

# **СЕКЦИЯ 11**

## **«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ И ФИЗИКО- ТЕХНИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»**

## СОДЕРЖАНИЕ

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ЗАРЯДОВОГО ТРАНСПОРТА В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ Алиджанов Э.К., канд. физ.- мат. наук, Лантух Ю.Д., канд .физ.-мат. наук., доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук. ....	2350
МНОГОСПИНОВЫЕ ЗАПРЕТЫ И ПРАВИЛА ОТБОРА В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ Арифуллин М. Р., канд. физ.-мат. наук.....	2357
ВОЗМОЖНОСТИ И ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННОЙ ТОМОГРАФИИ В ДИАГНОСТИКЕ И МОНИТОРИНГЕ ЗАБОЛЕВАНИЙ Бакаев А.А., Стрекаловская А.Д., канд.биол.наук, доцент	2360
ВЛИЯНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРМИ НА ФОРМИРОВАНИЕ НЕКОЛЛИНЕАРНОГО МАГНЕТИЗМА Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент .....	2364
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛОТНОЙ КЕРАМИКИ С УЧЕТОМ МАСШТАБНОГО ФАКТОРА И СКОРОСТИ НАГРЕВА Гуньков В.В., канд.физ.-мат.наук, Анисина И.Н., канд.тех.наук.....	2367
ФОТОИНАКТИВАЦИЯ БАКТЕРИЙ <i>SALMONELLA</i> В РАСТВОРАХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Дорофеев Д.В., Емельянова А.А., Цюрко Д.Е.....	2372
ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФЕРМЕНТАТИВНОЕ ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ Каепкулова Э.И. ....	2375
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФИЛЛОСИЛИКАТОВ НА ПРИМЕРЕ КАОЛИНОВОЙ ГЛИНЫ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Филяк М.М., канд. техн. наук, доцент .....	2382
МОЩНЫЕ ОПТРОНЫ Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор .....	2389
СИСТЕМЫ ВВОДА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СВЕТОВОДЫ ПОВЫШЕННОЙ НАДЕЖНОСТИ Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор..	2396
УНИВЕРСИТЕТСКАЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ШКОЛА: АНАЛИЗ СОСТОЯНИЯ И НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ Кучеренко М.А., канд.пед.наук .....	2401
СТРУКТУРА АДСОРБИРОВАННОГО СФЕРОИДАЛЬНОЙ НАНОЧАСТИЦЕЙ ОПУШЕЧНОГОСЛОЯ ИЗ ГАУССОВОЙ	

- МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦЕПИ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент ..... 2409
- ПЕРЕСТРОЙКА КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ АДСОРБИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОПРОВОДА В ПОПЕРЕЧНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Неясов П.П. .... 2418
- ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ВБЛИЗИ ЗАМАГНИЧЕННЫХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент ..... 2427
- СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛ, СВЯЗАННЫХ С АДСОРБИРОВАННЫМИ ПОЛИПЕПТИДАМИ НА ЗАРЯЖЕННЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ НАНОЧАСТИЦ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Степанов В. Н., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент..... 2436
- ИНАКТИВАЦИЯ БАКТЕРИЙ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЕЙ Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор.; Никиян А.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент; Раздобреев Д.А., канд. физ.-мат. наук.; Ишемгулов А.Т., канд. физ.-мат. наук; Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е., Дорошкевич А.В. .... 2445
- МАГНИТНАЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ БАКТЕРИЙ *E. COLI* Летута У.Г., канд. физ.-мат. наук..... 2451
- ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ И ВОСПИТАНИЯ Манаков Н.А., д-р физ.-мат. наук., профессор, Гуньков В.В., канд. физ.-мат. наук..... 2455
- СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ И ДЕФОРМАЦИИ СДВИГА Носаев Е.В. .... 2460
- СОЧЕТАНИЕ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ СИНТЕЗА УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА Носаев Е.В. .... 2464
- ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СУГЛИНОК С БЕРЕГА РЕКИ ЧАГАН Нургалиева К.К., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Сокабаева С.С. .... 2468
- ПРОБЛЕМЫ ПРОВЕДЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО КУРСУ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ В УСЛОВИЯХ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ Огерчук А.А. канд. пед. наук, Пискарёва Т.И., канд. тех. наук, Анисина И.Н., канд. тех. наук..... 2471

СИНТЕЗ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ АНТРАЦЕН/ПММА Пеньков С.А., Алимбеков И.Р., Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор .....	2475
РАСЧЕТ СИГНАЛОВ Z-СКАНИРОВАНИЯ В РЕЖИМЕ ЗАКРЫТОЙ АПЕРТУРЫ Русинов А.П., канд. физ.-мат.наук, доцент; Олейник И.О.....	2480
ФЕРРОМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС МАГГЕМИТАF <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Сокабаева С.С., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Нургалиева К.К.....	2488
ЭКВАТОРИАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ КЕРРА В ПЛАНАРНОЙ МАГНИТОПЛАЗМОННОЙ НАНОСТРУКТУРЕ Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Лукашов Д.С.	2492
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛОГИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ФИЗИКИ Якупов Г. С. ....	2501
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ КАК СРЕДСТВО РАЗВИТИЯ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ УМЕНИЙ УЧАЩИХСЯ Якупов Г. С. ....	2506
МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ ФИЗИКИ С БИОЛОГИЕЙ И ИНФОРМАТИКОЙ Якупов Г. С. ....	2510
САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ФИЗИКИ Якупов Г. С. ....	2514

## **ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ЗАРЯДОВОГО ТРАНСПОРТА В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ**

**Алиджанов Э.К., канд. физ.- мат. наук,  
Лантух Ю.Д., канд .физ.-мат. наук., доцент,  
Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Оренбургский государственный университет»**

Исследование свойств органических полупроводников является приоритетным направлением современной науки. В настоящее время органическая электроника выходит на коммерческий уровень. Однако, потенциал органических электронных устройств, таких как солнечные батареи, световые излучатели и тонкопленочные транзисторы, остается не полностью реализованным. Проблемы разделения, рекомбинации и транспорта зарядов в органических полупроводниках находятся в центре интенсивных исследований и дискуссий [1]. При этом специфика органических и некристаллических материалов требует разработки адекватных экспериментальных методов для их изучения.

В отличие от неорганических материалов, поглощение света в органических полупроводниках формирует стабильные возбужденные состояния (экситоны), которые при комнатной температуре не могут диссоциировать термически на свободные электрические заряды. Поэтому непосредственное фотоиндуцированное образование свободных зарядов в органических материалах маловероятно.

В органических твердых телах внутримолекулярные взаимодействия в основном ковалентны, но межмолекулярные взаимодействия обусловлены гораздо более слабыми ван-дер-ваальсовыми и дисперсионными силами. В результате этого транспортные зоны в органических кристаллах гораздо уже, чем у их неорганических аналогов, и структура зон легко нарушается за счет нарушения дальнего порядка. Таким образом, даже в молекулярных кристаллах понятие энергетических зон имеет ограниченную обоснованность, а в процессах зарядового транспорта преобладающую роль играют локализованные на отдельных молекулах возбуждения. В органических полупроводниках зарядовый транспорт происходит посредством переноса электрона (дырки) от одной молекулы к другой, что аналогично прыжковому переносу между дефектными состояниями (ловушками) в неорганических полупроводниках [2].

Стандартным методом определения характеристик зарядового транспорта в полупроводниках является время пролетный метод (ВПМ) [3]. В этом методе световой импульс генерирует в приповерхностной области полупроводника неравновесные носители заряда. Под действием приложенного электрического поля носители перемещаются к противоположной стороне образца. Время, в течение которого носители достигают противоположного электрода, используется для оценки подвижности носителей. Проблема в том, что ВПМ по суще-

ству неравновесный метод, а переходные процессы формирования фототока в неупорядоченных материалах часто являются дисперсионными. Неупорядоченность среды приводит к тому, что подвижность носителей заряда после их импульсной генерации не является константой, а убывает со временем по степенному закону (дисперсионный транспорт). В этом случае время пролета и подвижность носителей заряда начинают зависеть от размеров образца. В последнее время появились методы, основанные на формировании нестационарных фотоиндуцированных пространственных зарядов в фотопроводящих материалах, которые оказались мощным инструментом для измерения фотоэлектрических характеристик неупорядоченных полупроводников [4].

Общей особенностью многих органических полупроводников является  $\pi$ -сопряженная система, которая образована перекрытием углеродных  $\pi$ -орбиталей. Из-за перекрытия орбиталей электроны делокализованы внутри молекулы, и энергетический зазор ( $E_g$ ) между самой высокой занятой молекулярной орбиталью (HOMO) и самой низкой незанятой молекулярной орбиталью (LUMO) относительно мал, т. е. энергия HOMO-LUMO перехода соответствует энергии фотонов видимого диапазона. Слабое взаимодействие между молекулами органических полупроводников обуславливает сильную локализацию электронных возбуждений.

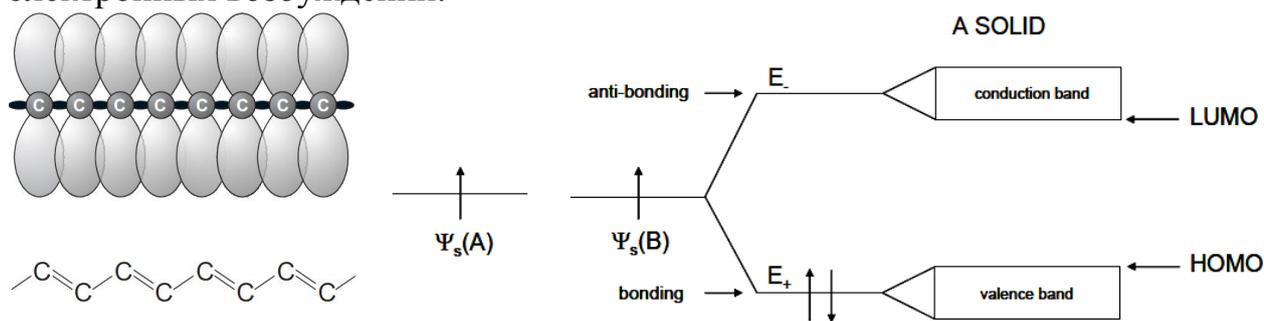


Рис. 1 Система  $\pi$ -сопряженных связей в органических системах. Энергетическая диаграмма формирования молекулярных орбиталей в молекулах и молекулярных кристаллах.

В реальной полимерной системе формируются локализованные  $\pi$ -сопряженные участки со случайно возникающими дефектами, такими как перегибы, скручивания, химические дефекты. Вариации длины сопряжения приводят к энергетическому беспорядку, что концептуально аналогично наличию множества потенциальных квантовых ям различных размеров. Энергетические значения глубины ям изменяются в зависимости от типа реализации дефекта. Это делает возможным применение для случая органических систем результатов, полученных в физике аморфных полупроводников [5]. Тогда на краях запрещенной зоны вместо резкого разрыва появляются экспоненциально убывающие «хвосты» электронных состояний, которые напоминают хвосты электронных состояний аморфных полупроводников. Для учета «болтающихся» связей электронные состояния в середине зоны дополняются группами локализованных состояний [6].

Таким образом, для олигомеров и полимеров с низкой степенью беспорядка характерно наличие полос делокализованных состояний с экспоненциальными полосами-хвостами локализованных состояний в запрещенной зоне.

Для упорядоченных неорганических полупроводников ширина запрещенной зоны соответствует точной разности энергий между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости (рисунок 2). При этом поглощение фотона приводит к образованию свободного электрона и дырки. Спектр электронного поглощения на краю запрещенной зоны характеризуется резким (на несколько порядков) возрастанием коэффициента поглощения. Для упорядоченных неорганических полупроводников коэффициент поглощения пропорционален энергии фотона в степени 0.5 (рисунок 2).

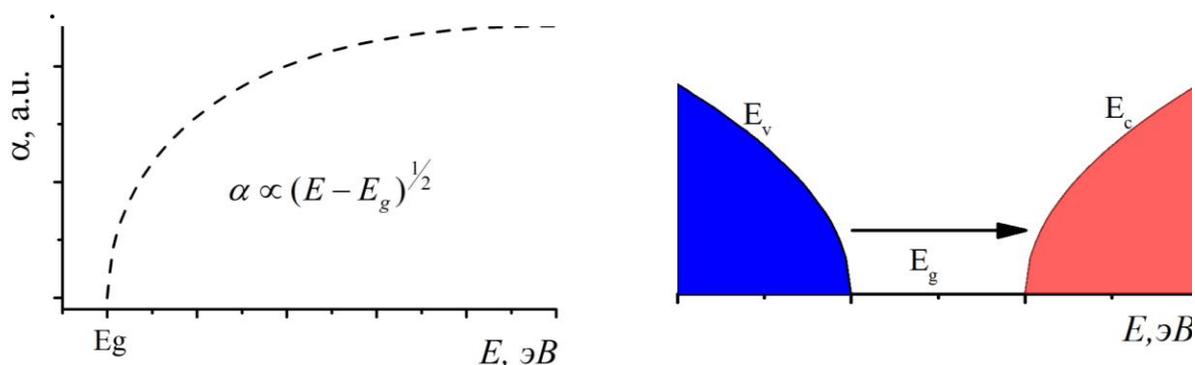


Рис.2 Энергетическая диаграмма зонной структуры неорганического полупроводника и его модельный спектр электронного поглощения.

Информацию о ширине запрещенной зоны степени беспорядка в органическом полупроводнике можно получить из спектров электронного поглощения. В органических полупроводниках при регистрации спектров электронного поглощения реализуются оптические переходы с участием как делокализованных так и локализованных электронных состояний (рисунок 3). В результате в низкоэнергетической части спектра электронного поглощения наблюдается плавное изменение коэффициента поглощения (рисунок 3).

Спектр электронного поглощения органического полупроводника можно условно разделить на три области. Область 1 формируется за счет НОМО-ЛУМО переходов, что аналогично межзонным переходам в неорганических полупроводниках.

Спектральная зависимость коэффициента поглощения в этой области имеет следующий вид [7]:

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

При этом пересечение линии экстраполяции линейного участка графика зависимости  $(\alpha * h\nu)^{1/2}$  от  $h\nu$  осью абсцисс дает информацию об оптической ширине запрещенной зоны ( $E_g$ - запрещенная зона по Тауцу [7]).

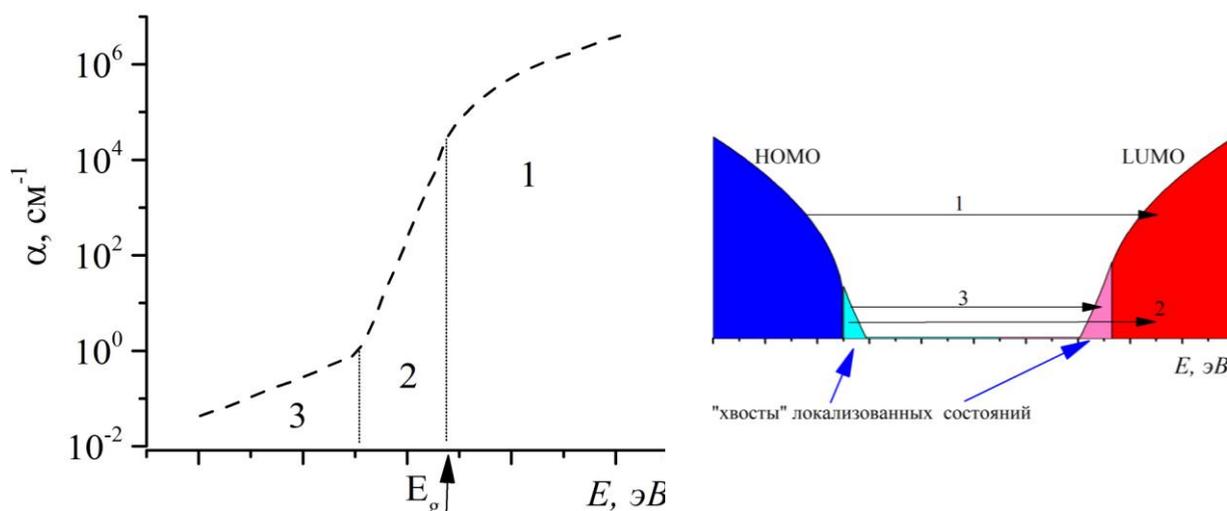


Рис.3 Энергетическая диаграмма зонной структуры органического полупроводника и его модельный спектр электронного поглощения. 1- область поглощения по Таунсу; 2- область поглощения Урбаха; 3- область поглощения за счет переходов между локализованными состояниями.

Область 2 формируется за счет электронных переходов из локализованных в делокализованные (зонные) состояния. В этой области 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 [7].

Область 3 формируется за счет электронных переходов из локализованных заполненных в локализованные незаполненные состояния. Вероятность таких переходов низка ввиду их пространственного разделения. Данная область спектра лежит в ближнем ИК диапазоне.

Информацию о структуре локализованных в запрещенной зоне электронных состояний органического полупроводника можно получить методом постоянного фототока (МПФ) [8].

В методе постоянного фототока регистрируется спектральная зависимость фотопроводимости полупроводника в низкоэнергетической области спектра. При этом интенсивность светового потока модулируется таким образом, чтобы величина фототока оставалась неизменной. В результате измеряемая спектральная зависимость формируется за счет переходов из локализованных в запрещенной зоне электронных состояний в делокализованные. При этом измеряемая величина коэффициента поглощения ( $\alpha_{\text{СРМ}}$ ) имеет следующий вид:  $\alpha_{\text{СРМ}}(\hbar\omega) = \text{const} / F(\hbar\omega)$ .

