете обучающийся может просматривать результаты текущей (модульной), промежуточной (семестровой) и итоговой успеваемости, что оказывает стимулирующее воздействие на его учебную деятельность.

В университетском фонде электронных ресурсов размещены в открытом доступе презентации лекций по специальным дисциплинам, таким как «Нано-плазмоника», «Физика поверхности и пленок», «Дисперсные системы и поверхность», «Современные проблемы физики». Презентации содержат не только традиционный учебный материал, но и снабжены анимациями изучаемых физических процессов, а также результатами научных исследований, проводимых на физическом факультете, представленными в виде разнообразных схем, рисунков и графиков. Студент имеет возможность самостоятельно изучать материал лекции, конспектировать и отмечать непонятные моменты. Преподаватель на аудиторном занятии может уделить больше времени разбору сложных проблем и ответам на вопросы. Кроме того, электронные курсы лекций необходимы обучающимся при проработке уже пройденного материала в ходе подготовки к промежуточной аттестации.

Некоторые математические и гуманитарные дисциплины представлены в виде электронных курсов в системе электронного обучения Moodle. Данная система имеет широкий спектр возможностей для полноценной поддержки процесса обучения в дистанционной среде – разнообразные способы представления учебного материала, проверки знаний и контроля успеваемости. Например, материал курса «Теория вероятностей и математическая статистика» разбит на 8 основных блоков, содержащих учебный материал, 3 контрольных блока (контрольные работы и расчетные задания) и 3 вспомогательных блока (справочные материалы, приложения, дополнительная литература). Материал, входящий в электронный курс, четко структурирован. Для консультаций и ответов на вопросы студентов используется блок обмена сообщениями, что позволяет сделать самостоятельную работу студентов более управляемой и контролируемой, хотя вопрос о степени личного вклада студента в выполненное задание остается открытым. Для ответа на него необходим дополнительный контроль усвояемости материала на аудиторных занятиях.

В последнее время наблюдается рост доли виртуальных лабораторных работ в общефизическом и специальном практикумах. Виртуальные работы позволяют существенно расширить возможности учебных лабораторий. Преимущества таких работ очевидны и заключаются в отсутствии необходимости приобретения дорогостоящего оборудования, возможности моделирования различных физических процессов, безопасности, возможности быстрого проведения серии экспериментов с различными начальными условиями и, главное, возможности использования виртуальных лабораторных работ в дистанционном обучении. Например, в лаборатории механики имеются виртуальные работы по изучению абсолютно упругого соударения шаров, изучению движения тел под действием постоянной силы. Пакет программ «Физика микромира на

персональном компьютере» используется в курсе «Физика ядра и элементарных частиц». При освоении курса «Радиоэлектроника» студенты моделируют радиотехнические схемы с помощью бесплатной программы Multisim. Изучение дисциплины «Математическое моделирование физических процессов» в основном ориентировано на приобретение навыков работы с программами NAMD и ABINIT, позволяющими проводить молекулярно-динамическое моделирование и расчеты в рамках теории функционала плотности.

Научно-исследовательский вид деятельности является основным видом деятельности, на который ориентированы образовательные программы бакалавриата по направлениям подготовки 03.03.02 Физика и 03.03.03 Радиофизика и магистратуры по направлению 03.04.02 Физика. Поэтому при выполнении научно-исследовательской работы и подготовке выпускной квалификационной работы студенту необходима информация о современном состоянии изучаемой научной проблемы. ЭОИС ОГУ обеспечивает доступ к изданиям электронных библиотечных систем и зарубежным сетевым ресурсам, а именно к American Institute of Physics - электронной коллекции журналов издательства Американского института физики, которая содержит такие журналы, как Journal of Mathematical Physics, Journal of Chemical Physics, Applied Physics Letters, Journal of Applied Physics и др.

Таким образом, опыт использования ЭИОС ОГУ при подготовке бакалавров и магистров физического профиля показывает, что в целом она способствует активизации самостоятельной работы студентов. Наиболее предпочтительным подходом к проблеме повышения качества физического образования является совмещение традиционного аудиторного и современного электронного обучения, что позволяет оптимально организовать учебный процесс для студентов с разными способностями и возможностями.

Список литературы

1. Ладыжец, Н.С. Университетский барометр: мировые тенденции развития университетов и образовательной среды / Н.С. Ладыжец, Е.В. Неборский // Интернет журнал «Науковедение», 2015. – Т. 7. - № 2. Режим доступа: <http://naukovedenie.ru/PDF/68PVN215.pdf>

2. Богуславский, М.В. Стратегические тенденции развития системы высшего образования в Российской Федерации / М.В. Богуславский, Е.В. Неборский // Гуманитарные исследования Центральной России, 2017. - № 2(3). - С. 1-14

3. Неборский, Е.В. Развитие университетов в контексте глобализации / Е.В. Неборский // Интернет-журнал «Проблемы современного образования», 2015. - № 4. – С. 28-38. Режим доступа: <http://www.pmedu.ru>

4. Козлова, Н.Ш. Цифровые технологии в образовании / Н.Ш. Козлова // Вестник майкопского государственного технологического университета, 2019. - №1(40). – С. 85-93

5. Серафимович, И.В. Формирование электронной-информационно-образовательной среды вуза: интеракция, развитие профессионального мышле-

ния, управление / И.В. Серафимович, О.М. Конькова, А.В. Райхлина // Открытое образование, 2019. – Т. 23. - № 1. – С. 14-25

6. Лебедева, Т.Е. Электронная образовательная среда вуза: требования, возможности, опыт и перспективы использования / Т.Е. Лебедева, Н.В. Охотникова, Е.А. Потапова // Интернет-журнал «Мир науки», 2016. – Т. 4. - № 2. – С. 1-12. Режим доступа: <http://mir-nauki.com>

7. Положение об электронной информационной образовательной среде ОГУ. Режим доступа: <http://www.osu.ru/doc/4410>

ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА ОТ СРЕДЫ С МАГНИТОПЛАЗМОННЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент,
Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Гадаева Э.К.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Магнитооптическим явлениям принадлежит одно из основных мест среди множества различных оптических эффектов, поскольку благодаря им появляется возможность управлять такими характеристиками оптического излучения как поляризация и интенсивность с помощью магнитного поля. Особый интерес вызывает возникновение резонансных явлений в магнитооптическом отклике магнитоплазмонных наноструктур, что может быть положено в основу принципов работы высокочувствительных сенсоров магнитного поля, магнитооптических модуляторов света и других оптических устройств нового поколения.