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

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

Подынтегральное 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 обычно аппроксимируется корневой зависимостью  $g(E) \sim (\sqrt{\omega-E})^{0.5}$ . 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  $E^{0.5}$  относительно преобразования Лапласа [9]. Алгоритм численного расчета спектров плотности локализованных состояний  $N(E)$  по данным МПФ ( $\alpha_{CPM}$ ) можно взять из работы [10]:

$$N(E) = \frac{4}{\pi} \sum_{i=1}^Q a_i \exp(-u\hbar\omega_i) \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{[u(E - \hbar\omega_i)]^k}{k!} \right\} (E - \hbar\omega_i)^{0.5} - \frac{4}{\pi} \sum_{i=1}^Q a_i \exp(-u\hbar\omega_{i+1}) \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{[u(E - \hbar\omega_{i+1})]^k}{k!} \right\} (E - \hbar\omega_{i+1})^{0.5},$$

Здесь  $a_i$ -вторая производная спектра МПФ по энергии,  $u$  – параметр регуляризации (при  $u=0$  имеем точное решение исходного уравнения Вольтерра).

На рисунке 4а представлены результаты измерений спектральной зависимости коэффициента поглощения пленки МЕН-PPV/C60 в области края поглощения, выполненные с помощью МПФ [11].

Результаты таких расчетов спектров плотности локализованных состояний  $N(E)$  по данным МПФ [12] приведены на рисунке 4б.

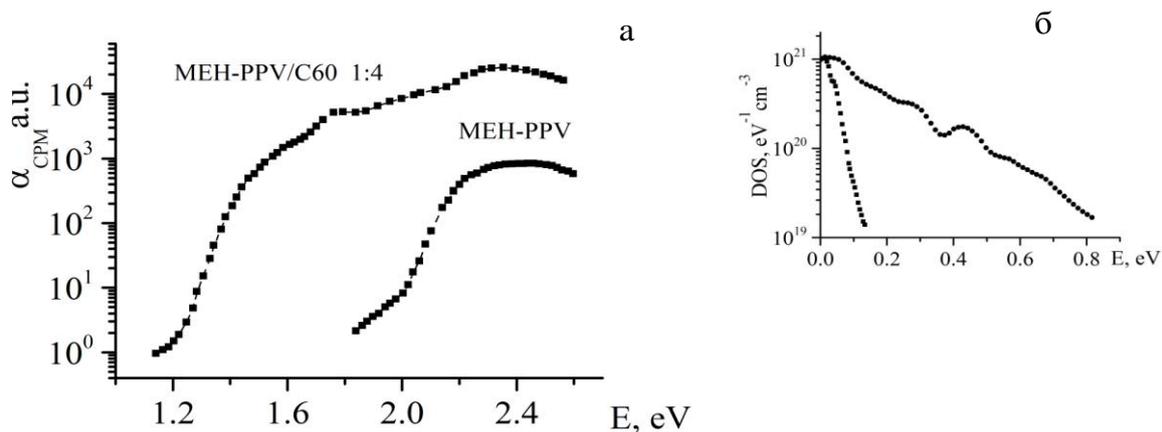


Рис. 4 а - Спектральная зависимость коэффициента поглощения пленки MEH-PPV (MEH-PPV/C60) в области края поглощения, измеренная методом МПФ [11]; б - Результаты расчета структуры электронных состояний, локализованных в запрещенной зоне чистого MEH-PPV – (○) и MEH-PPV/C60 – (●).[12].

В молекулярных кристаллах понятие энергетических зон имеет ограниченную обоснованность, а в процессах зарядового транспорта преобладающую роль играют локализованные на отдельных молекулах возбуждения. Зарядовый транспорт в органических материалах часто является дисперсионным. При этом подвижность носителей заряда в таких системах не является константой, а убывает со временем по степенному закону.

Для органических материалов с низкой степенью беспорядка характерно наличие полос делокализованных состояний с экспоненциальными полосами-хвостами локализованных состояний в запрещенной зоне. Спектральная зависимость коэффициента поглощения органических полупроводников в низкоэнергетической области несет информацию об оптической ширине запрещенной зоны, степени пространственного беспорядка, структуре локализованных состояний. Для изучения специфики органических материалов требуется разработка и применение адекватных экспериментальных методов исследования.

#### Список литературы

1. 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 -1-7
2. S. Baranovski, "Charge Transport in Disordered Solids with Applications in Electronics", (2006) John Wiley & Sons, Ltd, p. 498.
3. J. Mort and D. M. Pai, "Photoconductivity and Related Phenomena" Elsevier, (1976), p.502.
4. S. Stepanov, "Photo-Electromotive-Force Effect in Semiconductors", *Handbook on Advanced Electronics and Photonics Materials*, (2001) \, pp. 205-272.
5. M. Pope, H. P. Kallmann, and P. Magnante.// *J. Chem. Phys.* (1963) Vol. 38, pp. 2042
6. R. A. Street, K. W. Song, and J. E. Northrup. Photoconductivity measurements of the electronic structure of organic solar cells// *PHYSICAL REVIEW* (2011) B 83, 165207-1-12.

7. Tauc J. Optical Properties and Electronic Structure of Ge// Phys. Stat. Sol. 1996. V. 15. P. 627.
8. 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.
9. 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.
10. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования. М., Наука, 1971. 288 с.
11. 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.
12. Алиджанов Э. К., Лантух Ю. Д., Летута С. Н., Пашкевич С. Н., Раздобреев Д. А. Структура локализованных электронных состояний полисопряженного полимера.// Сборник трудов конференции «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры» Оренбург, 2020, с. 2137-2141.

# МНОГОСПИНОВЫЕ ЗАПРЕТЫ И ПРАВИЛА ОТБОРА В ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Арифуллин М. Р., канд. физ.-мат. наук  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Оренбургский государственный университет»

Рассмотрены спинзависимые эффекты в процессах образования супероксид-иона  $O_2^-$  и многоспиновые эффекты восстановления молекулярного кислорода.

Из основного определения запутанных состояний

$$\rho^{AB} \neq \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B$$

Следует, что если система запутана, то она не может быть представлена как простое объединение подсистем. Это означает, что для ее образования необходимо действие “правила отбора”, выделяющие запутанные состояния объединенной системы из исходных незапутанных. Примером таких правил отбора являются “спиновые правила отбора”, управляющие образованием диамагнитных молекул (частиц в синглетных запутанных спиновых состояниях) из свободных радикалов (частиц с некоррелированными электронными спинами), аннигиляция триплетных экситонов в молекулярных кристаллах и другие спинзависимые процессы.

Примером использования многоспиновых матриц плотности является анализ образования супероксида аниона  $O_2^-$ . Ранее спиновые эффекты в этой реакции описаны в работе П. Хора с сотрудниками [1]. Этот радикал является активной формой кислорода, образующейся при присоединении одного неспаренного электрона к триплетной молекуле кислорода.



Высокая химическая активность  $O_2^-$  делает его опасным для любых биомолекул. Поэтому важно знать вероятность образования супероксида аниона из триплетного кислорода и влияние спиновых эффектов на его образование.

Как правило, в элементарных актах химических реакций спин электронов не успевает изменяться. Следовательно, суммарный спин исходных реагентов должен быть равен суммарному спину конечных продуктов. Поэтому анализ реакции требует учета спинов всех электронов. Начальное спиновое состояние кислорода – триплетное (полный спин  $S = 1$ ), а спиновое состояние электрона – дублетное ( $S = 1/2$ ). Так как супероксид есть спиновая система, состоящая из 3 неразличимых электронов, то её следует изучать методами спиновой матрицы плотности. Начальное состояние системы  $O_2 + e^-$  описывается прямым произведением спиновых матриц плотности триплетного кислорода

$$\rho_T = \frac{1}{3} (|T_{12}^+\rangle\langle T_{12}^+| + |T_{12}^0\rangle\langle T_{12}^0| + |T_{12}^-\rangle\langle T_{12}^-|) \quad \text{и} \quad \text{неполяризованного} \quad \text{электрона}$$

$$\rho_e = \frac{1}{2} (|\alpha_3\rangle\langle\alpha_3| + |\beta_3\rangle\langle\beta_3|),$$

$$\rho_0 = \rho_e \otimes \rho_T = \frac{1}{3} (|T_{12}^+\rangle\langle T_{12}^+| + |T_{12}^0\rangle\langle T_{12}^0| + |T_{12}^-\rangle\langle T_{12}^-|) \otimes \frac{1}{2} (|\alpha_3\rangle\langle\alpha_3| + |\beta_3\rangle\langle\beta_3|) \quad (2)$$

В конечном продукте реакции  $O_2^-$  нужно учитывать строгую корреляцию всех трех спинов. Состояние трех спинов  $S = 1/2$ , согласно правилам сложений моментов, может быть либо квинтетным, либо дублетным, причем для 3-х спиновой системы допустимы два дублетных состояния. Однако супероксид  $O_2^-$  – система 3-х неразличимых электронов – является дублетной частицей, которая описывается матрицей плотности

$$\rho_{123} = \frac{1}{6} (|S_{12}\rangle\langle S_{12}| \otimes I_3 + |S_{13}\rangle\langle S_{13}| \otimes I_2 + |S_{23}\rangle\langle S_{23}| \otimes I_1) \quad (3)$$

где  $I_j = |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j| + |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$ .

Поэтому спиновая вероятность  $W(O_2^-)$  образования  $O_2^-$  из некоррелированных частиц описывается проекцией матрицы плотности (3) на пространство допустимых состояний  $O_2^-$  с помощью оператора проектирования  $P_{1/2}$ . Из формулы (3) следует, что матрица плотности спиновой системы может быть представлена как нормированная сумма ортогональных проекторов на подпространство  $Q$  допустимых спиновых состояний. С точностью до множителя эта матрица пропорциональна оператору проектирования  $P_q$  на требуемое подпространство. Это позволяет без дополнительных вычислений представить оператор проектирования как  $P_q = N\rho_Q$ , где  $N$  – размерность подпространства. Для трехспиновой системы

$$P_{1/2} = 4\rho_{123} \quad (4)$$

Следовательно

$$W = Tr(P_{1/2}\rho_0 P_{1/2}) = N^2 Tr[\rho_{123} \rho_0] \quad (5)$$

В результате получаем, что  $W(O_2^-) = 1/2$ .

Следовательно, только половина встреч  $e^- + O_2$  приводят к образованию супероксид аниона  $O_2^-$ . Здесь в первом приближении не рассмотрена динамика процесса, спиновая эволюция и процессы спиновой релаксации.

Аналогичный подход применим к анализу других многоэлектронных процессов [2], например, для анализа восстановления  $O_2$  цитохромом-с-оксидазой, где требуется перенос 4-х электронов и, следовательно, 4 электронных спинов на парамагнитный триплетный кислород с образованием двух диамагнитных молекул, суммарный спин которых равен нулю.

Электронную схему реакции восстановления молекулярного кислорода можно представить следующим образом

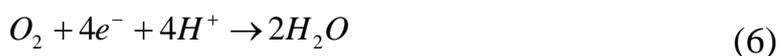
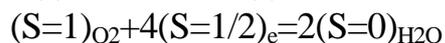


Схема спиновых состояний должна выглядеть так



Все электроны, участвующие в реакции независимы и имеют некоррелированные электронные спины. Поэтому суммарные спиновые состояния этих спинов могут быть квинтетными, триплетными и синглетными. Анализ спиновых запретов и запутанностей электронных спинов в исходных частицах и конечных продуктах показал, что спиновая вероятность этого многоэлектронного процесса  $W = 1/16$ . Этот результат означает, что лишь одна из 16 попыток образовать молекулы воды оказывается успешной. Возможно, что Природа нашла способы обойти ограничения, налагаемые законом сохранения суммарного спина в элементарных актах физико-химических процессов и требованием образования запутанных состояний, чтобы повысить эффективность работы сложной системы – фермента цитохром-с-оксидазы. Эти два примера показали значение многоспиновых корреляций и запутанностей спиновых систем для анализа важных физико-химических процессов.

**Выводы:** С точностью до постоянного множителя спиновые матрицы плотности многоэлектронных систем могут описывать правила проектирования на допустимые спиновые состояния четырех- и трехэлектронных систем. Эти правила проектирования выражают собой формулировки многоспиновых правила отбора и спиновых запретов, действующих в реакциях с участием нескольких электронов.

#### Список литературы

1. *Edge. R.* Magnetic field effect on singlet oxygen production in a biochemical system / *R. Edge, K. Henbest et al.* // *Chem. Comm.* – 2005. – P.174
2. *Арифуллин, М.Р.* Спиновые состояния мультиэлектронных систем и действие мультиспиновых запретов / *М. Р. Арифуллин, В. Л. Бердинский* // *Журнал физической химии.* – 2013. – 87. - №7. – С. 1208-1212

# **ВОЗМОЖНОСТИ И ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННОЙ ТОМОГРАФИИ В ДИАГНОСТИКЕ И МОНИТОРИНГЕ ЗАБОЛЕВАНИЙ**

**Бакаев А.А.**

**Стрекаловская А.Д., канд.биол.наук, доцент**

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

Позитронно-эмиссионная томография на сегодняшний день представляется наиболее высокоточным радионуклидным методом исследования внутренних органов человека и одним из самых информативных способов ранней диагностики онкологических, неврологических и кардиологических заболеваний. Оренбургская область находится на 6 месте по онкологическим заболеваниям в Приволжском Федеральном округе и на 21-м месте - по России. По данным Ассоциации организаторов здравоохранения в онкологии, в первом полугодии 2019 года показатель смертности от онкологических заболеваний в России составил 204,5 человека на 100 тысяч населения. Тот факт, что уровень смертности от онкологических заболеваний в первом полугодии 2020 года снизился на 3,9% говорит о том, что утвержденный в 2019 году проект Министерства здравоохранения «Борьба с онкологическими заболеваниями» успешно заработал, но все еще остается необходимость решения многих проблем, в первую очередь, посредством обновления и расширения парка медицинского оборудования в региональных учреждениях здравоохранения.

Метод позитронно-эмиссионной томографии известен как двухфотонная эмиссионная томография, поскольку он основан на регистрации пары гамма-квантов, создаваемых при аннигиляции позитронов с электронами [3]. В свою очередь позитроны создаются в ходе бета-распада особого радионуклида, предварительно вводимого в организм пациента.

Позитронно-эмиссионный томограф позволяет отслеживать распределение в организме биологически активных соединений с помощью радиофармпрепаратов, которые, в свою очередь, делают возможным изучение множества процессов: метаболизма, экспрессии генов, транспорта веществ и многих других.

Для проведения процедуры используется современное оборудование, увеличивающее его продуктивность. К достоинствам методики относится [4]:

- 1) повышенная исследовательская точность;
- 2) возможность замены нескольких разных диагностик;
- 3) неинвазивность;
- 4) отсутствие болевых ощущений;
- 5) возможность обследования несколько органов и систем за одну процедуру;
- 6) отсутствие вредоносных факторов.

Главной задачей диагностического метода является получение изображения в цвете, благодаря чему возможно четко увидеть любое изменение.

Выделяют несколько разновидностей таких препаратов, подробно представленных на рисунке 1.

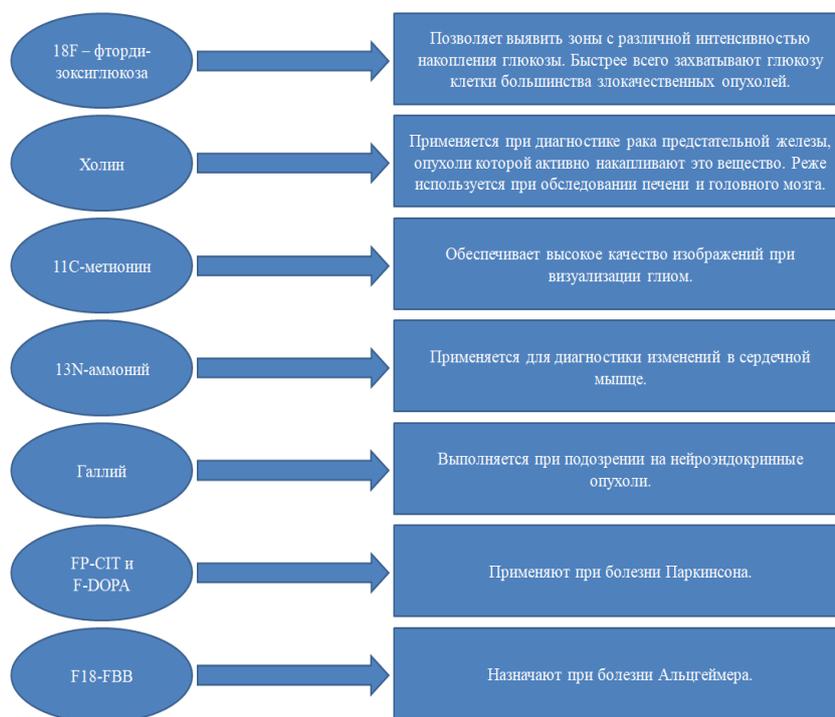


Рисунок 1 – Виды радиофармпрепаратов, их воздействие и применение.

Позитронно-эмиссионную томографию, главной областью применения которой является диагностика злокачественных образований, по праву называют самым передовым и перспективным методом исследования в онкологии, поскольку имеет ряд преимуществ по сравнению с другими методами:

- 1) возможность обнаружения нарушений функций органа или ткани на самой ранней стадии до появления структурных изменений;
- 2) определение наличия и локализации метастаз;
- 3) при необходимости также имеется возможность дифференцировать рецидив или прогрессирование опухоли с некрозом, который развился вследствие облучения;
- 4) оценка результата химиотерапии в начале курса лечения.

Неврология является ещё одним направлением использования позитронно-эмиссионной томографии.