При отражении света от намагниченного ферромагнетика наблюдается магнитооптический эффект Керра. Когда намагниченность направлена перпендикулярно поверхности образца имеет место полярный эффект Керра, когда намагниченность направлена вдоль поверхности и при этом лежит в плоскости падения света - меридиональный эффект Керра. Эти эффекты проявляются в повороте плоскости поляризации и возникновении эллиптической поляризации отраженного света. Если намагниченность параллельна поверхности образца и при этом перпендикулярна плоскости падения наблюдается экваториальный эффект Керра, заключающийся в изменении интенсивности отраженного света при перемагничивании [1, 2].

В данной работе рассмотрено отражение света от гетерогенной среды, представляющей собой диэлектрическую матрицу, в которую внедрены сферические слоистые наночастицы, имеющие ферромагнитное ядро и оболочку из благородного металла. Если объемная доля наночастиц не превышает 15%, то для описания свойств рассматриваемой среды применима модель эффективной среды Максвелла Гарнетта. В этой модели среда с включениями считается однородной и характеризуется эффективными макроскопическими параметрами [3]. Поскольку оптические свойства наночастиц с ферромагнитным ядром являются анизотропными, то и эффективная среда будет обладать анизотропией, и ее диэлектрическая проницаемость будет тензором второго ранга $\tilde{\epsilon}^{eff}$. Согласно модели Максвелла Гарнетта вектор поляризации $\mathbf{P}$ внутри воображаемой сферы, содержащей несколько наночастиц, определяется формулой

$$\mathbf{P} = \frac{3}{4\pi} (\tilde{\epsilon}^{eff} - \epsilon_d \mathbf{I}) (\tilde{\epsilon}^{eff} + 2\epsilon_d \mathbf{I})^{-1} \mathbf{E}, \quad (1)$$

где ϵ_d – диэлектрическая проницаемость матрицы, $\mathbf{E}$ – напряженность внешнего однородного поля, $\mathbf{I}$ – единичная матрица.

С другой стороны вектор поляризации будет складываться из наведенных дипольных моментов каждой наночастицы $\mathbf{p}_i = \tilde{\alpha}_i \mathbf{E}$, где $\tilde{\alpha}_i$ - тензор дипольной динамической поляризуемости. Если все наночастицы одинаковы, то вектор поляризации будет равен

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_i \mathbf{p}_i = n \tilde{\alpha} \mathbf{E}, \quad (2)$$

где n – концентрация наночастиц.

Приравняв выражения (1) и (2), для тензора диэлектрической проницаемости эффективной среды можно получить следующую формулу [4]

$$\tilde{\epsilon}^{eff} = \epsilon_d \left(\mathbf{I} - \frac{4\pi}{3} n \tilde{\alpha} \right)^{-1} \left(\mathbf{I} + \frac{8\pi}{3} n \tilde{\alpha} \right). \quad (3)$$

Тензор поляризуемости сферической наночастицы с ферромагнитным ядром и диамагнитной оболочкой определяется диэлектрическими свойствами материалов ядра и оболочки, а также среды, их окружающей, и записывается в виде [5]

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}(\omega) = R^3 \times \\ \left[\left(\tilde{\epsilon}_f(\omega) + 2\epsilon_m(\omega) \mathbf{I} \right) (\epsilon_m(\omega) - \epsilon_d) + \left(\tilde{\epsilon}_f(\omega) - \epsilon_m(\omega) \mathbf{I} \right) (2\epsilon_m(\omega) + \epsilon_d) \cdot (R_1/R)^3 \right] \times \\ \left[\left(\tilde{\epsilon}_f(\omega) + 2\epsilon_m(\omega) \mathbf{I} \right) (\epsilon_m(\omega) + 2\epsilon_d) + 2 \left(\tilde{\epsilon}_f(\omega) - \epsilon_m(\omega) \mathbf{I} \right) (\epsilon_m(\omega) - \epsilon_d) \cdot (R_1/R)^3 \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (4)$$

где R_1 и R – радиусы ядра и всей частицы соответственно, $\epsilon_m(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость благородного металла, $\tilde{\epsilon}_f(\omega)$ – тензор диэлектрической проницаемости ферромагнетика.

Вид тензора $\tilde{\epsilon}_f(\omega)$ для ферромагнитных материалов определяется намагниченностью среды и в общем случае имеет вид [6]

$$\tilde{\epsilon}_f(\omega) = \epsilon_1(\omega) \begin{pmatrix} 1 & -iQ(\omega)m_z & iQ(\omega)m_y \\ iQ(\omega)m_z & 1 & -iQ(\omega)m_x \\ -iQ(\omega)m_y & iQ(\omega)m_x & 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где ϵ_1 – диэлектрическая проницаемость ненамагниченного ферромагнетика, являющегося оптически изотропным; Q – магнитооптический параметр Фохта, m_i – декартовы компоненты единичного вектора, направленного вдоль вектора намагниченности ферромагнетика.

Частотная зависимость диэлектрической проницаемости ферромагнетика определяется в модели Друде как $\epsilon_1(\omega) = 1 - \omega_{pl1}^2 / (\omega^2 + i\gamma_1\omega)$, где ω_{pl1} и γ_1 – плазменная частота и коэффициент диссипации, определяющий тепловые потери в металле. Параметр Фохта находят из экспериментальных данных, характеризующих магнитооптические эффекты, так как на данный момент теоретическая задача нахождения частотной зависимости магнитооптического параметра не решена.