По результатам обследования неврологи могут оценить состояние питающих мозг артерий и их роль в нарушении мозгового кровообращения, установить причину деменции, диагностировать болезнь Альцгеймера, а также дегенеративные заболевания центральной нервной системы [3].

Реже позитронно-эмиссионная томография применяется в кардиологии. При подобных исследованиях диагностируют временное приспособительное снижение объема работы сердечной мышцы, точно определяют зоны ишемии миокарда и выявляют участки постинфарктного кардиосклероза.

По словам заведующего отделением радиоизотопной диагностики Национального медицинского исследовательского центра им. ак. Мешалкина кандидата медицинских наук Станислава Михайловича Минина: «Ядерная медицина — одна из самых быстрорастущих областей. В 2018 году рынок потребления радионуклидных услуг приблизился к 25 млрд. долларов.

Эксперты ожидают, что к 2030 году это потребление увеличится в 3—5 раз. Основными пользователями таких услуг сегодня являются США, Япония, страны Европы, на которые приходится 80—90 %.

Россия значительно им уступает, хотя здесь есть и высококвалифицированные кадры, и научно-исследовательские институты, и хорошо развитая инфраструктура ядерных технологий».

По прогнозам аналитиков Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», мировой объем рынка ядерной медицины в 2020 году будет составлять \$24 млрд., а в 2030 году – уже \$43 млрд. Российский рынок при этом вырастет до \$1,2 млрд. в конце 2020-го и достигнет \$3,5–4 млрд. в 2030 году. В развитии ядерной медицины заинтересовано как правительство страны, так и отдельные компании [5].

Несмотря на то, что Россия входит в число пяти крупнейших производителей сырьевых медицинских изотопов в мире, а также на грандиозные планы по развитию данной отрасли, существует ряд весомых проблем, в том числе и связанных с аппаратной мощностью.

По нормативам Всемирной Организации Здравоохранения, на 1 миллион населения должен приходиться один позитронно-эмиссионный томограф, то есть 140 аппаратов на страну [1]. В 2013 году насчитывалось 23 аппарата по стране, в 2016- всего на 4 больше.

На сегодняшний день действующих медицинских центров в России насчитывается порядка 29, из которых 8 находятся в Москве, а 6 - в Санкт-Петербурге.

Стоит отметить и тот факт, что совокупные операционные показатели отрасли не дотягивают даже до целевых ориентиров Министерства здравоохранения: в 2016 году по программе «Развитие здравоохранения» в стране планировалось провести 316,5 тысячи радионуклидных исследований, но удалось выполнить лишь 266,9 тысячи.

Пролечить собирались 64 тысячи пациентов, а получилось вдвое меньше – 27,7 тысячи. При этом к концу 2020 года эти индикаторы, по планам ведомства, должны дойти до отметок в 320,5 тысячи исследований и 68 тысяч случаев лечения соответственно.

Как известно, исследование на позитронно-эмиссионном томографе является достаточно дорогостоящим процессом, во многом за счет работы на импортном оборудовании, сервисе, который составляет ежегодно около 15 % от основной стоимости оборудования, а также дорогих расходных материалов [2]. Таким образом, первоочередной задачей является решение проблемы импортозамещения оборудования ядерной медицины за счет собственных разработок, что позволит сделать исследования более доступными.

На сегодняшний день, благодаря внедрению программы Минпромторга до 2022 года, началось финансирование новых разработок, включая некоторое медицинское оборудование. В настоящее время ряд организаций ведет научные разработки по генераторам, радиофармпрепаратам, а также томографам. Не стоит забывать и про потребность подготовки соответствующих кадров: радиохимиков, медицинских физиков, специалистов по контролю качества, радиологов и инженеров медицинского оборудования.

#### Список литературы

1. Голикова, Т.А. // Проект доклада министра здравоохранения и социального развития РФ по развитию ядерной медицины на заседании Комиссии по модернизации и технологическому развитию при Президенте РФ – 2016 г.
2. Костылев, В.А., Рыжикова, О.А., Сергиенко, В.Б. // Статус и перспектива развития методов позитронно-эмиссионной томографии в России - Ассоциация медицинских физиков России, Москва 2 Российский кардиологический научно-производственный комплекс МЗ РФ, Москва, 2015. – 5-16 с.
3. Мокин, Е.Д. // Этапы развития, области современного применения, аспекты безопасности позитронной эмиссионной томографии // Молодежный научный форум: Естественные и медицинские науки: электр. сб. ст. по мат. XVIII междунар. студ. науч-практ. конф. № 11(17) - 2014. – 42-52 с.
4. Наркевич, Б.Я., Костылев, В.А. // Медико-физические основы радионуклидной терапии. и др. Учебное пособие. – М., 2006. – 59 с.
5. VII Международный Форум «Инновации в медицине: современные этапы становления и развития» - мероприятие-спутник Форума технологического развития «Технопром-2019». «О ходе реализации федерального проекта «Борьба с онкологическими заболеваниями» национального проекта «Здравоохранение» в субъектах Российской Федерации – членах масс»

# ВЛИЯНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРМИ НА ФОРМИРОВАНИЕ НЕКОЛЛИНЕАРНОГО МАГНЕТИЗМА

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

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

Помимо основных и хорошо известных магнетиков, таких как ферро-, антиферро- и ферримагнетики, существует большой класс магнетиков с неколлинеарной магнитной структурой, в которых углы между магнитными моментами отдельных ионов отличны от 0 или  $180^\circ$ . В некоторых магнетиках, таких как  $\alpha$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CoCO}_3$  или  $\text{NiCO}_3$ , такая неколлинеарность превращает антиферромагнетики в «слабые» ферромагнетики. В других – приводит к образованию длинно-периодических структур, период которых может быть несоизмерим с периодом кристаллических решеток.

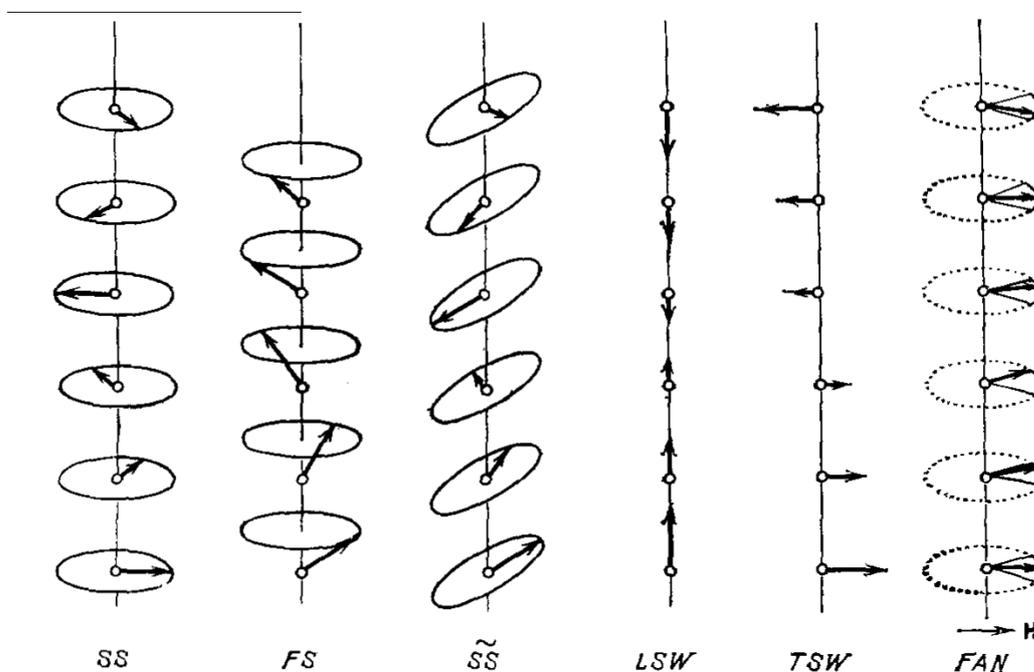


Рисунок – 1 Примеры неколлинеарных и коллинеарных спин-волновых магнитных структур

Такое же многообразие «нестандартных» магнитных структур проявляют новые перспективные магнитные материалы – молекулярные магнетики, в которых носителями магнитных моментов являются органические свободные радикалы или металлоорганические магнетики, в которых магнитные ионы связаны органическими лигандами.

Неколлинеарность элементарных магнитных моментов является причиной образования нетривиальных магнитных структур – двумерных или трехмерных магнитных скирмионов с необычными топологическими свойствами. Спиральные магнитные структуры, как правило, характеризуются спирально-

стью (*chirality*), реализация которой, требует особой пространственной структуры кристалла.

Как правило, существование неколлинеарных магнитных структур приписывают совместному действию антиферромагнитного взаимодействия и дополнительному асимметричному обменному взаимодействию, которое называют взаимодействием Дзялошинского-Мория (DM). Спиновый гамильтониан

$\hat{H}_{DM}$  взаимодействия DM представляют в виде

$$\hat{H}_{DM} = \vec{D}_{ij} \cdot \vec{S}_i \times \vec{S}_j,$$

где  $\vec{D}_{ij}$  - вектор Дзялошинского, который определяется симметрией кристалла и спин-орбитальными взаимодействиями,  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$  - операторы спиновых векторов взаимодействующих ионов.

Интерес к неколлинеарным магнитным структурам в молекулярных магнетиках, обусловленный их возможными применениями, заставляет поставить вопрос: какие иные физические взаимодействия способны индуцировать такие структуры?

Квантовомеханический анализ причин неколлинеарного магнетизма показывает, что для его реализации необходимо, чтобы оператор  $\hat{H}_{ad}$  «дополнительного» взаимодействия не коммутировал с оператором  $\hat{H}_{ex}$  обменного антиферромагнитного взаимодействия

$$\hat{H}_{ex} = J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

В таком случае совместное действие этих двух операторов будет приводить к смешиванию синглетных  $|S\rangle$  и триплетных  $|T_{0\pm}\rangle$  волновых функций основного состояния  $|\Psi\rangle$ , которое должно теперь быть суперпозицией

$$|\Psi\rangle = c_S |S\rangle + c_T |T\rangle$$

Косинус угла  $\varphi$  между средними значениями спиновых векторов  $\vec{S}_i$  и  $\vec{S}_j$  определяется как корреляционная функция их спиновых операторов и является обобщением скалярного произведения обычных векторов. Именно смешивание триплетных и синглетных волновых функций приводит к тому, что этот угол отличается от  $180^\circ$  и  $\varphi < 180^\circ$

$$\cos \varphi = \frac{\langle \Psi | \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j | \Psi \rangle}{|\vec{S}_i| |\vec{S}_j|} = -|c_S|^2 + (1/3)|c_T|^2 > -1$$

В работе показано, что сверхтонкое контактное взаимодействие (СТВ) неспаренных электронов парамагнитных ионов с магнитными ядрами в лигандах молекулярных магнетиков описывается спиновым гамильтонианом  $\hat{H}_{hfi}$ , состоящим из двух слагаемых,

$$\hat{H}_{hfi} = \hat{H}'_{hfi} + \hat{H}''_{hfi}.$$

Первый член  $\widehat{H}'_{lfi}$  коммутирует с гамильтонианом обменного взаимодействия  $\widehat{H}_{ex}$ , а другой не коммутирует и имеет вид

$$\widehat{H}''_{lfi} = (\Delta a)(\widehat{S}_1 - \widehat{S}_2)\widehat{I},$$

где  $(\Delta a)$  - разность констант СТВ спина атомного ядра лиганда и неспаренных электронов двух парамагнитных ионов,  $\widehat{I}$  - оператор ядерного спина лиганда. Поскольку, оператор не коммутирует с гамильтонианом обменного взаимодействия, то он неизбежно «смешивает» синглетные и триплетные волновые функции основного состояния и действует аналогично взаимодействию Дзялошинского-Мория.

Таким образом, доказано, что сверхтонкие взаимодействия в молекулярных магнетиках способны приводить к образования неколлинеарных, спиральных и хиральных магнитных структур.

#### Список литературы

1. Dzyaloshinskii, I. A. thermodynamic theory of "weak" ferromagnetism of antiferromagnetics // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1958, V.4N. 4. P.: 241-247.
2. Moriya T. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism / Physical Review. 1960, V.120. N. 1: p. 91-98.
3. Keffer F. Moriya Interaction and the Problem of the Spin Arrangements in  $\beta\text{MnS}$  / Physical Review. 1962, V, 126, N.3: p. 896-903.
4. Изюмов, Ю.А. Модулированные длиннопериодические магнитные структуры кристаллов / УФН, 1984, Т. 144, № 3, с.439-475.

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРЫ ПЛОТНОЙ КЕРАМИКИ С УЧЕТОМ МАСШТАБНОГО ФАКТОРА И СКОРОСТИ НАГРЕВА

Гуеньков В.В., канд.физ.-мат.наук,  
Анисина И.Н., канд.тех.наук

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

В Оренбургской области почти повсеместно распространены полиминеральные легкоплавкие глины, являющиеся основным сырьем для производства современных материалов [1, 2]. Научная и практическая новизна работы обусловлена расширением сырьевой базы для производства технической (плотной) керамики.

Цель работы заключалась в разработке условий получения толстостенных керамических изделий с однородной структурой.

Для достижения указанной цели была поставлена задача смоделировать процесс обжига изделий простой геометрической формы из керамической массы с заданными технологическими характеристиками, обеспечивавший минимальные температурные градиенты между поверхностью и внутренними слоями образцов.

В качестве объектов исследования выбраны две типичные природные глины Оренбуржья, содержащие каолинит ( $K$ ) и монтмориллонит ( $M$ ). Обе глины включали больше 25 % по массе свободного кремнезема; в  $K$  глину входило около 10 % каолинита, в  $M$  глину – около 30% монтмориллонита. Содержание красящих оксидов  $Fe_2O_3$  в  $M$  глине оказалось почти в 2 раза больше, чем в кирпичной  $K$  глине; частиц корунда – в 1,7 раза больше, чем в  $K$ -глине, однако оксида кальция в  $M$ -глине на порядок меньше. По количественному содержанию оксида алюминия, согласно [3], обе глины относились к полукислым. Вхождение водорастворимых оксидов  $K_2O$  и  $Na_2O$  в обеих глинах практически одинаково.

Ранее было установлено [4], что технологические свойства обеих глин, включая способность к формовке и интервал спекания неудовлетворительны.  $K$ -глина имела низкую пластичность и формовочные свойства; активно спекалась при температурах, превышающих 1100 °С, что требует использования высокотемпературных печей. Процессы спекания ослабляются высоким содержанием порообразующего компонента  $CaO$ . Легкоплавкой красножгущейся  $M$ -глине свойственна пластичность и хорошая формуемость, однако интервал спекания глины вырожден в точку (950 °С) из-за высокого содержания железа. Это проявилось в эвтектическом характере плавления составляющих глину компонентов и исключало возможность управления процессами структурообразования. В связи с этим состав керамической массы был оптимизирован путем подбора состава смеси природных  $K$  и  $M$  глин. По экспериментальным результатам значений технологических параметров (пластичности, формуемости) и физиче-

ских свойств (кажущаяся плотность) был выбран оптимальный состав смеси, состоящей из 60% монтмориллонит содержащей и 40% (мас.) каолинит содержащей глин [5]. Сухую смесь затворяли водой кислотностью  $pH$  7 в количестве 20% (масс.) и выдерживали сутки при комнатной температуре. Образцы получали методом полусухого прессования под давлением 50 МПа в форме дисков диаметром от 10 мм до 100 мм и высотой 20 мм, сушили 48-часов при комнатной температуре и 2 часа при 160 °С, в муфельной печи. Обжиг образцов производился в электропечи типа ПЛ 5/12.5 со скоростями нагрева, °С/мин: 5 (медленный) и 25 (быстрый) [6, 7].

Влияние скорости нагрева на однородность структуры оценивали по величине температурного градиента, образующегося между поверхностью и центром образца [8]. Температуру в этих точках - координатах рассчитывали с учетом зависимости теплопроводности керамической массы от температуры. Метод расчета отличался простотой реализации и позволял учитывать фазовые превращения в исследуемой среде. Температуру на поверхности образца принимали равной температуре в печи.

Для моделирования тепловых полей использовали решение нестационарного уравнения теплопроводности в цилиндрических координатах. Образец задавался областью пространства  $D_3$  [9].

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

Температуру в каждой точке образца в данный момент времени описывали функцией, зависящей от четырех переменных  $u(r, \varphi, z, t)$ . Эта функция удовлетворяла классическому уравнению теплопроводности [10]

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

с начальными и граничными условиями:  $u(r, \varphi, z, 0) = T_0$  для  $\forall r, \varphi, z \in D_3$ ,

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

где  $T_0$  – начальная температура,  $T_1$  – температура обжига, равная температуре печи,  $\alpha$  – коэффициент теплопроводности.

Используя соображения симметрии, существенно упростили задачу, сократив объем вычислений. Во-первых, учли осевую симметрию образца и привели уравнение (1) привести к виду, не зависящему от угла  $\varphi$ . В результате искомая функция стала зависеть только от трёх переменных:  $u(r, z, t)$ . Во-вторых, воспользовавшись симметрией относительно плоскости  $z = 0$ , рассматривали только область  $z > 0$ . Таким образом, уравнение теплопроводности (1) приняло

вид:

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

В двумерной области  $r \in [0, R]$ ,  $z \in [0, \frac{h}{2}]$ , начальные и граничные условия приобрели вид:

$$\begin{aligned}
 u(r, z, 0) &= T_0 \text{ для } \forall r, z \in D_2, \\
 u(r, z, t) &= u\left(r, \frac{h}{2}, t\right) = T_1, \\
 \frac{\partial u(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0} &= 0, \quad \frac{\partial u(r, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0.
 \end{aligned}$$

Зависимость коэффициента температуропроводности от температуры задавали функцией, полученной на основе экспериментальных данных:

$$\alpha(T) = \begin{cases} \alpha_b, & \text{при } T < 600 \\ \alpha_d(T) \times \left(\frac{700-T}{100}\right) + \alpha_b(T) \times \left(\frac{T-600}{100}\right), & \text{при } 600 \leq T < 700. \\ \alpha_d, & \text{при } T \geq 700 \end{cases}$$

Задачу решали методом сеток, применяя явную схему уравнения теплопроводности и схему Кранка-Николсона [11].