Диэлектрическая проницаемость благородного металла находится в рамках обобщенной модели Друде $\epsilon_m(\omega) = \epsilon_\infty - \omega_{pl2}^2 / (\omega^2 + i\gamma_2\omega)$, где ϵ_∞ – высокоча-

стотная диэлектрическая проницаемость, ω_{pl2} и γ_2 – плазменная частота и коэффициент диссипации соответственно. Диэлектрическая проницаемость ε_d среды, окружающей частицы, предполагается не зависящей от частоты.

Структура тензоров эффективной диэлектрической проницаемости (3) среды с наночастицами и дипольной динамической поляризуемости (4) наночастицы подобна структуре тензора диэлектрической проницаемости ферромагнетика (5). Если намагниченность ядра слоистой частицы направлена вдоль одной из декартовых осей, то у тензоров (3) и (4) будут отличны от нуля пять элементов. При этом, как показывают расчеты, два диагональных элемента совпадают, а третий слабо от них отличается. Поэтому при рассмотрении отражения света от среды с наночастицами можно ввести упрощающее предположение, что все диагональные элементы тензора эффективной диэлектрической проницаемости одинаковы.

На рисунке 1 показано отражение и преломление света на плоской границе гетерогенной среды и однородной среды с показателем преломления ε_0 . Намагниченность $\mathbf{M}$ ядер наночастиц направлена вдоль оси z , поэтому элементы тензора диэлектрической проницаемости эффективной среды обладают следующими свойствами:

$$\varepsilon_{xx}^{eff} = \varepsilon_{yy}^{eff} = \varepsilon_{zz}^{eff}, \quad \varepsilon_{xy}^{eff} = -\varepsilon_{yx}^{eff} \quad \text{и} \\ \varepsilon_{xy}^{eff} \ll \varepsilon_{xx}^{eff}.$$

Как отмечалось выше, в этом случае будет наблюдаться полярный эффект Керра, который заключается в изменении поляризации отраженной волны по сравнению с падающей. В гетерогенной среде будут распространяться две волны, поляризованные по кругу в противоположных направлениях, которым соответствуют два показателя преломления

$$n_{1,2}^2 = \varepsilon_{xx}^{eff} \pm i\varepsilon_{xy}^{eff} \cos\varphi_2.$$

Ввиду малости недиагональных элементов тензора $\tilde{\varepsilon}^{eff}$ угол преломления обеих волн можно считать одинаковым и находить его из закона преломления

$$\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \sin\varphi_2 = \sqrt{\varepsilon_0} \sin\varphi_0.$$

Из условия равенства тангенциальных составляющих напряженностей электрического и магнитного полей на границе раздела следует связь амплитуд отраженной и прошедшей волн с амплитудой падающей волны. Если на границу падает s -поляризованная волна (поляризованная перпендикулярно плоскости падения), то в отраженной волне кроме s -составляющей появится еще и p -составляющая, и поляризация отраженной волны станет эллиптической. Для

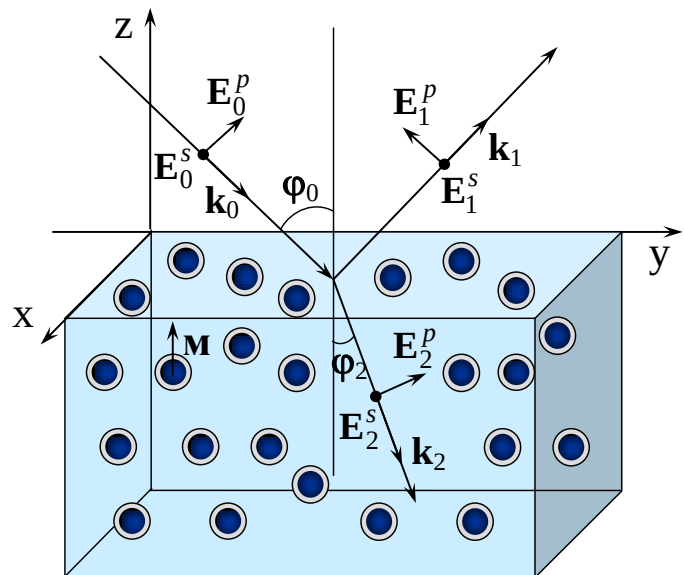


Рисунок 1 – Отражение и преломление света на поверхности гетерогенной среды

компонент амплитуды отраженной волны имеют место формулы [7]

$$E_1^s = r_{ss} E_0^s, \quad r_{ss} = \frac{\sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 - \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_2}{\sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_2} \quad (6)$$

$$E_1^p = r_{ps} E_0^s, \quad r_{ps} = \frac{\varepsilon_{xy}^{eff} \sqrt{\varepsilon_0 / \varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 \cos^2 \varphi_2}{\left(\sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_2 \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_2 \right)}.$$

Если на границу падает p -поляризованная волна, компоненты амплитуды отраженной волны выражаются через амплитуду падающей волны следующим образом

$$E_1^p = r_{pp} E_0^p, \quad r_{pp} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 - \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_2}{\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_2} \quad (7)$$

$$E_1^s = r_{sp} E_0^p, \quad r_{sp} = r_{ps}.$$

Первые формулы в (6) и (7) – это формулы Френеля для падения света на плоскую границу раздела двух диэлектриков. Угол ориентации φ_K эллипса поляризации отраженной волны и ее эллиптичность η_K определяются отношением E_1^p / E_1^s для падающей волны s -поляризации или E_1^s / E_1^p для волны p -поляризации

$$\varphi_K + i\eta_K = - \frac{\varepsilon_{xy}^{eff} \sqrt{\varepsilon_0 / \varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 \cos^2 \varphi_2}{\left(\sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 \mp \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_2 \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 \pm \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_2 \right)}, \quad (8)$$

где верхний знак для s -поляризации, нижний для p -поляризации.

Когда намагниченность ядер наночастиц направлена вдоль оси y , y тензора диэлектрической проницаемости эффективной среды $\varepsilon_{xz}^{eff} = -\varepsilon_{zx}^{eff}$, а другие недиагональные компоненты равны нулю. В этом случае будет наблюдаться меридиональный эффект Керра, который тоже заключается в появлении эллиптической поляризации у отраженной волны. Показатели преломления для волн, распространяющихся в гетерогенной среде, равны

$$n_{1,2}^2 = \varepsilon_{xx}^{eff} \pm i\varepsilon_{xz}^{eff} \sin \varphi_2.$$

Между s - и p - компонентами отраженной и падающей волн имеет место такая же связь, как и в полярном эффекте, только коэффициент r_{ps} определяется следующим образом

$$r_{ps} = \frac{\varepsilon_{xz}^{eff} \sqrt{\varepsilon_0 / \varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 \cos \varphi_2 \sin \varphi_2}{\left(\sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_2 \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos \varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_0} \cos \varphi_2 \right)},$$

и параметры эллипса поляризации отраженной волны задаются выражением

$$\varphi_K + i\eta_K = - \left(\frac{\varepsilon_{xz}^{eff} \sqrt{\varepsilon_0 / \varepsilon_{xx}^{eff}} \cos\varphi_0 \cos\varphi_2 \sin\varphi_2}{\left(\sqrt{\varepsilon_0} \cos\varphi_0 \mp \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos\varphi_2 \right) \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos\varphi_0 \pm \sqrt{\varepsilon_0} \cos\varphi_2 \right)} \right). \quad (9)$$

Экваториальный эффект Керра имеет место, когда намагниченность ядер наночастиц направлена вдоль оси x . При этом ненулевыми недиагональными элементами тензора эффективной проницаемости являются $\varepsilon_{yz}^{eff} = -\varepsilon_{zy}^{eff}$. В этом случае имеется одна распространяющаяся в гетерогенной среде волна, которой соответствует показатель преломления $n^2 = \varepsilon_{xx}^{eff}$. Кроме того, поляризация отраженной волны не изменяется. При падении на границу раздела s -волны амплитуда отраженной волны связана с амплитудой падающей формулой Френеля (6). В случае p -волны граничные условия для напряженностей электрического и магнитного полей приводят к следующей связи между амплитудами падающей и отраженной волн [6]

$$E_1^p = \frac{\left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} + \varepsilon_{yz}^{eff} / \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \operatorname{tg}\varphi_2 \right) \cos\varphi_0 - \sqrt{\varepsilon_0} \cos\varphi_2}{\left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} + \varepsilon_{yz}^{eff} / \sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \operatorname{tg}\varphi_2 \right) \cos\varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_0} \cos\varphi_2} E_0^p. \quad (10)$$

Выражение (10) можно переписать, выделив коэффициент Френеля r_{pp} , определяемый формулой (7), и малую добавку Δr_{pp}

$$\Delta r_{pp} = \frac{\varepsilon_{yz}^{eff} \varepsilon_0 \sin 2\varphi_0}{\varepsilon_{xx}^{eff} \left(\sqrt{\varepsilon_{xx}^{eff}} \cos\varphi_0 + \sqrt{\varepsilon_0} \cos\varphi_2 \right)^2}. \quad (11)$$

Экваториальный эффект Керра характеризуется относительным изменением интенсивности отраженной p -волны [6]

$$\delta_p = \frac{I - I_0}{I_0} = \left| \frac{r_{pp} + \Delta r_{pp}}{r_{pp}} \right|^2 - 1,$$

где I и I_0 – интенсивность при наличии и в отсутствии намагниченности ядер наночастиц соответственно. Подстановка выражений для r_{pp} (7) и Δr_{pp} (11) в формулу δ_p дает

$$\delta_p = 4 \operatorname{Im} \left(\frac{i \varepsilon_0 \varepsilon_{yz}^{eff} \operatorname{tg}\varphi_0}{\left(\varepsilon_{xx}^{eff} - \varepsilon_0 \right) \left(\varepsilon_{xx}^{eff} - \varepsilon_0 \operatorname{tg}^2 \varphi_0 \right)} \right). \quad (12)$$

При проведении расчетов эффектов Керра характеристики благородного металла выбирались соответствующими серебру: $\hbar\omega_{pl2} = 9,1 \text{ эВ}$, $\hbar\gamma_2 = 0,027 \text{ эВ}$,

$\varepsilon_\infty = 4,4$ [8]. Диэлектрическая проницаемость ε_d среды, являющейся матрицей, принималась равной 2. Диэлектрическая проницаемость среды, граничащей с гетерогенной, тоже равнялась 2. Такая ситуация соответствует, например, отражению света от границы раздела двух одинаковых стекол, одно из которых допировано наночастицами. Объемная концентрация наночастиц составляла 10%. Характеристики ферромагнетика отвечали кобальту: $\hbar\omega_{pl1} = 9,74$ эВ, $\hbar\gamma_1 = 0,632$ эВ [2]. Значения магнитооптического параметра Фохта Q кобальта для разных длин волн были взяты из работы [9], в которой они находились из экспериментального наблюдения эффекта Керра. Согласно данным, приведенным в этой работе, в видимом диапазоне реальная часть Q отрицательна и монотонно уменьшается от $-20 \cdot 10^{-3}$ до $-35 \cdot 10^{-3}$ при увеличении длины волны от 300 до 700 нм. Мнимая часть Q положительна и увеличивается от 0 до $10 \cdot 10^{-3}$ в том же диапазоне длин волн. В частности, если длина волны равна 633 нм, то $Q = (-27,4 + i6,86) \cdot 10^{-3}$ [9].

На рисунке 2 для s – и p – поляризованной падающей волны представлены результаты расчетов ориентации эллипса поляризации φ_K и эллиптичности η_K отраженной волны для разных значений отношения $\xi = R_1/R$ радиуса кобальтового ядра к радиусу всей наночастицы в случае полярного эффекта Керра. Угол падения φ_0 составлял 30° .