Результаты расчетов обжигов образцов с различными скоростями нагрева графически представлены на рисунках 1 и 2.

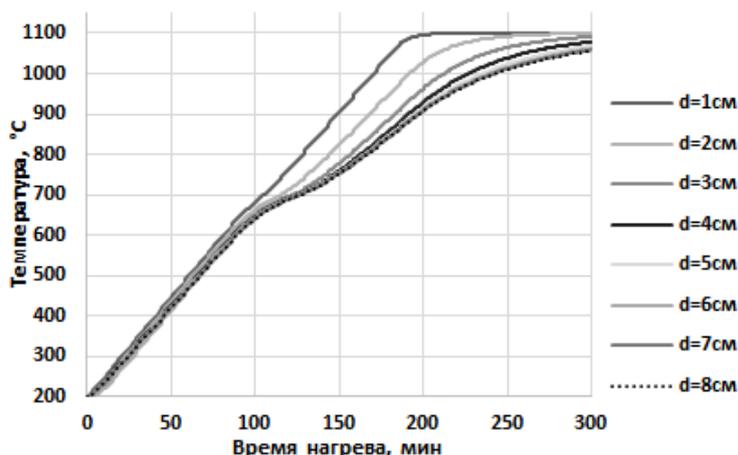


Рисунок 1 – Временная зависимость температуры в центре образцов различных диаметров при скорости нагрева 5 °C/мин

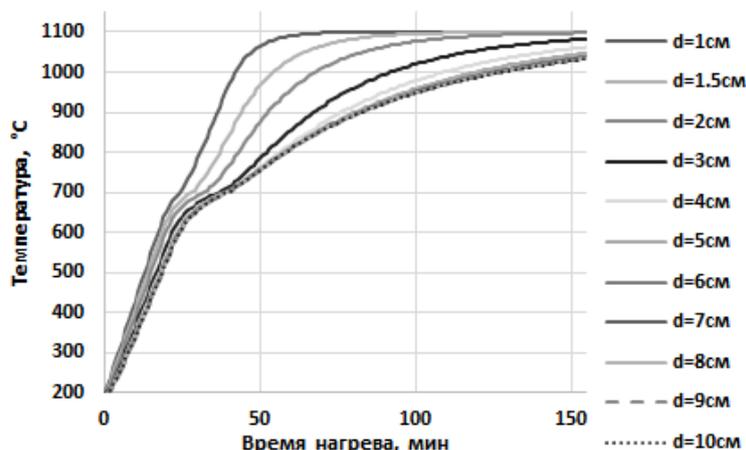


Рисунок 2 – Временная зависимость температуры в центре образцов различных диаметров при скорости нагрева 25 °С/мин

Влияние масштабного фактора на распределение температуры внутри объема образца заметно при значениях диаметра от 1 до 4 см.

Предложенная схема расчетов обжигов позволила установить высокие значения температурных градиентов «поверхность-центр» образцов диаметром более 4 см при обеих скоростях нагрева (рисунок 3,4).

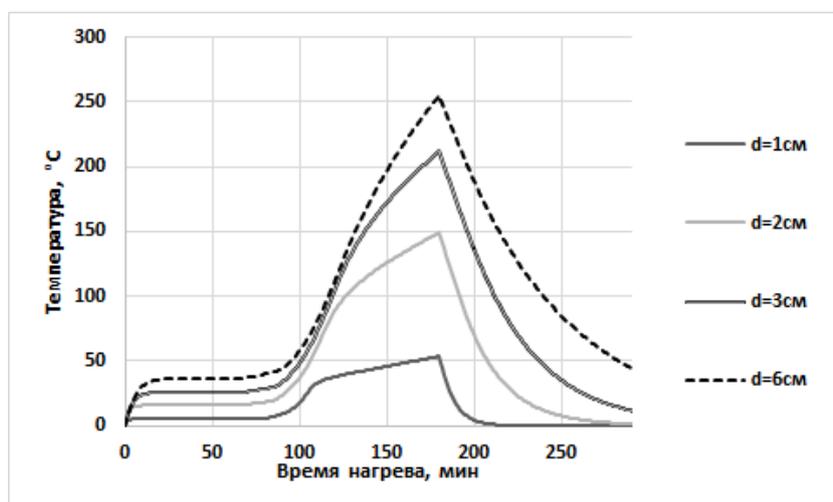


Рисунок 3 - Разность температур на поверхности и в центральной части образцов при скорости нагрева 5 °С/мин

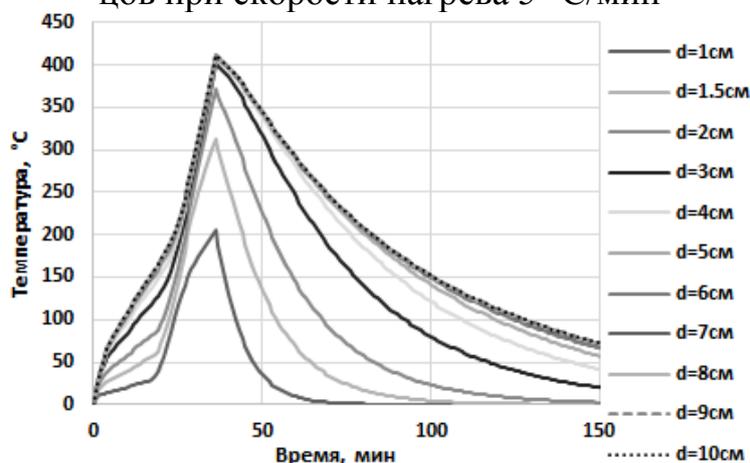


Рисунок 4 - Разность температур на поверхности и в центральной части образцов при скорости нагрева 25 °С/мин

Наибольшая разница температур при медленном нагреве наблюдалась в первые 2 часа. Максимальный температурный градиент не превышал 8 °С/мм. Увеличение скорости нагрева в 5 раз привело к критическому росту перепада температур до 400 °С (рисунок 4). Следовательно, в объеме образцов должны были сформироваться однородные структуры либо при малой скорости нагрева (5 °С/мин) и диаметре образца меньше 3 см, либо при высокой скорости нагрева и диаметре образца меньше 1,5 см. Этот факт представляет несомненный интерес, поскольку может обеспечить возможность образования, по крайней мере, двух видов однородных структур и, следовательно, расширить спектр функциональных параметров керамических материалов.

## Список литературы

1. Солодкий Н.Ф. Минерально-сырьевая база Урала для керамической, огнеупорной и стекольной промышленности / Н.Ф. Солодкий, А.С. Шамриков, В.М. Погребенков. Справочное пособие под ред. Г.Н. Масленниковой. Томск, 2009. 331 с.
2. Горбачев, Б.Ф. Каолины Орского Зауралья – сырьевая база для формирования в Приволжском федеральном округе специализированного горно-промышленного комплекса / Б.Ф. Горбачев, Г.П. Васянов, Е.В. Краскикова // Георесурсы. – 2015. – Т.1. – № 4(63). – С. 25-32.
3. ГОСТ 9169-75. Межгосударственный стандарт. Сырье глинистое для керамической промышленности. Классификация. - Взамен ГОСТ 9169-59; введ. 1976-07-01.
4. Кушнарёва О.П. Спекание керамики из природных глин Оренбуржья / Анисина И.Н., Каньгина О.Н. // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. материалы Всероссийской научно-методической конференции. Министерство образования и науки РФ, ФГБОУ ВО "Оренбургский государственный университет". 2018. С. 2551-2556.
5. Градационные обжиги как способ гомогенизации структуры плотной керамики / Четверикова А.Г., Каньгина О.Н., Гуньков В.В., Анисина И.Н. // Материаловедение, 2021. – №1. – С.42-48.
6. Gunkov V.V. Calculation of temperature fields in the sintered silicon ceramics. В сборнике: Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials. Russian-Japanese Conference : proceedings. 2018. С. 57-59.
7. Четверикова, А.Г. Влияние тепловых параметров на формирование градиентных структур кремнеземистой керамики : автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.14 / Четверикова Анна Геннадьевна. – Бишкек, 2000. – 25 с.
8. Влияние скорости нагрева на физико-механические свойства кремнеземистой керамики / О.Н. Каньгина, А.Г. Четверикова, А.А. Скрипников, В.М. Лелевкин // Стекло и керамика. 1999. № 6. С. 17-20.
9. Elucidating Thermally Induced Structural and Chemical Transformations in Kaolinite Using Reactive Molecular Dynamics Simulations and X-ray Scattering Measurements(Article) / Muraleedharan M.G., Asgar H., Mohammed S., Gadikota G., Van Duin A.C.T. // Chemistry of Materials, Volume 32, Issue 2, 28 January 2020, Pages 651-662. DOI: 10.1021/acs.chemmater.9b03929
10. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М.: Наука, 2004. – 798 с.
11. Crank, J. and Nicolson, P. (1947). "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat conduction type". Proc. Camb. Phil. Soc. 43 (1):50–67. doi:10.1007/BF02127704 (<https://doi.org/10.1007%2FBF02127704>).

## ФОТОИНАКТИВАЦИЯ БАКТЕРИЙ *SALMONELLA* В РАСТВОРАХ ОРГАНИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ

Легута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,

Дорофеев Д.В.,

Емельянова А.А.,

Цюрко Д.Е.

Федеральное государственное образовательное учреждение  
высшего образования «Оренбургский государственный университет»

Обсуждаются механизмы инактивации бактерий при их облучении наносекундными импульсами лазерного излучения видимого диапазона в растворах с органическими красителями.

Объектом исследования служил штамм *Salmonella typhimurium* LT2. Бактерии предварительно культивировали в течение 1 сут. на висмут-сульфит агаре при 37°C. Затем клетки суспендировали в 0,9%-ном стерильном растворе NaCl до оптической плотности 0,1 на длине волны 625 нм.

В качестве сенсibilизаторов использовались красители эритрозин и родамин С, кардинально отличающиеся свойствами. Ксантоновый краситель эритрозин анион, обладает высоким (близким к единице) квантовым выходом в триплетное состояние, очень эффективный генератор активных форм кислорода (АФК). Родамин С катион, квантовый выход в триплетное состояние низкий (близок к нулю), не является фотосенсibilизатором (ФС) АФК. Красители растворяли в том же физрастворе, что и бактерии. В большинстве экспериментов концентрация молекул красителей в растворах составляла 0.25 – 0.50 мМ.

Для фотоинактивации бактерий суспензию *S. Typhimurium* смешивали с раствором соответствующего красителя, помещали в кварцевую кювету сечением 5x10 мм<sup>2</sup> и через торцевую стенку возбуждали импульсами лазерного излучения, сфокусированного с помощью цилиндрической линзы на площадку размером 3.5x0.3 мм<sup>2</sup>. Источником возбуждения служил импульсный YAG:Nd лазер LQ-129 (SolarLS, Беларусь). Параметры импульса: длина волны  $\lambda = 532$  нм, длительность импульса 15 нс. Плотность мощности возбуждения была максимальной в фокусе линзы и регулировалась в пределах 0.1 - 50 МВт/см<sup>2</sup>. Часть света за фокусом линзы проникала в раствор. В зависимости от концентрации красителей и интенсивности накачки, возбуждающее излучение проникало вглубь раствора на расстояние не более 5-6 мм.

Инактивирующее действие лазерного излучения оценивали путем подсчета колониеобразующих единиц (КОЕ). Количество жизнеспособных клеток бактерий, облученных в присутствии красителей, определяли после инкубации при 37° С в течение 24 часов с последующим подсчетом КОЕ.

В зоне фокусировки происходил локальный нагрев среды, и возникали ударные волны аксиальной симметрии. Распространение волн по объему кюветы фиксировалось по рассеянию зондирующего луча сечением менее 1 мм от невозмущающего He-Ne лазера. Зондирующий луч пересекал кювету в направ-

лении перпендикулярном возбуждающему лучу на регулируемом расстоянии от фокуса линзы. Детально экспериментальная установка описана в [1-2].

В зависимости от концентрации молекул красителей в растворах и плотности мощности падающего излучения возможно повреждение бактерий по одному из следующих механизмов:

- фотодинамическое повреждение АФК, возникающими в результате тушения триплетных состояний ФС молекулярным кислородом (образуется химически активный синглетный кислород или анион-радикал);

- гипертермия, обусловленная превращением поглощенной световой энергии в тепло молекулами красителей (термосенсибилизаторами), связанными со стенками бактерий или находящимися внутри клеток;

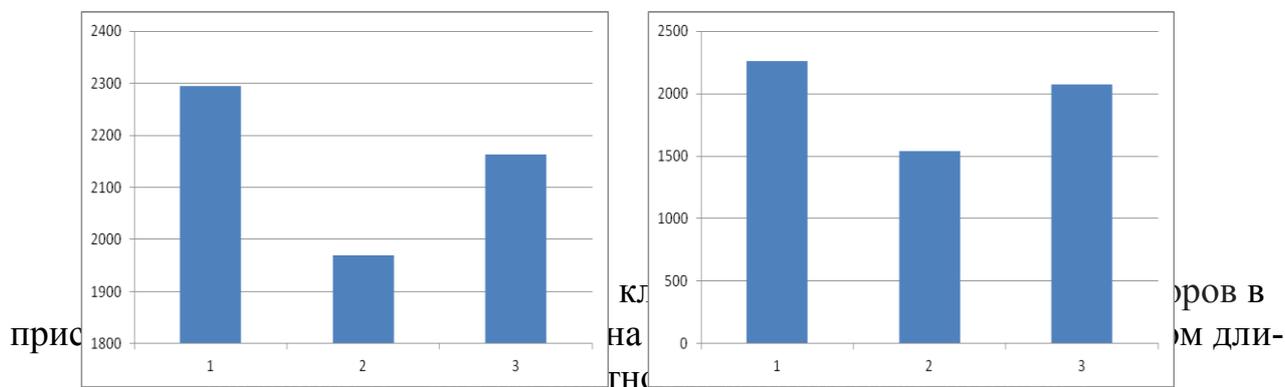
- повреждение стенок бактерий или внутриклеточных элементов ударными волнами, образующимися при быстром локальном нагреве среды (если температура среды превышает порог кипения, то ударные волны генерируются возникающими пузырьками пара);

- повреждение мембран или внутриклеточных органелл при безызлучательном переносе энергии с высоких электронно-возбужденных уровней сенсibilизаторов.

Показано, что АФК, локальная гипертермия и ударные волны очень эффективно инактивируют микроорганизмы. Надежно установить повреждение бактерий за счет безызлучательного переноса энергии нам не удалось.

На рис. 1 показаны гистограммы КОЕ клеток *SalmonellaTyphimurium* до облучения (на рис. 1 обозначены цифрой 1) и после облучения растворов бактерий с сенсibilизаторами светом длины волны 532 нм плотностью мощности 15 МВт/см<sup>2</sup>.

КОЕ бактерий взятых непосредственно из зоны возбуждения (на рис.1 обозначены цифрой 2) как в случае использования эритрозина, так и родамина С, резко уменьшаются по сравнению с необлученным раствором. Цифрой 3 на рис.1 обозначены КОЕ клеток, взятых из того же раствора на расстоянии 1,5 см от зоны возбуждения.



При плотности мощности возбуждающего излучения выше 10 МВт/см<sup>2</sup> в результате ступенчатого поглощения молекулами двух (или более) квантов эффективно заселяются их высоковозбужденные электронные состояния (ВВЭС). Учитывая, что в растворителях с полностью насыщенными связями эффектив-

ность переноса энергии на молекулы окружения крайне мала [3-4], а квантовый выход флуоресценции из ВВЭС не превышает  $10^{-5}$  [5-6], поглощенная красителем энергия в течение нескольких пикосекунд практически полностью трансформируется в тепло. В результате очень быстрого тепловыделения в среде формируются ударные акустические волны, которые инактивируют микроорганизмы не только непосредственно в зоне возбуждения, но и на расстоянии до нескольких сантиметров от нее.

В растворе эритрозина кроме ударных волн непосредственно в зоне возбуждения бактерии дополнительно повреждаются АФК, а в растворах родамина С образуются димеры, безызлучательная релаксация которых дает свой вклад в локальную гипертермию клеток. Поэтому, выживаемость бактерий взятых из зоны возбуждения существенно ниже, чем на расстоянии 15 мм, где клетки повреждаются только ударными волнами

#### Список литературы

1. Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Ишемгулов А.Т., Никиян А.Н. Фототермическая инактивация микроорганизмов при релаксации высоковозбужденных состояний сенсibilизаторов // Биофизика, 2020, том 65, № 4, с. 705–712.
2. Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Ишемгулов А.Т., Никиян А.Н. Инактивация планктонных микроорганизмов ударными акустическими волнами // Журнал физической химии, 2021, том 95, № 4, с. 1–9.
3. Алфимов М.В., Батеха И.Г., Смирнов В.А. Перенос энергии с высоких триплетных уровней // Докл. АН СССР, 1969, т. 185, с. 626-628.
4. Герко В.И., Шекк Ю.Б., Батеха И.Г., Алфимов М.В. Эффективность переноса энергии с высших триплетных уровней // Опт. и спектр., 1971, т. 30, в. 3, с. 456-460.
5. Lin H.-B., Topp M.R. Low quantum-yield molecular fluorescence: polarization in kyanthene dyes // Chem. Phys. Lett., 1977, v. 47, № 3, p. 442-447.
6. Летута С.Н., Лантух Ю.Д., Пашкевич С.Н. Релаксация высоких электронно-возбужденных состояний многоатомных молекул. Оренбург, 2016, 164 с.

# ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФЕРМЕНТАТИВНОЕ ФОСФОРИЛИРОВАНИЕ

Каепкулова Э.И.

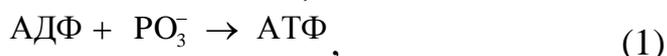
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования «Оренбургский государственный университет»

**Введение.** Все известные магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях объяснялись влиянием магнитного поля и ядерных спинов на синглет триплетную эволюцию в ион радикальных парах. Для таких пар предполагают существование разделенных не спаренных неэквивалентных электронов-носителей не спаренного электронного спина. Для реализации синглет триплетной конверсии необходима магнитная неэквивалентная электронных спинов в партнерах электронной радикальной пары. Тот механизм успешно объяснял магнитно-спиновые эффекты в жидко-фазных радикальных реакциях. Применение свободно радикальных теорий магнитных эффектов для ферментативных реакций позволила объяснить магнитно-полевые эффекты в слабых магнитных полях и не объясняет биологические магнитные эффекты в промежуточных и сильных полях.

Магнитобиология - это раздел биофизики изучающий влияние магнитных полей на живые организмы[1]. Механизмом магниточувствительности живых организмов могут стать внутриклеточные ферментативные реакции с участием ион-радикальных состояний. Слабые магнитные поля могут повлиять на скорости внутриклеточных ферментативных реакций. Синглет - триплетная конверсия ион-радикальных пар в активных центрах ферментов, индуцированная сверхтонкими и зеемановскими взаимодействиями ядерных и электронных спинов - есть главная магниточувствительная стадия. К сильной зависимости скорости ферментативной реакции в слабых магнитных полях, сопоставимых с магнитным полем Земли приводит участие ядерного спина в ион-радикальном процессе.

Аденозинтрифосфорная кислота (АТФ, [англ. АТР](#) - Adenosine-5'-triphosphate) – молекула, что обладает большим значением для обмена энергии и веществ во всех живых организмах. В живых организмах АТФ обеспечивает энергией биохимические реакции. Это реакции синтеза сложных веществ в организме, активные переносы молекул сквозь биологические мембраны, в том числе для создания трансмембранного электрического потенциала и осуществляют мышечных сокращений.

АТФ-синтаза - это фермент, который создает молекулу накопления энергии аденозинтрифосфат (АТФ). АТФ является наиболее часто используемой "энергетической валютой" клеток для всех организмов. Он образуется из аденозиндифосфата (АДФ) и неорганического фосфата  $PO_3^-$ . Общая реакция, катализируемая АТФ-синтазой, такова:



В настоящее время не существует общепризнанных описаний электронных механизмов синтеза АТФ из АДФ и неорганического фосфата в активных центрах АТФ-синтезирующих ферментах. По аналогии с другими механизмами органической химии наиболее вероятным считается нуклеофильный механизм. Нуклеофильное присоединение фосфатной группы к АДФ требует затрат энергии. На больших расстояниях партнеры по реакции в виде отрицательно заряженных ионов отталкивают друг друга, несмотря на то, что заряженные аминокислотные остатки, составляющие каталитический сайт, незначительно компенсируют кулоновское отталкивание реагентов. Однако на малых расстояниях и в переходном состоянии отталкивание замкнутых электронных оболочек достаточно сильно, и для преодоления этого отталкивания требуется высокая энергия, чтобы произошло нуклеофильное присоединение.

Обычно при анализе такого нуклеофильного механизма реакции роль иона магния либо не учитывается, либо считается, что он лишь формирует пространственную структуру промежуточного комплекса. Однако квантово-химические расчеты структуры комплексов  $Mg^{2+}$ -АТФ и  $Mg^{2+}$ -АДФ показывают, что ион  $Mg^{2+}$  связан не только с фосфатными группами, но и с атомом азота аденинового фрагмента АТФ и АДФ. Активную роль магния в ферментативном синтезе АТФ явило открытие изотопных и магнитно-полевых эффектов магния в реакциях синтеза АТФ *in vitro* и *in vivo*.

Поэтому для объяснения магнитных и спиновых эффектов изотопов магния в ферментативных реакциях академиком А.Л. Бучаченко [2] был предложен ион-радикальный механизм.

Ион-радикальный механизм не требует преодоления высокоэнергетического нуклеофильного барьера и сильного сжатия. Даже низкий уровень сжатия достаточен для удаления слабосвязанных молекул воды из оболочки гидрата ионов магния и, следовательно, для индуцирования переноса электронов в качестве стартовой, ключевой реакции синтеза АТФ. Низкая энергетическая стоимость является причиной высокой эффективности синтеза АТФ по ионно-радикальному пути. Повышенная эффективность, индуцируемая ионами  $^{25}Mg^{2+}$ , означает увеличение продукции АТФ на каждый оборот  $\gamma$ -вала в фрагменте F1 АТФ-синтазы. Это делает фармакологический потенциал ионов  $^{25}Mg^{2+}$  еще более привлекательным, поскольку высокий уровень продукции АТФ достигается без дополнительного увеличения выхода опасного супероксидного радикала.

Эффективность использования магнитных изотопов во внутриклеточных процессах неоднократно подтверждалась в экспериментах *in vivo*. Магнитный изотоп магния,  $^{25}Mg$ , содержащийся в клетках кишечной палочки, влияет на их рост, развитие и жизнедеятельность. Интересно, что их биологические эффекты отличаются от эффектов немагнитного изотопа  $^{24,26}Mg$ . Колониеобразующая способность бактерий *E. coli* растёт (для полей 0-15 и 76-93 мТл), а внутриклеточный элементный состав изменяется в результате комбинированного воздействия внешнего ПМП (постоянное магнитное поле) и магнитного изотопа магния  $^{25}Mg$  и  $^{67}Zn$ . Наблюдаемые эффекты указывают на влияние магнитных мо-

ментов атомных ядер изотопов  $^{25}\text{Mg}$ ,  $^{67}\text{Zn}$  на весь организм. Это влияние осуществляется через последовательность внутриклеточных ферментативных процессов, включая синтез АТФ.

Совместное действие магнитного изотопа иона магния  $^{25}\text{Mg}^{2+}$  и было обнаружено в АТФ-пуле бактерий *E. coli* в диапазоне от 70 до 98 мТл. Внутриклеточная концентрация АТФ увеличивается в 2-3 раза в этих полях для бактерий, обогащенных магнитным изотопом магния  $^{25}\text{Mg}$ . Интересно, что даже 10%-ное обогащение питательной среды магнитным изотопом  $^{25}\text{Mg}$  (это содержание магнитного изотопа в природном магнии) позволяет регистрировать увеличение пула АТФ. Эти данные коррелируют с влиянием магнитных полей на колониеобразующую способность. Ключевая роль в этом сильнейшем эффекте магнитного поля принадлежит, скорее всего, увеличению скорости синтеза АТФ из-за участия ядерного спина  $^{25}\text{Mg}$  в ферментативной радикальной ионной реакции и индукции синглетно-триплетного превращения за счет механизма сверхтонкого взаимодействия. Это также подтверждается результатами экспериментов во внешнем магнитном поле с выделенными ферментами, обогащенными магнитными  $^{25}\text{Mg}$  и немагнитными  $^{24}\text{Mg}$  *in vitro*[3].

Экспериментальные исследования магнитно-полевых зависимостей различных биохимических и функциональных параметров клеток *E. coli*, выращенных на питательных средах М9, обогащенных разными изотопами  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{25}\text{Mg}$  и  $^{26}\text{Mg}$ , продемонстрировали две интересные закономерности. Во-первых, в слабых магнитных полях (меньше 10 мТл) эти параметры возрастали с увеличением магнитного поля  $H$  до некоторых постоянных величин. Такое поведение магнитно - полевых зависимостей согласуется с теорией ион-радикального механизма ферментативного каталитического синтеза АТФ. Это предсказывали оба механизма синглет - триплетной эволюции ион-радикальных пар ( $\Delta g$ - и СТВ - механизмы). Во-вторых, в промежуточных магнитных полях порядка 80 мТл существенно возрастает и внутриклеточное содержание АТФ и КОЭ. Например, КОЭ возрастает в 2,5 раза для изотопа  $^{25}\text{Mg}$ , незначительно (в 1,5 раза) возрастает для естественной смеси изотопов  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{26}\text{Mg}$  и незначительно убывает для немагнитных изотопов  $^{24}\text{Mg}$  и  $^{26}\text{Mg}$ . Ни  $\Delta g$ - механизм, ни СТВ - механизм не могут объяснить такое поведение магнитно-полевых зависимостей. Магнитное поле  $H$ , даже очень сильное, само по себе не в состоянии изменить динамику внутриклеточных процессов, тем более не в состоянии вызвать такие изменения в относительно узком диапазоне магнитных полей. С другой стороны, сильные изотопные различия магнитно-полевых зависимостей указывают на участие ядерного спина  $^{25}\text{Mg}$  в динамике внутриклеточных процессов в этом диапазоне магнитных полей.

Анализ магнитно-полевой зависимости, позволяет предположить, что в магнитных полях от 70 до 100 мТл магнитное поле  $H$  “включает” дополнительный канал ферментативного синтеза АТФ. Предварительная проверка этой гипотезы требует исследования простой модели кинетики такой “двухканальной” реакции и микроскопического объяснения механизма переключения каналов

синтеза АТФ в ферментативных и внутриклеточных реакциях действием магнитного поля  $H$  и ядерного спина.

**Феноменологическая кинетика “двухканального” ферментативного синтеза АТФ.** Простейшую кинетическую схему реакции ферментативного синтеза АТФ ферментом АТФ-азой и другими фосфаттрансферазами можно представить следующим образом. В активном центре фермента появляются АДФ в виде комплекса с ионом  $Mg^{2+}$  и неорганический фосфат  $PO_3$ . Конформационные изменения фермента сближают эти частицы, заставляя преодолеть кулоновское отталкивание фосфатных групп, и образуют АТФ с константой скорости  $k_s$ .

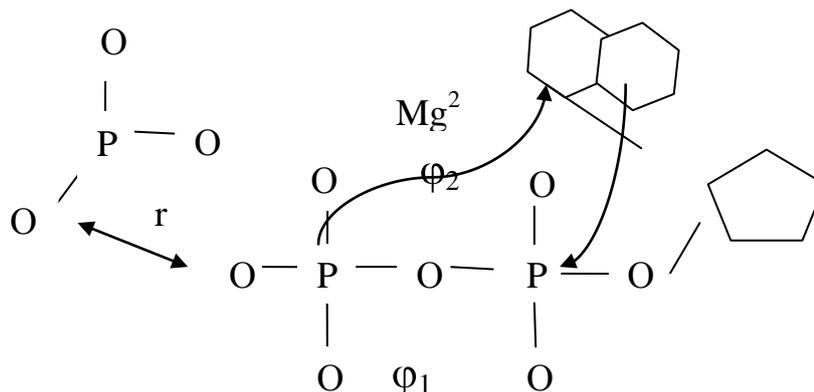
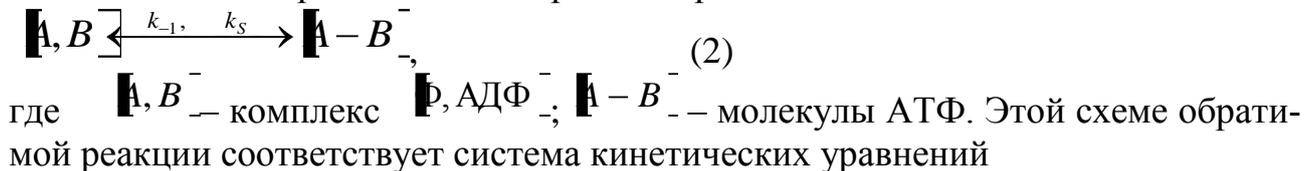


Рисунок 1 - Схема переноса электронной плотности с орбиталей  $\varphi_1 \leftarrow \varphi_1 \leftarrow \varphi_2$  - пирофосфатного фрагмента комплекса Mg-АТФ на молекулярную орбиталь  $\varphi_u \leftarrow \varphi_u \leftarrow c_1\varphi_1 \leftarrow c_2\varphi_2$  при сближении с заряженной фосфатной группой  $PO_3$

После этого АТФ покидает фермент, попадает в другой фермент, производит полезную работу, сопровождающуюся разделением АТФ на АДФ и фосфатную группу, которые затем вновь оказываются в активном центре АТФ-синтазы с константой скорости  $k_{-1}$ . Предполагается, что в течение всего сложного процесса все частицы и их комплексы находятся в синглетных спиновых состояниях. Это простая схема обратимой реакции



$$\begin{cases} d[A, B]/dt = -k_s [A, B] + k_{-1} [A - B] \\ d[A - B]/dt = +k_s [A, B] - k_{-1} [A - B] \end{cases} \quad (3)$$

В нормальных стационарных условиях  $d[A, B]/dt = d[A - B]/dt = 0$  и система кинетических уравнений имеет простое решение, где соотношение продуктов определяется только отношением констант скоростей реакции

$$[A, B^S] \rightleftharpoons \frac{k_{-1}}{k_{-1} + k_S}, \quad (4)$$

и

$$[A - B] \rightleftharpoons \frac{k_S}{k_{-1} + k_S} = \frac{1}{1 + (k_{-1} / k_S)}, \quad (5)$$

Для того, чтобы объяснить эффекты “сильного” магнитного поля, предположим, что в активном центре фермента совместное действие магнитного поля  $H$  и ядерного спина изотопа  $^{25}\text{Mg}$  индуцирует превращение одной из частиц комплекса (Фосфат-АДФ) из синглетного  $[A, B^S]$  - состояния в триплетное состояние  $[A, B^T]$  с константой скорости  $k_{ST}(H)$ . Предполагается, что из этого состояния комплекса тоже образуется АТФ, но с другой константой скорости  $k_T$ , которая не зависит от магнитного поля. На основании этих предположений можно предложить следующую “двухканальную” схему реакции синтеза АТФ.

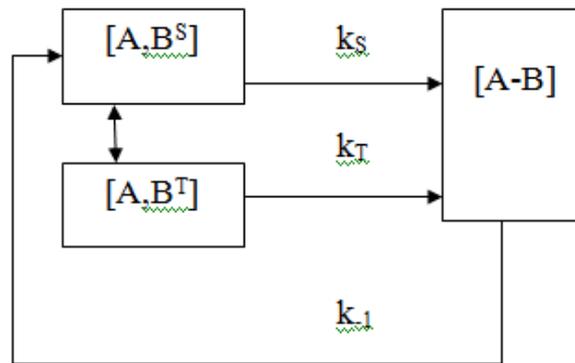


Рисунок 2 - Схема “двухканальной” реакции синтеза АТФ:

$[A, B^S]$  - комплекс  $[\Phi, \text{АДФ}]$  синглетного состояния;  $[A, B^T]$  - комплекс  $[\Phi, \text{АДФ}]$  триплетного состояния;  $[A-B]$  - молекулы АТФ;  $k_S$ -константа скорости синглетного состояния;  $k_T$ -константа скорости триплетного состояния

Этой схеме реакции соответствует система кинетических уравнений

$$\begin{cases} d[A, B^S] / dt = -k_S [A, B^S] + k_{ST} [A, B^T] + k_{-1} [A - B] \\ d[A, B^T] / dt = -k_T [A, B^T] + k_{ST} [A, B^S] \\ d[A - B] / dt = +k_S [A, B^S] + k_T [A, B^T] - k_{-1} [A - B] \end{cases}, \quad (6)$$

Для простоты вычислений удобно ввести другие обозначения для величин  $[A, B^S]$ ,  $[A, B^T]$  и  $[A - B]$

$$\begin{cases} [A, B^S] \rightarrow A, \\ [A, B^T] \rightarrow B, \\ [A - B] \rightarrow C. \end{cases}, \quad (7)$$

Теперь система уравнений может быть представлена в простом виде

$$\begin{cases} dA/dt = -k_S A - k_{ST} A + k_{-1} C, \\ dB/dt = -k_T B + k_{ST} A, \\ dC/dt = +k_S A + k_T B - k_{-1} C. \end{cases}, \quad (8)$$

При почленном сложении всех трех дифференциальных уравнений получается

$$dA/dt + dB/dt + dC/dt = d(A + B + C)/dt = 0, \quad (9)$$

Следовательно, система дифференциальных уравнений имеет интеграл движений, который можно положить равным 1

$$A + B + C = 1, \quad (10)$$

Тогда

$$C = 1 - (A + B), \quad (11)$$

Как правило, все биохимические и физиологические процессы в живых клетках развиваются достаточно медленно, что позволяет рассматривать их как квазистационарные или стационарные процессы и считать

$$dA/dt = dB/dt = dC/dt = 0, \quad (12)$$

В этом случае система дифференциальных уравнений (13) превращается в систему простых алгебраических уравнений, для решения которой достаточно использовать только два уравнения

$$\begin{cases} -k_{ST} A + k_T B = 0 \\ +k_S A + k_T B = k_{-1} C, \end{cases} \quad (13)$$

После очевидной замены получается

$$\begin{cases} -k_{ST} A + k_T B = 0 \\ +k_S A + k_T B = k_{-1}(1 - A - B), \end{cases} \quad (14)$$

И, окончательно,

$$\begin{cases} -k_{ST} A + k_T B = 0 \\ (k_S + k_{-1})A + (k_T + k_{-1})B = k_{-1}, \end{cases} \quad (15)$$

Определитель системы

$$\Delta = k_{ST}(k_T + k_{-1}) + k_T(k_S + k_{-1}), \quad (16)$$

Количество частиц  $A$

$$A = k_T k_{-1} \Delta^{-1} = \frac{k_T k_{-1}}{k_{ST}(k_T + k_{-1}) + k_T(k_S + k_{-1})}, \quad (17)$$

Количество частиц  $B$

$$B = k_T k_{-1} \Delta^{-1} = \frac{k_{ST} k_{-1}}{k_{ST}(k_T + k_{-1}) + k_T(k_S + k_{-1})}, \quad (18)$$

Количество частиц  $C$  в случае “двухканальной” реакции

$$C = \frac{k_T(k_{ST} + k_S)}{k_{ST}(k_T + k_{-1}) + k_T(k_S + k_{-1})} = \left( 1 + \frac{k_{-1}(k_{ST} + k_T)}{k_T(k_{ST} + k_S)} \right)^{-1}, \quad (19)$$

зависит от всех четырех констант скорости  $k_T$ ,  $k_{ST}$ ,  $k_S$  и  $k_{-1}$ . Равенства (5) и (19) позволяют определить условия, при выполнении которых “двухканальный” путь реакции будет эффективнее “одноканального”. Как и следовало ожидать, “двухканальный” путь реакции будет эффективнее “одноканального”, если  $k_T > k_S$  независимо от константы скорости  $k_{ST}$  превращения комплексов  $[A, B^S]$  в комплексы  $[A, B^T]$ . Однако эта константа существенно влияет на количество продукта реакции  $A-B$ .