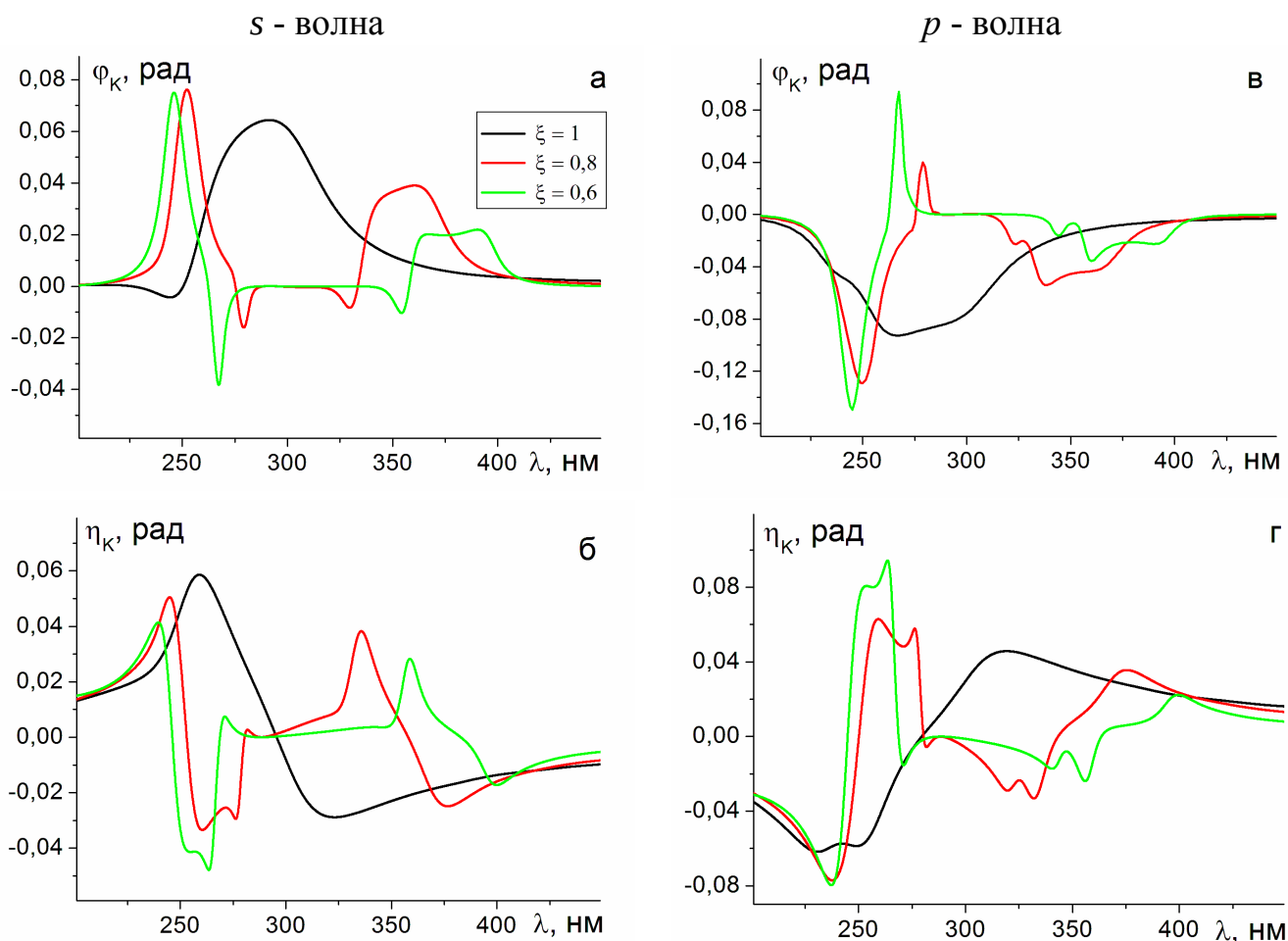


Рисунок 2 – Угол ориентации эллипса поляризации φ_K и эллиптичность η_K волны s – и p – поляризации, отраженной от гетерогенной среды

Из рисунка видно, что наличие серебряной оболочки приводит к возникновению ярко выраженного эффекта в диапазонах длин волн 225 – 275 нм и 350 – 400 нм. Первый диапазон отвечает плазмонному резонансу на границе кобальт–серебро, а второй – на границе серебро–окружающая среда. С увеличением толщины серебряной оболочки эффект Керра уменьшается и пропадает для однородной серебряной частицы.

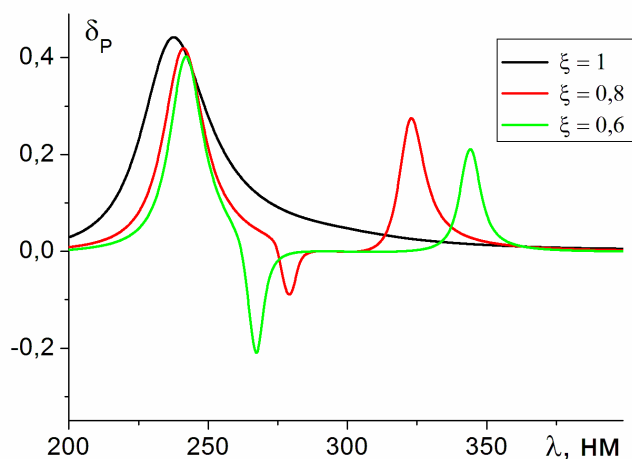


Рисунок 3- Спектральная зависимость экваториального эффекта Керра

частицы.

Таким образом, варьируя материалы ядра частицы и ее оболочки, а также их геометрические параметры, можно управлять величиной и спектральным положением поляризационного и интенсивностного эффектов Керра, что в свою очередь может оказаться полезным с прикладной точки зрения.

Список литературы

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. 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.
3. 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.
4. Чмерева, Т.М. Эффект Фарадея и магнитный круговой дихроизм в средах с магнитоплазмонными наночастицами и двухчастичными кластерами/ Т.М. Чмерева, М.Г. Кучеренко // Журнал прикладной спектроскопии, 2019. - Т. 86. - №4. - С. 647-653.
5. Кучеренко, М.Г. Спектры поляризуемостей замагниченных слоистых

нанокomпозитов с анизотропной сердцевинной или оболочкой и локализованными поверхностными плазмонами / М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян // Оптический журнал. - 2018. - Т. 85 № 9. - С. 3-11.

6. Zvezdin, A.K. Modern Magneto-optics and Magneto-optical Materials / A.K. Zvezdin, V.A. Kotov. – Bristol and Philadelphia: IOP Publishing, 1997. – 363 p.

7. Соколов, А.В. Оптические свойства металлов / А.В. Соколов. – М.: Главное изд-во физ.-мат. лит-ры, 1961. – 464с.

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

9. Atkinson, R. In-situ, dynamic magneto-optical studies of the growth of Co/Pt Multilayers / R. Atkinson and W.R. Hendr // J. Magn. Soc. Jpn. – 1996. – V. 20. - No. S1. – P. 291-296

ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ

Якупов Г. С.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Современное школьное обучение предполагает формирование исследовательской компетенции наиболее значимой проблемой, поскольку выбор дальнейшей профессии в старших классах становится уже задачей обозримого будущего и этот выбор оказывает сильное влияние на всю предстоящую профессиональную деятельность выпускника любой школы. При таком подходе важным моментом в обучении становится навыков решения различных задач, предполагающих развития у будущих специалистов навыков реализации своих профессиональных функций. Такие навыки формируются при помощи активных методов обучения, которые должны имитировать ситуации, требующие нетривиального решения поставленной задачи. Поскольку физика изучается на большинстве специальностей высших учебных заведений, то такой подход целесообразно было бы начать реализовывать в рамках изучения курса физики, тем более что к настоящему времени накоплен огромный запас заданий, которые можно было бы предлагать для решения будущим инженерам как в рамках семинарских и практических занятий, так и в качестве домашних заданий.

Эффективное формирование предпосылок для будущих профессиональных навыков в процессе обучения в старших классах средней школы происходит при использовании методик, предназначенных для получения опыта самостоятельного решения различных задач. К таким методикам относятся:

- 1) технологии проблемно-модульного обучения, предназначенные для самостоятельного изучения школьником учебного материала;
- 2) технологии исследовательского обучения.

Учебное исследование позволяет сформировать у старшеклассников интеллектуальные способности и исследовательские умения, необходимые инженеру в его профессиональной деятельности. Использование преподавателем вышеназванных методик в процессе изучения физики делает учебный процесс ориентированным на научно-исследовательский характер [1].

Следовательно, основой формирования профессиональной компетентности будущего компетентного специалиста является формирование у него в учебном процессе исследовательской компетенции, то есть элементов творческого потенциала личности [1].

Рассмотрим, в чем заключается суть учебной деятельности направленной на формирование исследовательской компетенции у школьников. Данный вид деятельности отличается от традиционного преподавания тем, что учащемуся в нем отводится большая роль, предоставляется большая самостоятельность. Преподавателю отводится роль координатора деятельности обучающегося, то

есть под руководством преподавателя ученик решает как учебно-исследовательские задачи, решение которых заранее неизвестно, более того, путей решения отличных друг от друга может быть несколько, в зависимости от уровня знаний учащегося, его эрудиции и многого другого. Такие задачи в отличие от стандартных задач по физике, где необходимо подставить числовые данные в известные математические выражения, предполагают от учащегося построить процесс решения задачи в соответствии с методологией научного исследования.

Учебно-исследовательским задачам в учебном процессе должно отводиться особое место, поскольку именно они необходимы для профессиональной подготовки будущего специалиста. Можно привести следующую классификацию задач по физике:

1. Учебная задача: способы решения такой задачи, как правило, известны тому, кто ее решает.
2. Научно-исследовательская задача: решение данного вида задач неизвестно никому и решение такой задачи позволяет получить новые знания.

Промежуточным типом задач является учебно-исследовательская задача, являющаяся своего рода аналогом исследовательской задачи для ученого. Поскольку в педагогической литературе разные авторы предполагают несколько отличное понимание исследовательских (учебно-исследовательских) задач [2], постараемся выявить некоторые главные черты: таковыми являются поисковой ситуации и гипотезы, которые требуют от учащегося самостоятельно решения, обоснования и доказательства. Например, будущий инженер при изучении курса физики должен овладеть навыками решения исследовательских задач. Использование учебно-исследовательских задач в учебном процессе обеспечивает формирование исследовательских умений и систематизацию полученных знаний.

Для решения исследовательской задачи можно предложить следующий алгоритм:

- 1) Проанализировать условие задачи, чтобы понять идею задачи целиком:
 - а. Какое физическое явление имеет место в условии задачи?
 - б. Какой физический процесс происходит?
 - в. Что необходимо найти?
 - г. Какой раздел физики затрагивает предложенная задача?
- 2) Качественный анализ возможного решения задачи:
 - а. Схематическое описание явления.
 - б. Примерное поведение описываемой системы
 - в. Графическое описание системы.
 - г. Возможный диапазон значений искомых величин.
- 3) Составляется план решения задачи:
 - а. Какую физическую величину требуется найти?

- б. В какое уравнение она должна входить?
 - в. Имеет ли решение (решения) данное уравнение?
 - г. Какие величины также являются неизвестными?
 - д. Какие ещё уравнения необходимы?
 - е. Как их составить?
 - ж. Какими параметрами можно пренебречь?
- 4) Анализ полученных результатов [3]:
- а. Имеет ли найденная величина соответствующую размерность?
 - б. Является ли полученный ответ правдоподобным?
 - в. Каков физический смысл полученного ответа?
 - г. Анализ приближения.
 - д. Какие актуальные вопросы можно еще предложить тем, кто решает данную задачу?