Интересная ситуация возникает, если константа становится достаточно большой  $k_{ST} \gg k_T, k_S$ . В этом случае

$$C = \frac{1}{1 + (k_{-1}/k_S)} = \frac{k_T}{k_{-1} + k_T}, \quad (20)$$

и основным источником образования молекул  $A-B$  является предшественник  $[A, B^T]$ .

**Обсуждение результатов.** Кинетический и квантовомеханический анализ реакции ферментативного фосфорилирования и ее элементарного акта – присоединение неорганического фосфата к комплексу Mg-АДФ – показали, что внешнее магнитное поле  $H$  и ядерный спин иона  $^{25}\text{Mg}$  способны увеличивать скорость реакции и выход АТФ в области магнитных полей, соответствующих квазипересечению синглетного и триплетного терма участников реакции ( $k_T > k_S$ ).

#### Список литературы

1. *Buchachenko, A.L.* Electron spin catalysis / *Berdinsky V.L.* // *Chem. Rev.* – 2002. – Vol. 102. – P. 603–612.
2. *Бучаченко, А.Л.* Магнитно-спиновые эффекты в химии и молекулярной физике/Я.Б. Зельдович, А.Л. Бучаченко, Е.Л. Франкевич. – М.: Успехи физических наук, 1988. – 483с.
3. *Летута, У.Г.* Магнитно-полевые эффекты в бактериях *E. coli* в присутствии изотопов Mg. / У.Г.Летута, Е.И.Авдеева, В.Л.Бердинский –Известия Академии Наук, 2014. – 1089-1102с.

# ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФИЛЛОСИЛИКАТОВ НА ПРИМЕРЕ КАОЛИНОВОЙ ГЛИНЫ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ

Каныгина О.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,  
Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент,  
Филяк М.М., канд. техн. наук, доцент

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

*Введение.* Каолин является одним из универсальных видов минерального сырья, используемого в промышленности. Мировое производство каолина составляет более 40 млн. тонн в год, причем, сохраняется устойчивая тенденция роста потребления каолиновых продуктов, расширяется сфера их применения. Только за последнее десятилетие мировое производство каолинов возросло в 1,6 раза [1].

Месторождение каолинов, обнаруженное в Оренбургской области в 2018 году, предположительно, самое крупное в Российской Федерации. Оно отмечено на карте Оренбургской области синим маркером (рис. 1). В пределах Коскольской площади (около 72 км<sup>2</sup>) было выделено 5 залежей полезного ископаемого. Три из них – особо перспективные месторождения каолинов высокого качества [2].

Исследования по вовлечению сырьевых материалов из перспективных собственных месторождений для развития промышленности представляются весьма актуальными по всему миру. В последние годы большой интерес вызывают минеральные адсорбенты, поскольку производство синтетических обходится дорого [3]. Особого внимания заслуживают природные алюмосиликаты. В первую очередь – глины. Поиск эффективных сорбентов предполагает использование природного сырья Оренбургской области.

Поглотительную способность глин обычно оценивают, используя в качестве адсорбата красители. Адсорбция красителей определяется тремя факторами: поверхностным натяжением на границе раздела фаз, силами взаимодействия красителя с адсорбентом и пористостью последнего [4].

Локально воздействовать на поверхности частиц глинистых минералов позволяет СВЧ-активация. Она представляет собой экологически чистый, быстродейственный и энергоэкономный процесс. СВЧ-излучение должно образовывать дополнительные активные центры, увеличивающие обменную емкость частиц глин [5, 6]. Сорбционные свойства каолиновых глин обычно невысоки, а сорбционные свойства глин Оренбургских месторождений не изучены.

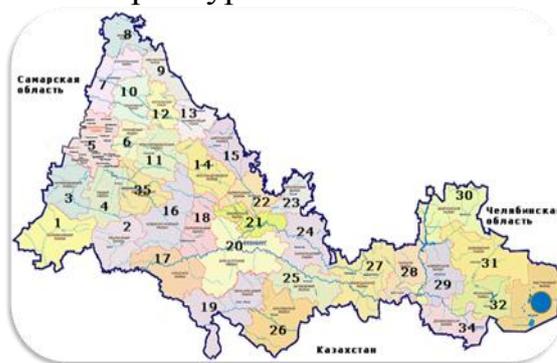


Рисунок 1 – Месторождение каолинита на карте Оренбургской

Цель работы состояла в изучении возможности повышения адсорбционной способности частиц каолиновой глины путем обработки ее в СВЧ-поле. Основная задача заключалась в оценке изменения сорбционной емкости и механизма взаимодействия молекул красителя и поверхностей частиц глинистых минералов. Авторы изучали поглотительную способность каолиновой глины, имеющей высокие значения белизны.

*Материал и методы исследований.* Объектом исследования стало каолиновое минеральное сырье месторождения Светлинского района Оренбургской области. Обработку природных глинистых порошков (А0) в СВЧ-поле мощностью 800 Вт проводили на частоте 2,45 ГГц в течение 10 минут (образец А1).

Из всех минералов наименьшей сорбционной емкостью обладает каолинит. Он имеет жесткую кристаллическую структуру в случае отсутствия изоморфных замещений. Обменные процессы у каолинита протекают на боковых сколах частиц и обусловлены наличием не скомпенсированных валентных связей. Ячейка каолинита состоит из двух слоев: кислородного тетраэдрического с катионом кремния в центре (рис. 2,а) и кислородно-гидроксильного октаэдрического с катионом алюминия в центре (рис. 2,б). Оба слоя связаны молекулярными и более приоритетными водородными силами (рис. 2,в). Энергия их связи выше энергии гидратации межслоевого пространства, поэтому каолиниты практически не набухают в воде. Период чередования слоев не превышает 0,75 нм; толщина кремнекислородного слоя составляет менее половины нанометра. На базальной поверхности атомы кислорода образуют шестиугольную сетку[3].

Структурная формула чистых каолинитов выглядит следующим образом:

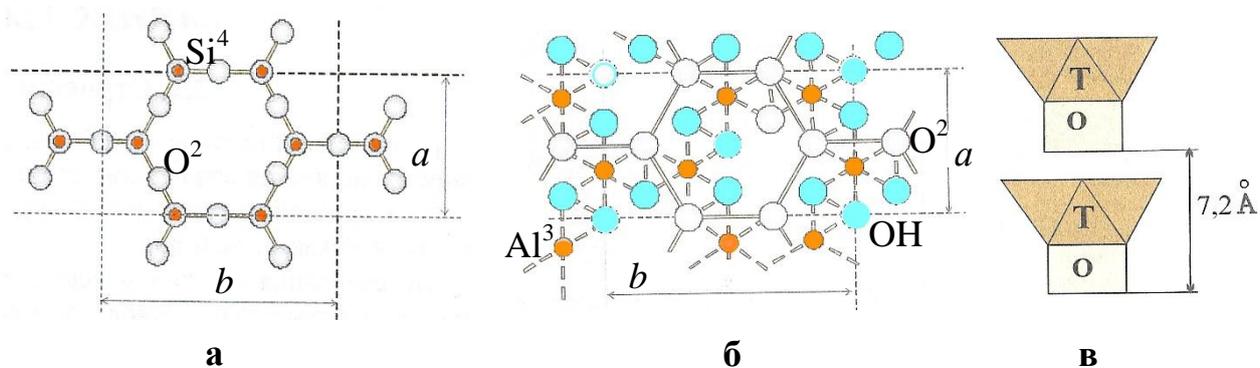
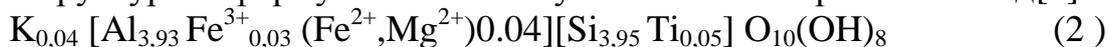


Рисунок 2 – Схематическое строение проекций тетраэдрической Т (а) и октаэдрической О (б) сеток на плоскость  $ab$ , структуры каолинита (в)[7]



В большинстве каолинитов выявлены изоморфные замещения: среди октаэдрических катионов встречаются атомы железа, магния или титана. Поэтому усредненная структурная формула каолинита усложняется и принимает вид[7]:



Каолинит относится к диоктаэдрическим минералам, филосиликатам типа один к одному. Ионы железа непосредственно входят в саму кристаллическую решетку глин. Медь находится в межслоевом гидратном пространстве. При однослойной гидратации катион меди образует комплекс из четырех молекул воды. Наличие оксидов железа и меди увеличивает теплоту смачивания глин во-

дой. Сродство поверхности частиц каолинита к водным растворам больше в присутствии оксида меди, чем при наличии оксида железа.

Характеристика глины проведена с применением методов химического и рентгенофлуоресцентного, рентгенофазового и сорбционного анализов, ИК-спектроскопии. Содержание оксидов железа и меди в каолиновой глине оценивали тремя методами: фотоколориметрии, абсорбционной спектроскопии и ионообменной хроматографии.

*Результаты исследований и их обсуждение.* Химический состав каолиновой глины приведен в таблице 1.

Таблица 1– Химический состав каолиновой глины (масс. %)[8]

SiO <sub>2</sub>	CaO	MgO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	CuO	MnO	ZnO	Σ(Na <sub>2</sub> O+K <sub>2</sub> O)	ппп	Σ
53,50	2,14	0,97	1,63	21,89	1,97	0,27	0,02	0,06	4,45	10,10	100

Качественный элементный состав металлов в каолиновой глине провели с помощью рентгенофлуоресцентного кристалл-дифракционного сканирующего спектрометра «Спектроскан LF». Кристалл-анализатор был LiF. Материал анода рентгеновской трубки был Ag. Дежурные напряжение и ток установили 40 киловольт и 100 микроампер, соответственно. Содержание Cu, Zn и Mn определяли с помощью атомно-абсорбционной спектроскопии на приборе «Спектр 5». Полученные значения пересчитали на оксиды соответствующих металлов. Установлено, что наиболее интенсивные линии по К-серии относились к железу и меди. Меньшей интенсивностью характеризовались линии цинка, марганца, титана и хрома.

Структурные трансформации в частицах изучали методом инфракрасной спектроскопии. Пробы А0 и А1 запрессовывали в таблетки KBr. Для записи ИК-спектров использовали ИК-Фурье спектрометр Bruker Alpha. Он позволили измерить оптические спектры в диапазоне от 4000 до 400 см<sup>-1</sup>.

Инфракрасные спектры обеих проб содержали характерные полосы поглощения: 3700, 3670, 3650, 3424, 1032, 1008 и 912 см<sup>-1</sup>. В пробе А0 доминировали колебательные мостиковые кремнекислородные связи и деформационные концевые связи в тетраэдре SiO<sub>4</sub>. После воздействия СВЧ-поля большинство связей разрушились: их доля уменьшается почти в 2 раза. Исчезла часть связей в тетраэдре SiO<sub>4</sub> и деформационная связь гидрокс группы алюминия. Во всех спектрах присутствовала полоса неполярной ковалентной связи углерода при 467 см<sup>-1</sup>. После СВЧ-обработки ее интенсивность снизилась. Это стало откликом на ограничение угловых деформаций данной связи из-за удержания углерода между пластинками глинистых минералов. Возможно, произошло частичное удаление углерода из частиц глины. Следовательно, дисперсная каолиновая глина оказалась чувствительна к воздействию СВЧ-поля.

Фазовый состав определяли методом рентгенофазового анализа на минидифрактометре МД10 в монохроматизированном медном излучении со скоростью сканирования 1°/мин в диапазоне углов от 10 до 120° по шкале 2θ (±0,02°) с записью результатов в цифровом формате. Количественную интерпретацию

рефлексов выполнили путем сравнения со стандартами, содержащимися в базе данных программного обеспечения LookPDF.

Фазовый состав природной глины оказался представлен аморфными и кристаллическими фазами (табл. 2). Кристаллическая часть содержала четыре фазы: минерал каолинит, оксид алюминия как  $\alpha$ -корунд, оксид кремния, содержащий примеси замещения как  $\alpha$ -тридимит и алюмосиликат кианит.

Таблица 2 – Фазовый состав проб А0 и А1

d, nm		I, %		Phase	
A0	A1	A0	A1	A0	A1
0,716	0,721	21	24	Kaolinite	Kaolinite
	0,358		16		Kaolinite
0,339		12		Kyanite	
0,318	0,320	100	100	Kaolinite	Kaolinite
	0,247		25		Kaolinite
	0,241		17		Tridymite
0,234	0,237	11	14	Kaolinite	Kaolinite
0,218		13		Kyanite	
	0,229		15		Kaolinite
	0,221		19		Tridymite
0,213		11		Kaolinite	
0,207		11		Corundum	
	0,193		26		Kaolinite
0,190		10		Tridymite	
	0,176		14		Kaolinite
	0,161		20		Kaolinite
0,160	0,159	13	20	Corundum	Corundum
	0,150		15		Kaolinite
0,148	0,147	16	13	Kaolinite	Kaolinite
0,135	0,135	10	12	Kaolinite	Kaolinite

В результате воздействия СВЧ-излучения в порошке каолиновой глины произошли структурные изменения: увеличилась интегральная интенсивность дифракционных максимумов на 30 % за счет фазовых превращений. Во-первых, увеличилась объемная доля каолинита на 8%; во-вторых, на 2 % увеличилось количество тридимита. Наконец, полностью разложился кианит. Содержание в размере 15 % самого термостабильного оксида –  $\alpha$ -корунда – не изменилось.

Для оценки влияния СВЧ-активации каолина на адсорбцию красителя использовали спектрофотометрический метод. Он основан на контроле оптической плотности растворов до и после взаимодействия метиленового синего с поверхностью глинистых частиц. Оптическую плотность измеряли с помощью фотоколориметра.

Сорбция красителей на частицах минералов зависит от структуры частиц и красителя. Универсальный краситель – метиленовый синий – образует наиболее богатый спектр цветовых характеристик [9]. Он широко применяется при изучении сорбционной способности глинистых минералов. В исследовании [10] были приняты во внимание четыре различных способа катионных соединений метиленового синего (первичное P, вторичное S, третичное T и четвертичное Q), (рис.3).

Благодаря мелкодисперсному состоянию частицы каолинита почти идеально расщепляется вдоль базальной поверхности (001). Авторами использованы расчеты по однократной адсорбции и конкурентной адсорбции на базальной поверхности каолинита. Несбалансированные заряды в адсорбционных системах различной адсорбции катионов метиленового синего на базальных поверхностях каолинита уравнивались ионами замещения.

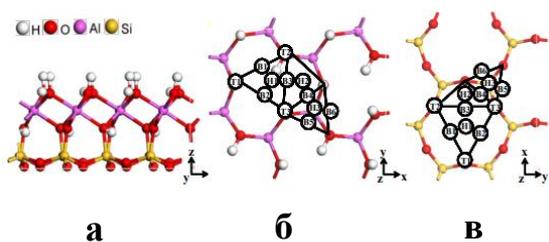


Рисунок 3 - Поверхностная структура каолинита: структура слоя (а); вид сверху поверхности (001) Al-OH с обозначенными участками адсорбции (б); вид сверху поверхности Si-O с обозначенными участками адсорбции (в). Места адсорбции обозначены на рисунке как Т (верхние позиции), В (мостовые позиции) и Н (полые позиции) [10]

Сорбционную емкость оценивали по снижению содержания красителя в растворе до и после сорбции. Степень извлечения сорбата  $W$  оценивали по стандартной формуле. По изотермам сорбции определяли максимальную ионообменную ёмкость или емкость катионного обмена (применительно к глинистым минералам чаще рассматривается катионный обмен). У неразбухающих минералов типа каолинитов он происходит только на внешних гранях минерала (экстрамицеллярный обмен). Установлено, что структурные трансформации частиц из-за СВЧ-воздействия увеличили их адсорбционную способность.

На рисунке 4 приведены зависимости степени извлечения красителя от времени. Сплошной линией показана зависимость для пробы А0. Пунктиром показана зависимость после воздействия СВЧ-поля. Видно, что извлечение метиленового синего (после действия СВЧ-поля увеличилось почти в 1,5 раза. Активный режим сорбции наблюдался в обоих случаях в первые 40 минут. Аналогично изменились и скорости извлечения красителя пробами А0 и А1. Эти значения пропорциональны величине удельной поверхности частиц. Обработанные глинистые частицы при их сближении базальными плоскостями создали локальное осмотическое давление, под влиянием которого жидкая фаза (краситель) старалась затечь в прослойку между частицами и раздвинуть их. Это привело к образованию электростатической компоненты расклинивающего давления и формированию дополнительных поверхностей, участвовавших в адсорбции. Сорбционная емкость по красителю метиленовому синему определена по изотермам Ленгмюра. Ее значение для пробы А1 выросло на 37 % до 2,8 мг/г.