Этот алгоритм построен в соответствии с методологией научного исследования, отражая её основные элементы. Исследовательская деятельность может быть разбита на этапы, по аналогии с тем, как поступают в программировании при проектировании программ, когда первоначально программа воспринимается как совокупность действий, каждое из которых детализируется и представляется как последовательность более простых и конкретных действий, называя это нисходящим программированием [4]. Тем не менее, следует отметить, что принятых однозначно исследователями данной проблемы этапов научного исследования в работах по методологии науки не встречается.

В данной статье делается попытка представить схему этапов научных исследований учащихся старших классов таким образом, чтобы исследовательская компетенция на основе этой схемы была сформирована для конкретного исследования, не зависимо от того, является ли оно экспериментальным либо теоретическим [5]. Методологией, согласно, принято считать учение об организации деятельности, поэтому будем полагать, что под методологией научного исследования, соответственно, понимается учение об организации исследовательской деятельности. Следовательно, этапами научного исследования для будущего инженера будут выступать структурные элементы той исследовательской компетенции, которая связана с его будущей профессией.

Исследовательская компетенция может формироваться только при рассмотрении реальных задач, решение которых отличается от традиционных задач по физике тем, что эти задачи строятся на основе физической ситуации, которая в свою очередь может видоизменяться и дополняться новыми условиями. Такие задачи зачастую не имеют одного варианта решения и получаемые в ходе их решения ответы также могут отличаться, тем не менее, являясь верными, в зависимости от предпосылок из которых исходит решающий данную задачу учащийся. Кроме того, при решении достаточно большого количества таких задач формируются навыки самостоятельной постановки проблемы исследования, что немаловажно для будущих специалистов. Рассмотрим элементы исследовательской компетенции, необходимые будущему инженеру, которые фор-

мируются при помощи решения исследовательских задач по физике. В зависимости от поставленных целей, каждый конкретный элемент из этого перечня можно видоизменить.

1. Учащийся должен уметь определять цель исследования для понимания проблемной ситуации (исследовательской задачи) используя для этого известные ему законы физики, необходимые для решения данной исследовательской задачи.
2. Важным аспектом при решении исследовательских задач является умение строить гипотезы. Гипотезы выдвигаются на основе физических законов и не должны им противоречить.
3. Необходимость понимания того, что многие исследовательские задачи затрагивают сразу несколько разделов физики, вследствие чего бывает целесообразно разбить задачу на несколько более простых, промежуточных задач и решать их по отдельности.
4. Умение анализировать решение задачи на частные (предельные) ситуации, а также прогнозировать возможные альтернативные решения для данной задачи.
5. При решении исследовательских задач оценочного характера уметь находить необходимые данные для решения, если они изначально не заданы явно.
6. Поскольку профессия инженера предполагает работу в группах иметь навыки групповой работы, выступления с докладами для обсуждения результатов работы исследовательской микрогруппы.
7. Быть готовым применять полученные результаты на практике, не ограничиваясь только рамками теоретического исследования.
8. Осуществлять критический анализ результатов, полученных в исследовании. Сопоставлять поставленные цели и полученные результаты деятельности.

Предложенное содержание элементов исследовательской компетенции у будущих специалистов при решении ими задач по физике исследовательского характера может варьироваться в зависимости от индивидуальных особенностей школьников. Также может видоизменяться и содержание предлагаемых исследовательских задач, в зависимости от направления подготовки. Так или иначе, решение таких задач предполагает большой объем самостоятельной работы обучающихся в сотрудничестве с преподавателем [6]. Можно выделить ряд ключевых моментов такой деятельности:

- 1) работа учащихся в микрогруппах и преподавателями, а также консультирование у специалистов, для формирования коммуникационной компетенции;
- 2) применение в учебном процессе средств информационно-коммуникационных технологий для формирования информационной компетенции.

В исследовательской задаче, которая представляет собой прообраз реальной ситуации, содержится противоречие, которое является своеобразным мостом от незнания к знанию, побуждает к поиску путей решения поставленной задачи. Причём имеющийся у учащегося жизненный опыт не содержит ответа

на данный вопрос, он следует из знания, которое содержится в условии проблемной ситуации.

Важным качеством, которое необходимо будущим специалистам, является умение строить гипотезы. Обычно это утверждение, относительно которого нельзя точно утверждать, является ли оно истинным или ложным. Такое предположение выдвигается в случае, когда, мы пытаемся объяснить то, что пока не поддается объяснению. Выдвижение гипотезы является первым шагом к построению исследовательской задачи. Гипотеза - это знание, в котором содержится элемент неопределенности, истинность этого знания пока не доказана. Любые научные знания проходят сложный путь от предположения до факта, концепции или теории. Поэтому огромное значение имеет навык правильного построения гипотезы. Для проверки истинности (так и ложности) гипотезы учебная деятельность школьников организуется таким образом, чтобы на основе конкретной физической ситуации, или физических задач, а также их решения, они убеждались в истинности или ложности их предположений.

В качестве примера можно рассмотреть несколько задач исследовательского характера и возможные их решения, представленные учащимися.

Задача 1. Астрономические наблюдения показывают, что на планете Венера полная облачность, так что «жители» Венеры лишены возможности наблюдать небесные светила. Опишите, каким методом они могли бы точно измерить длину суток [7].

Данная задача имеет несколько возможных решений, причем различных, в зависимости от того, каким образом мыслит решающий ее ученик. Возможно такое решение: «жители» Венеры, лишены возможности жить, так как на этой планете постоянно выпадают осадки в виде серной кислоты. Предложив такой ответ, учащийся демонстрирует свои знания из области астрономии. Другим возможным решением может быть такой ответ: а что если для наблюдения небесных светил использовать радиолокацию? Или еще какой-нибудь диапазон электромагнитных волн, например, рентгеновский. Таким образом, решения получаются совершенно разными и, тем не менее, каждое по-своему правильное.