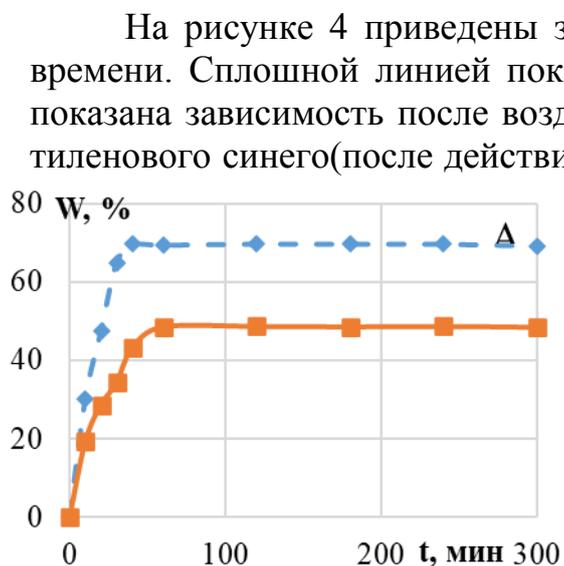


Рисунок 4 – Зависимости степени извлечения метиленового синего пробами А0 и А1 от вре-

мени. Активный режим сорбции наблюдался в обоих случаях в первые 40 минут. Аналогично изменились и скорости извлечения красителя пробами А0 и А1. Эти значения пропорциональны величине удельной поверхности частиц. Обработанные глинистые частицы при их сближении базальными плоскостями создали локальное осмотическое давление, под влиянием которого жидкая фаза (краситель) старалась затечь в прослойку между частицами и раздвинуть их. Это привело к образованию электростатической компоненты расклинивающего давления и формированию дополнительных поверхностей, участвовавших в адсорбции. Сорбционная емкость по красителю метиленовому синему определена по изотермам Ленгмюра. Ее значение для пробы А1 выросло на 37 % до 2,8 мг/г.

*Заключение.* Изучена возможность активации адсорбционной способно-

сти дисперсных систем природных алюмосиликатов с помощью СВЧ-полей. Исследованы дисперсные частицы каолиновой глины, обладающей невысокими адсорбционными показателями. В качестве адсорбента использован краситель метиленовый синий, количество которого хорошо контролировалось на белом фоне частиц. Обработку порошков в микроволновом поле мощностью 800 Вт осуществляли при частоте 2,45 ГГц в течение 10 минут. Установлен эффект СВЧ-активации процесса извлечения красителя без смены механизмов адсорбции за счет структурных трансформаций в частицах.

#### Список литературы

1. Клепиков М. С. Исследование физико-химических свойств каолинов Полетаевского месторождения Челябинской области и керамических материалов на их основе: авторефер. дис. ... канд. хим. наук: 02.00.21. Челябинск, 2012. – 23 с.
2. Географический атлас Оренбургской области. - М.: Издательство ДИК, 1999. - 96 с.: илл., карт. Природное наследие Оренбургской области: особо охраняемые природные территории / Чибилёв А.А., Павлейчик В.М., Чибилёв А.А. (мл.), вступительное слово Коннов М.Ф. - Оренбург: УрО РАН, Печатный дом "Димур", 2009. – 328 с.
3. Иванова Е.С. Взаимосвязь структурных и сорбционных свойств природных алюмосиликатов: автореферат дис. ... кандидата химических наук / Рос. гос. пед. ун-т им. А.И. Герцена. Санкт-Петербург, 2015 – 110 с.
4. Parfitt G. D. Adsorption from solution at the solid/liquid interface / Parfitt G. D., Rochester C. H. // Academic Press, 1983. – 416 p.
5. Cuiyan L. Preparation, Adsorption Properties and Microwave-Assisted Regeneration of Porous C/SiC Ceramics with a Hierarchical Structure / Cuiyan L., Zhao X., Haibo O., Liyuan C., Jianfeng H., Yijun L. // Applied Composite Materials. 2020. – V. 27. – No. 3. – P. 131-148.
6. Kazmierczak-Razna J. The Use of Microwave Radiation for Obtaining Carbonaceous Adsorbents from Biomass and Their Use in Elimination of Inorganic Pollutions / Kazmierczak-Razna J., Pietrzak R. // Adsorption. 2016. – V. 22. – No. 4-6. – P. 473-480.
7. Осипов В. И. Глины и их свойства. Состав, строение и формирование свойств / Осипов В. И., Соколов В. Н. // М.: Геос. 2013. – 576 С.
8. Характеристика каолиновых глин месторождения Светлинского района Оренбургской области / Каныгина О. Н., Четверикова А. Г., Алпысбаева Г. Ж., Филяк М. М., Юдин А.А., Анисина И. Н., Гуньков В. В. // Стекло и керамика, 2020. – № 9. – С. 34-40.
9. Андреева К. Д. Методика оперативного определения катионного объема глин // Известия высших учебных заведений. Геология и разведка. 2014. – № 6. – С. 74-76.
10. Chen, J. Adsorption of methylamine cations on kaolinite basal surfaces:

A DFT study. /Chen, J., Min, F., Liu, L., Jia, F. // Physicochemical Problems of Mineral Processing, 2020. –V. 56. No. 2. –P.338-349.

## МОЩНЫЕ ОПТРОНЫ

**Кирип И.Г., д-р техн. наук, профессор**

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

Одна из неотъемлемых частей значительного числа силовых устройств это оптоэлектронные приборы- оптроны и твердотельные реле различного назначения. Они обеспечивают гальваническую развязку управляющих сигналов и сигналов состояния отдельных силовых узлов, работающих с большими токами или напряжениями [1,2].

Спектр оптоизолированных приборов, к которым и относятся оптроны, используются в системах контроля и автоматики, измерительных системах, телекоммуникационных реле [1]. Несколько выделяются из этого ряда фотоэлектрические изоляторы (PhotoVoltaic Isolator), представляющие собой класс приборов, являющийся средним между оптронами и твердотельными реле [2].

Они позволяют достаточно простым способом добавить в схему управляемый «плавающий» источник тока или напряжения с изолированными цепями управления.

Особое значение в последнее время приобретает разработка мощных оптронов предназначенных для использования в фотоэлектронных трансформаторах. На этих трансформаторах строятся источники вторичного электропитания с электрически изолированными входами и выходами, обеспечивающими полную гальваническую развязку входных и выходных цепей устройств [3-6]. В этих источниках на передающей части расположенной на потенциале Земли электрическая энергия преобразуется в оптическую с помощью лазера, лазерное излучение передается в заданную точку установки и затем на приемной стороне на высоковольтной платформе вновь преобразуется в электрическую энергию [4]. Они обладают достаточно высокой радиационной устойчивостью благодаря возможности расположить лазер в защищенном от радиации помещении и относительно высокой устойчивостью фотоэлектрических преобразователей к ней [3]. Это обстоятельство позволяет их использовать не только в составе энергетических установок, но и в составе различного рода ускорителей.

В настоящей работе сообщается об оптроне с повышенной выходной мощностью и электрической прочностью, построенного на базе полупроводникового лазера.

На рис 1. приведена структурная схема разработанного оптрона. Стрелками показан ход световых лучей.

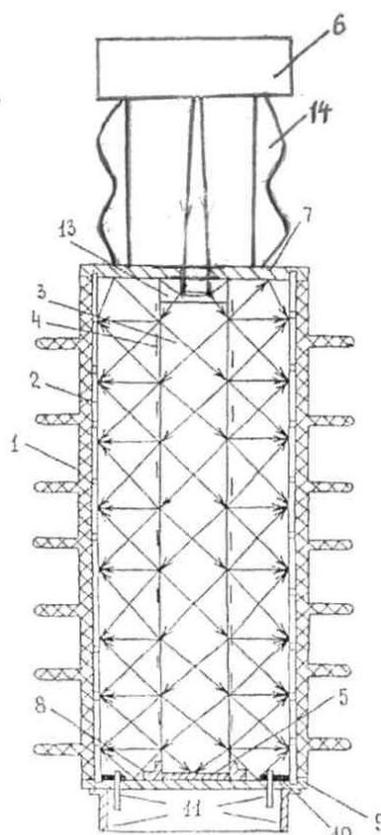


Рис 1. Мощный оптрон на базе полупроводникового лазера

1-корпус фотоэлектрического блока, 2-батарея солнечных элементов, 3-светораспределитель в виде стеклянной трубки с отражающей боковой поверхностью с зеркальным покрытием 4, 5-глухое зеркало, 6-полупроводниковый лазер, торцы корпуса фотоэлектрического блока с зеркальным покрытием 7 и 9, 8-муфта, 10-контакты, 11- электрический разъем, 12- корпус оптопары, 13-рассеивающая линза, 14 - распределители потенциалов корпуса оптопары.

Оптрон содержит корпус, выполненный в виде трубы из диэлектрического материала 12. На внешней боковой поверхности корпуса имеются распределители потенциала 14. В качестве излучателя света в оптроне использован полупроводниковый лазер 6, в качестве фотоприемного элемента использован фотоэлектрический блок. В оптроне на одном торце его корпуса расположен полупроводниковый лазер, а на другом торце расположен фотоэлектрический блок, включающий: корпус 1, батарея солнечных элементов 2, рассеивающую линзу 13, глухое зеркало 5, муфту 8, электрический разъем 11, два контакта 10 и светораспределитель 3. Корпус фотоэлектрического блока выполнен в виде полого цилиндра с торцевыми поверхностями, внутренние торцевые поверхности которого 7 и 9, выполненные зеркальными. Батарея солнечных элементов 2 расположена коаксиально на боковой внутренней поверхности корпуса фотоэлектрического блока. Светораспределитель 3 расположен на оси корпуса фотоэлектрического блока и выполнен в виде стеклянной трубки покрытой сверху тонким слоем отражающего покрытия. Один торец стеклянной трубки через

рассеивающую линзу 13 закреплен на переднем торце корпуса фотоэлектрического блока, имеющего отверстие для установки рассеивающей линзы, а второй торец стеклянной трубки закрыт глухим зеркалом 5 и закреплен на заднем торце корпуса фотоэлектрического блока с помощью муфты 8. С обратной стороны корпуса фотоэлектрического блока расположен электрический разъем 11 с двумя контактами 10, соединенными с батареей солнечных элементов 2.

Оптрон работает следующим образом. При поступлении напряжения на полупроводниковый лазер 6 его излучение, пройдя через корпус оптрона, выпущенный в виде полого изолятора с распределителями потенциалов 14, попадает на отрицательную линзу 13, рассеивается ей и поступает в светораспределитель выполненный в виде стеклянной трубки с отражающей боковой поверхностью с зеркальным покрытием 3. Это излучение частично выходит из нее и, одновременно распространяется в ней. Вышедшее из светораспределителя излучение попадает на батарею солнечных элементов 5. В батарее солнечных элементов это излучение преобразовывается в электрический ток, далее через выводы 10 поступает на разъем 11 и передается потребителю.

Конструкция оптрона обеспечивает достаточно высокую выходную мощность. Это достигается тем, что в ее составе в качестве источника света оптрона используется полупроводниковый лазер 6, а в качестве фотоприемного элемента используется батарея солнечных элементов 2.

Электрическая прочность оптрона достигается за счет того, что вне полупроводниковый лазер 6, и ее фотоприемный элемент - батарея солнечных элементов 2, располагаются на достаточном расстоянии друг относительно друга. Для этого между ними располагается корпус, выполненный в виде полого изолятора 14 с распределителями потенциалов, обеспечивая тем самым электрическую прочность оптрона. Учитывая, что лазерное излучение направленное, электрическую прочность оптрона можно увеличивать, увеличивая длину этого полого изолятора.

Для рассматриваемой конструкции оптрона мощность на его выходе определяется соотношением

$$P_i = P_{i0} \cdot \eta_1 \cdot \eta_2$$

$P_i$  - мощность на выходе оптрона;  $P_{i0}$  - мощность на входе оптрона;  $\eta_1$  - коэффициент, учитывающий потери лазерного излучения при его преобразовании в электрический ток;  $\eta_2$  - коэффициент, описывающий потери энергии в оптических элементах, обеспечивающих передачу лазерного излучения к фотоэлектрическим преобразователям.

В [4,6] было показано, что при преобразовании, например, излучения полупроводникового лазера с длиной волны  $\lambda = 0,85$  мкм фотопреобразователем из *GaAs*, ширина запрещенной зоны которого точно соответствует частоте преобразовываемого излучения, КПД преобразования оптического излучения в электрический ток определяется выражением:

$$\eta_1 = \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right) \left[ 1 - \frac{\ln \left[ \frac{E_g}{kT_2} \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right) \right] + 1}{\frac{E_g}{kT_2} \left(1 - \frac{T_2}{T_1}\right)} \right]$$

где:  $T_1$  - температура абсолютно черного тела замещающего лазер,  $T_2$  - температура фотоэлектрического преобразователя,  $E_g$  - ширина запрещенной зоны фотоэлектрического преобразователя,  $\Delta\nu = \frac{kT_2}{h}$  - ширина спектральной области абсолютно черного тела замещающего лазер поступающего на фотоэлектрический преобразователь,  $k$  - постоянная Больцмана,  $h$  - постоянная Планка. Эквивалентная температура черного тела  $T_1$ , при которой КПД максимален, вычисляется из условия равенства числа фотонов в спектре преобразовываемого излучения числу фотонов, излучаемых черным телом в интервале частот  $\Delta\nu$ .

Из выражения для  $\eta_1$  следует, что КПД преобразования лазерного излучения фотоэлектрическим преобразователем, ширина запрещенной зоны которого точно соответствует частоте преобразовываемого излучения, может достигать  $\sim 70\%$  при той освещенности, которую создает Солнечное излучение в этой области спектра. При увеличении интенсивности излучения до кратностей концентрации оптического излучения  $k = 5 \div 8$  КПД увеличивается, достигая значений, близких к  $100\%$ , при условии обеспечения термического режима фотоэлектрического преобразователя [4,6-8, 9]. КПД приемника  $\eta_2$  может достигать  $95 \div 98\%$  из-за использования замкнутой конструкции с полностью зеркальной внутренней поверхностью. Таким образом, общий КПД в оптроне может достигать  $\eta \approx 0,7 \cdot \eta_1$  с учетом того, что значение  $\eta_2$  близко к единице.

Максимальная мощность электрического тока на выходе оптрона [5, 6,]

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

где  $N$  число фотонов в потоке лазерного излучения поступающего на батарею солнечных элементов.

Выходной ток выходное напряжение оптрона определяются числом фотоэлектрических элементов батареи соединенных последовательно и параллельно [10].

Для преобразования оптического излучения твердотельных или полупроводниковых лазеров излучающих другие длины волн могут быть использованы фотопреобразователи из полупроводниковых соединений на основе химических элементов III и V групп периодической системы, у которых величина  $E_g$  изменяется в широких пределах [8, 9]. Эти материалы имеют одинаковую кристаллическую структуру, но расстояние между атомами III и V групп меняются

от соединения к соединению. Это вызывает незначительное расхождение между параметрами кристаллических решеток пленки и подложки, имеющих неодинаковый состав. На рис. 3.1 изображены кривые, характеризующие взаимосвязь между шириной запрещенной зоны различных полупроводников и степенью несоответствия параметров кристаллических решеток этих материалов и подложки из *GaAs*. Видно, что посредством создания трехкомпонентных соединений на основе химических элементов III и V можно получить полупроводник с любой требуемой шириной запрещенной зоны, причем соединения *AlGaAs* и *GaAsP* привлекают внимание как широкозонные материалы, а соединения *GaInAs* и *GaAsSb* привлекают внимание как узкозонные.

Рассогласование между параметрами кристаллических решеток не влияет на КПД преобразования оптического излучения, если граница раздела материалов отдельных элементов, у которых могут быть не согласованы параметры кристаллических решеток, расположены вне зоны перехода. В том же случае, когда это не возможно, используются полупроводниковые материалы с одинаковыми параметрами кристаллических решеток. Это может быть достигнуто путем использования четырехкомпонентных широкозонных полупроводников *AlGaAsSb* или *AlGaInAs*, созданных на поверхности элементов, на основе узкозонных материалов *GaInAs* или *GaAsSb*. Стоимость же последних значительно выше стоимости трехкомпонентных материалов.

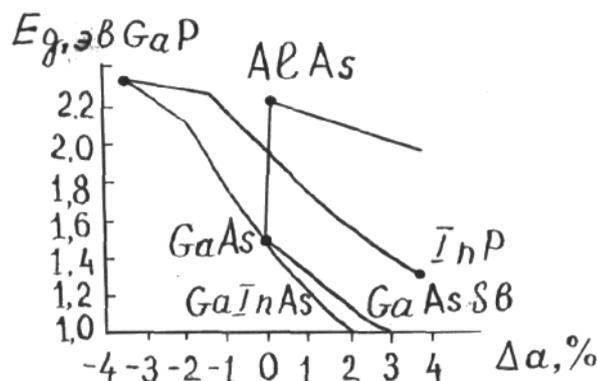


Рис.2. Кривые, характеризующие взаимосвязь между шириной запрещенной зоны  $E_g$  полупроводниковых соединений на основе химических элементов III и V групп периодической системы и степенью несоответствия  $\Delta a$  параметров кристаллических решеток этих материалов по отношению к *GaAs*[8, 9].