Задача 2. По какой траектории должен лететь самолет ТУ-104 для того, чтобы можно было воспроизвести невесомость [7]?

Эту задачу можно решить традиционным способом, если записать уравнение, описывающее движение самолета в поле земного тяготения, приравняв нулю равнодействующую всех сил, действующих на тело, находящееся в самолете. Существует и другой способ решения этой задачи, в котором достаточно просто предположить, что самолет представляет собой свободно падающее тело. В поле силы тяжести Земли такое тело будет двигаться по параболе. В этом случае, все тела, находящиеся на борту самолета, будут пребывать в состоянии невесомости.

Особенностью таких задач является то, что они не имеют какого-то единого решения и ответа, так как сам решающий может в силу своих знаний, способностей и эрудиции выбрать тот аспект в задаче, который его интересует и

углубиться в его проработку. Причем глубина такого «погружения» ничем не ограничена, то есть каждую такую задачу можно довести до уровня небольшого научного исследования. Ты решения и ответы которые предлагают учащиеся дают возможность судить об их стиле мышления, что очень важно для подготовки будущего инженера, кроме того в большинстве таких заданий численные значения физических величин и параметров, решающий их волен выбирать самостоятельно.

Задача 3. Оцените диаметр купола парашюта, который обеспечивает приземление человека со скоростью, каких числовых отвечающей прыжку человека с высоты 2 м.

В данной задаче, как и во многих задачах исследовательского характера, нет никаких числовых данных, тем не менее, предполагается получить некое численное значение. Для решения данной задачи можно предположить, что сила сопротивления воздуха определяется формулой Ньютона:

$$F = \frac{\rho v^2 S}{2}$$

где S – площадь купола парашюта,

ρ – плотность воздуха.

В установившемся режиме $F = mg$. При высоте h с которой осуществляется прыжок можно получить выражение для скорости

$$v^2 = 2gh$$

Таким образом,

$$S \approx \frac{m}{\rho h}$$

Считая, что $m = 70$ кг, $h \approx 2$ м, $\rho \approx 1,3$ кг/м³, получим оценочное значение $S \approx 30$ м², что соответствует диаметру купола 6 м.

Для преподавателя решение таких задач с учащимися старших классов является очень эффективной проверкой того, что их знания не просто представляются как выученный наизусть без глубокого понимания материал. При использовании таких задач в процессе изучения физики учащимися старших классов можно воспитывать творческое научное мышление, формировать научный стиль мышления, поскольку для эффективной работы инженера необходимо самостоятельное аналитическое мышление.

Решение и исследование каждой из десяти задач мы не приводим, хотя подчеркнем, что именно эта деятельность учащихся позволяет построить один из самых важных этапов теоретического исследования физической ситуации.

Обобщенную программу теоретического исследования с помощью системы задач можно представить, таким образом, состоящей из следующих этапов:

1. Выделение конкретной физической ситуации в учебном материале.
2. Выявление в ней объекта, явления, модели, физических величин.
3. Составление на основе физической ситуации задачи 1.
4. Решение задачи 1 в общем виде на основе анализа и моделирования физической задачной ситуации.

5. Анализ полученного результата задачи 1 (исследование полученной математической формулы на предельные и частные случаи).
 6. Составление на основе измененной физической ситуации задачи 2.
 7. Повторение для задачи 2 пунктов 4 и 5.
 8. Составление, решение и исследование последующих задач 3–10.
 9. Обнаружение связей между физическими ситуациями с помощью решенных физических задач с целью обобщения физической ситуации.
 10. Контроль правильности решения задач и элементы рефлексии.
 11. Апробация результатов исследования в процессе учебных занятий в школе и вузе, составление сборников задач, подготовка методических рекомендаций.
 12. Осуществление научной рефлексии как способа построения новых систем знаний (принятие к исследованию новых физических ситуаций).
- Образцы систем (циклов) учебных задач по всем разделам школьного курса физики, которые можно использовать на начальном этапе обучения учащихся, представлены в сборнике задач.

На основе всего вышесказанного можно сделать следующие выводы. Под исследовательской компетенцией, которая должна быть сформирована у будущего специалиста в процессе учебно-исследовательской деятельности, можно понимать отчужденные, заранее заданные социальные требования к профессиональной его эффективной продуктивной исследовательской деятельности, заключающиеся в способности обнаружить физическую проблему, осознать необходимость ее решения и выполнить операции по её разрешению в соответствии с фазами, стадиями и этапами методологии научного исследования.

Предметной исследовательской компетентностью будущего специалиста будет совокупность личностных качеств обучаемого (ценностно-смысловых ориентаций, знаний, умений, навыков, способностей), обусловленных усвоением ориентировочной основы и опыта исследовательской деятельности по методологии научного исследования в процессе изучения физики.

Список литературы

1. Савенков А.И. Педагогическая психология. В 2 т. Т. 2. М.: Издательский центр «Академия», 2009. 240 с.
2. Шашенкова Е.А. Исследовательская деятельность в условиях многоуровневого обучения: Монография. М.: АПК и ППРО, 2005. 132 с.
3. Майданов А.С. Методология научного творчества. М.: Издательство ЛКИ, 2008. 512 с.
4. Микешина Л.А. Философия науки: Современная эпистемология. Научное знание в динамике культуры. Методология научного исследования. М.: Прогресс-Традиция: МПСИ: Флинта, 2005. 464 с.
5. Разумовский В.Г., Майер В.В. Физика в школе. Научный метод познания и обучение. М.: Гуманитар. изд. центр «ВЛАДОС», 2004. 463 с.
6. Белянин В.А. Сборник задач по физике: Учебное пособие. Йошкар-Ола, 2010. 94 с.

7. Кузнецов А.П., Кузнецов С.П., Мельников Л.А. Физические задачи для научных работников младшего возраста: Учеб. пособие.- Саратов: Изд-во Саратов.ун-та, 1998.- 32 с.:ил. ISBN 5-292-02168-7