При этом эквивалентная температура черного тела может быть найдена из условия равенства числа фотонов в спектре излучения черного тела и рабочей частоты преобразовываемого излучения [4] :

$$\frac{4 \left( \frac{G_0}{2\pi h \nu_0} \right) \left( \frac{kT_1}{2\pi h} \right)}{2\pi h \nu_0} = \int_{\nu_0}^{\infty} \frac{\varphi(\nu) d\nu}{2\pi h \nu}$$

где  $\varphi(\nu)$  - спектральная плотность мощности преобразовываемого излучения

При использовании в качестве источника излучения в составе оптрона полупроводникового лазера SP-DHS-457-W мощностью 10 Вт, при КПД преобразования излучения лазера солнечными элементами ~85%, с учетом потерь, возникающих при передаче оптического излучения от лазера к батарее солнечных элементов, мощность электрического тока на выходе оптрона может быть ~ 8 Вт. Такая мощность на выходе оптрона достигается, если в качестве солнечных элементов использовать многослойные структуры, обеспечивающие каскадное преобразование оптического излучения. Для этих целей могут быть использованы трех- и четырехкомпонентные соединения элементов III и V групп периодической системы. Кроме того, могут быть использованы гетероструктуры с вариозной базой, когда на выходе создается широкозонное окно, соответствующее максимальной ширине спектра преобразовываемого излучения, а база имеет переменное по глубине значение  $\varepsilon_g$  (благодаря плавному изменению состава, уменьшающегося по мере углубления). Такие структуры можно получить, используя двойные, тройные и четвертные соединения на базе компонент, входящих в состав GaAs.

#### Список литературы

1. Соломатин М. Фотоэлектрические изоляторы серии PVI компании IR // Компоненты и технологии. 2012. № 5. С. 41- 44.
2. Никитин А. Оптоэлектронные реле компании International Rectifier // Новости электроники. 2009. № 12. С.17-21.
3. Кирин И.Г. Специальные радиационно устойчивые волоконно-оптические и оптоэлектронные датчики и системы. Научное издание. – М.: Университетская книга, 2008. – 148 с.
4. Кирин И.Г. Фотоэлектронные трансформаторы: монография. – М.: Университетская книга, 2013. -136 с.
5. Кирин И.Г. Оптоэлектронные трансформаторы тока. Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. 1992. N23. С. 3- 23.
6. Kirin I.G. Photovoltaic transformers for capture //Электричество. -1994. - N7. - С. 30-35.
7. Кирин И.Г. Об эффективности фотоэлектрического преобразования лазерного излучения // Интеллект. Инновации. Инвестиции. Академический журнал. – 2014. – N3. –С. 117- 121.
8. Фрааз Л.П. Усовершенствованные солнечные элементы, предназначенные для работы в системах с концентраторами излучения: Современные полупроводниковые элементы фотоэнергетики / под ред. Т.Ф. Кутмса, Дж.К. Микина. Пер. с англ. Под ред. М. М. КолтунаМ.: Мир, 1988, - С. 201-261.
9. Алферов Л. М. Андреев В. М. Гарбуров Д. З. Егоров Б. В. Ларинов В. Р. Румянцев В. Д. Федоров О. М. Высокоэффективные солнечные элементы с промежуточным преобразованием излучения, предназначенные для работы с

концентраторами светового потока // Письма в журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1987. Т. 4. – Вып. 18. – С. 1128–1130.

10. Раушенбах Г.П. Справочник по проектированию солнечных батарей. М.: Энергоатомиздат.1983г.- 357с.

## **СИСТЕМЫ ВВОДА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СВЕТОВОДЫ ПОВЫШЕННОЙ НАДЕЖНОСТИ**

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

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования**

**«Оренбургский государственный университет»**

В современной медицине все больше применяются лазерные технологии. Уникальные свойства лазерного луча позволяют выполнять ранее невозможные операции новыми эффективными и минимально инвазивными методами. Одновременно растет интерес к немедикаментозным методам лечения, включая физиотерапию с применением лазеров и лазерной диагностики [1- 4].

Современные методики применения лазеров для медицинских целей требуют возможность выбора различных параметров лазеров: режим излучения, длина волны, мощность [2, 3].

В большинстве установок для лазерной хирургии, лазерной терапии и лазерной диагностики доставка лазерного излучения осуществляется световодами. Для ввода лазерного излучения в световоды применяются специально предназначенные для этого способы и устройства. Самый распространенный способ ввода лазерного излучения в световод состоит в том, что с помощью линзы, расположенной перед световодом, уменьшается диаметр лазерного излучения и затем оно вводится в световод [5].

В этом способе ввода лазерного излучения в световод интенсивность лазерного излучения в фокусе линзы достигает значительных величин, что может привести к разрушению торца световода, если в него вводится мощное и особенно импульсное лазерное излучение. Кроме того, практическая реализация этого способа затруднена тем, что линзу необходимо закреплять в юстировочное устройство, обеспечивающее юстировку и фокусировку фокального пятна лазерного излучения и световода с микронной точностью и поддерживать фиксацию этого положения в течение длительного времени, что очень проблематично. Кроме того этот способ обладает низкой надежностью при вводе мощного многомодового импульсного лазерного излучения в световод из-за ограниченной лучевой прочности световодов и вследствие того, что в фокусе многомодового импульсного лазерного излучения возникают мощные локальные всплески интенсивного лазерного излучения разрушающие торец световода.

И соответственно задача дальнейшего совершенствования систем ввода лазерного излучения в световоды, продолжает оставаться актуальной.

Автором предложены следующие способы совершенствования такого рода систем.

Первый способ. Этот способ достигается тем, что излучение лазера непосредственно вводится в блок фоконов. Каждый из фоконов этого блока соединен одним из выходов У-ветвителя, и выводы всех У-ветвителей далее объеди-

няются в один, соединенный со световодом передающим лазерное излучение к объекту воздействия.

На рис.1 приведена структурная схема этого устройства.

Стрелками на этом рисунке показан ход световых лучей

Устройство, реализующее этот способ (рис.1), состоит из блока фоконов 2, У-ветвителей 3, каждый из фоконов соединен с входом У-ветвителя, выходы которых также через У-ветвители объединены и соединены со световодом 4 передающим лазерное излучение. Блок фоконов, У-ветвители и световод расположены последовательно друг к другу, геометрический центр блока фоконов располагается на оси лазерного луча и передняя поверхность блока фоконов перпендикулярна лазерному лучу, а диаметр блока фоконов и лазерного луча равны.

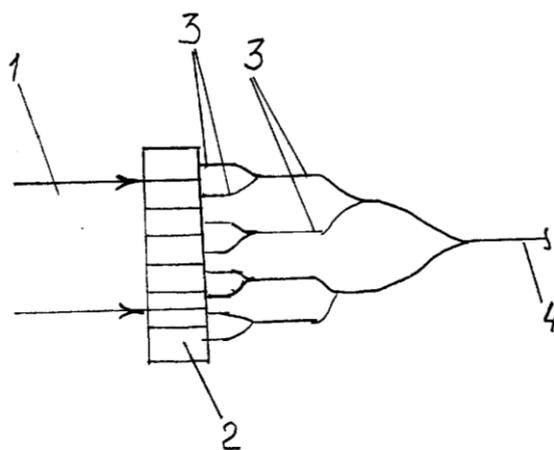


Рис.1. Структурная схема системы ввода лазерного излучения в световод с использованием блока фоконов.

1 - лазерный луч , 2 - блок фоконов , 3 - У-ветвители, 4- световод.

Система ввода лазерного излучения в световод с использованием блока фоконов, по сравнению с устройством ввода с использованием линзы фокусирующей излучение лазера на торец световода, обеспечивает более высокую надежность ввода излучения от лазера в световод. Это обусловлено тем, что диаметр лазерного луча и диаметр блока фоконов выбираются равными их диаметры существенно больше десятков микрон. Диаметр сердцевины световода и диаметр лазерного луча в фокусе линзы значительно меньше. Соответственно, в предлагаемом устройстве нет необходимости использовать стирочное устройство обеспечивающее перемещение элементов схемы ввода лазерного излучения в световод с микронной точностью с последующей фиксацией положений этих элементов в течение длительного времени с такой же микронной точностью. Кроме того оно обладает достаточно высокой надежностью при вводе мощного многомодового импульсного лазерного излучения в световод из-за того, что лазерное излучение не фокусируется на торец световода.

При практической реализации таких устройств используются, например, фоконы: длина 5 мм; диаметр 1,5 мм; числовая апертура 0,25; материал стекло ПЭГ101; У-ветвители со следующими характеристиками: коэффициент отклонения 50/50, вносимые потери  $<0,19$  (класс А), неравномерность коэффициента отклонения - 0,1 дБ, производитель НПО «ИРЭ-ПОЛЮС».

Соединение входов У-ветвителей с фоконами следующий: вход У-ветвителей расположен в штыревом разьеме (папа), на наконечнике разьема надета втулка с фоконом; посадочные поверхности наконечника и втулки выполнены с соответствующей точностью.

В качестве световода передающего лазерное излучение может быть использован, например, стандартный кварцевый световод: 125x50, NA=0,1.

Соединение выхода последнего У-ветвителя со световодом, передающим лазерное излучение, может быть выполнено сваркой или с помощью оптических разьемов.

Второй способ. В этом способе (рис.2) излучение лазера 1 стеклянными пластинками 2, установленными по ходу распространения лазерного пучка и зеркалом 3, установленным после всех стеклянных пластинок, разделяется на равные части. Каждая из выделенных таким образом частей лазерного излучения фокусируется линзами 4 и через фоконы 5, вводится в промежуточные световоды с У-ветвителями 6. Далее все промежуточные световоды объединяются в один световод 7, по которому лазерное излучение передается в нужную точку объекта. Торцы фоконов помещаются в область фокальных пятен лазерного излучения создаваемых линзами. Для этого используются юстировочные устройства, в которые закрепляются фоконы.

Линзы, фоконы и промежуточные световоды могут быть помещены в кожух 8, через который пропускается охлаждающая жидкость или газ. Подключение кожуха к системе охлаждения осуществляется через штуцеры 9.

При практической реализации устройства, используются фоконы: длина 5 мм; диаметр 1,5 мм; числовая апертура 0,25; материал стекло ПЭГ101.

Делительные пластинки выполняются из кварцевого стекла или КВесли лазер на СО<sub>2</sub>, или кварца для других лазеров, зеркало - из массивного параллелепипеда из нержавеющей стали один торец которого отполирован.

Промежуточные световоды, световод передающий лазерное излучение - стандартные, кварцевые 125x50, NA=0,1.

Соединение промежуточных световодов с фоконами осуществляется следующим образом: промежуточный световод расположен в штыревом разьеме для многомодовых световодов (папа); на наконечнике разьема надета втулка с фоконом; посадочные поверхности наконечника и втулки выполнены с соответствующей точностью.

Соединение промежуточных световодов между собой и световодом, передающим лазерное излучение – сварочное.

В качестве юстировочных устройств могут быть использованы механические микропозеры [6].

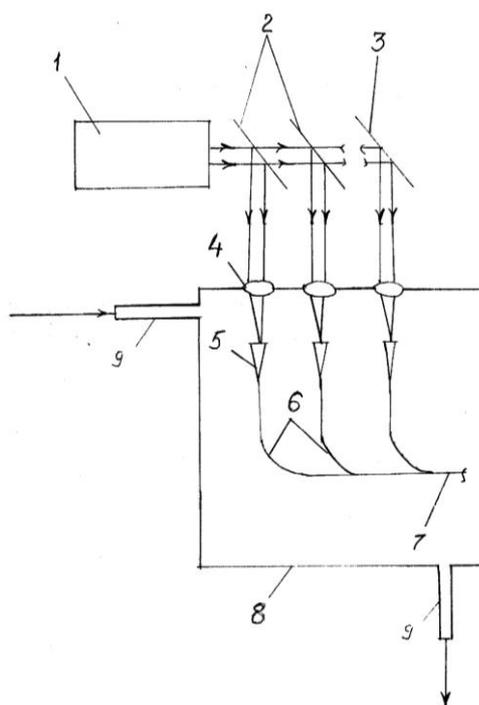


Рис.2. Структурная схема устройства ввода лазерного излучения в световод с использованием методики разделения пучка лазерного излучения на части

1 - лазер, 2 - стеклянные пластинки, 3 - зеркало, 4 - линзы, 5 - фоконы, 6 - промежуточные световоды с Y-ветвителями, 7 - световод, 8 - кожух, 9 - штуцеры для подключения к системе охлаждения.

Этот способ ввода лазерного излучения в световод и устройство для его осуществления позволяют существенно повысить надежность системы ввода мощного, импульсного, лазерного излучения в световод, сделать его более устойчивыми к воздействию мощного импульсного многомодового лазерного излучения. Это достигается за счет снижения плотности мощности лазерного излучения на торце световодов, линз и фоконов и за счет того, что излучение лазера расчленяется на части и далее фокусируется не на торец световода и на торец фокона, диаметр которого существенно больше диаметра световода. Таким образом, снижается интенсивность лазерного излучения в процессе его ввода в световод. Кроме того, повышению надежности ввода лазерного излучения способствует и то обстоятельство, что требования к точности совмещения фокального пятна и торца фокона ниже, чем фокального пятна и торца световода.

Третий способ. Этот способ представляет собой комбинацию рассмотренных выше первого и второго способа. В нем, лазерный пучок стеклянными пластинками, установленными по ходу распространения лазерного пучка и зеркалом, установленным после всех стеклянных пластинок, разделяется на равные части. Каждая из сформированных таким образом частей не фокусируется линзами в промежуточные световоды с фоконами, а направляется как в первом способе на блок фоконов. Далее каждый из фоконов этого блока соединяется одним из выходов Y-ветвителя, и затем выходы всех Y-ветвителей объединяют-

ся в один, соединенный со световодом передающим лазерное излучение к объекту воздействия.

#### Список литературы

1. Минаев В. П. Лазерные медицинские системы и медицинские технологии на их основе: учебное пособие / В. П. Минаев. - 2-е изд., испр. и доп. - Долгопрудный: Интеллект, 2017. - 352 с.:
2. Соколов А.Л., Лядов К.В., Стойко Ю.М. Эндовенозная лазерная коагуляция в лечении варикозной болезни. М., 2007.
3. Павлов С.Е. Лазерная терапия с использованием терапевтических матричных магнито-ИК-лазерных аппаратов. М., 2008.
4. Буйлин В.А. Лазерная профилактика гриппа и ОРВИ. М., 2009.
5. Белов С.И. Твердотельный лазер с оптоволоконным выводом излучения для трансмиокардиальной лазерной реваскуляризации // Медицинская техника. 2011. N 1. С. 1-7.
6. Кирилл И.Г. Комплект юстировочных устройств для лазерной техники и оптоэлектроники. Информационный листок N 70-91, Серия 47.33.33. Белгородский межотраслевой территориальный центр научно-технической информации и пропаганды. Белгород, 1981 г.

# УНИВЕРСИТЕТСКАЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ШКОЛА: АНАЛИЗ СОСТОЯНИЯ И НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ

Кучеренко М.А., канд.пед.наук

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

Университетская физико-математическая школа (далее:УФМШ) как структурное подразделение физического факультета, является, в соответствии с типологией образовательных организаций<sup>1</sup>, организацией дополнительного образования и имеет в качестве основной цели своей деятельности образовательную деятельность по дополнительным общеобразовательным программам углубленного изучения математики, физики, информатики и программирования. Школа, созданная по инициативе заведующего кафедрой физики, докт. физ.-мат. наук, профессора Н.А. Манакова и будущего ее директора, доцента кафедры физики А.А. Чакака, начала свою работу в августе 2006 г., первоначально как университетская физическая школа, а потом, с февраля 2012 г., как университетская физико-математическая школа, ориентированная на новые образовательные задачи и функции, с расширенным штатом университетских преподавателей и школьников. УФМШ стала продолжателем традиций учебной, исследовательской и профориентационной работы с учащимися 9-11 классов школ г. Оренбурга, заложенных и развитых в начальной инженерной школе (НИШе) Оренбургского политехнического института с 1989 по 2000 г.г..

В данной работе мы проанализируем особенности образовательной деятельности школы за период с 2018 по 2021 г.г.в контексте ключевых функций и задач, заявленных в положении об этом структурном подразделении<sup>2</sup>, наметим основные пути дальнейшего ее развития на ближайший, 2021/2022 учебный год. Базой для анализа являются, в том числе, результаты письменного опроса учащихся 8-11 классов УФМШ 2020/2021 учебного года.

Набор в УФМШ-ключевой вопрос ее жизнедеятельности. Данные по набору учащихся за последние три года, в соответствии с заключенными договорами на оказание платных образовательных услуг в школе, приведены в таблице 1. Обратим внимание на то, что набор учащихся проходит сегодня в условиях существования серьезной конкурентной среды, представленной не только системой дополнительной подготовки в массовой и профильной школах Оренбурга, но различными Центрами подготовки к ОГЭ и ЕГЭ, разветвленной сетью индивидуального репетиторства и предложениями онлайн-школ. В начале 2019г. мы, как видно из таблицы, фиксировали существенный рост числа учеников, выразивших желание учиться в УФМШ. Такой рост был обусловлен уже сложившимся многолетним репутационным статусом школы, рекламной компанией, основанной на материалах страницы УФМШ сайта университета, выпуском буклета для поступающих школьников и различными информационными

<sup>1</sup> Статья 23 Федерального закона «Об образовании в Российской Федерации» (ред. от 08.12.2020)

<sup>2</sup> П.2, 3 Положения об университетской физико-математической школе: <http://www.osu.ru/doc/635/kafedra/6212>

ми мероприятиями с учителями физики различных школ г. Оренбурга. В частности, на заседании городского методического объединения учителей физики в апреле 2019г. был представлен доклад «Университетская физико-математическая школа как форма дополнительного образования» (автор - канд. пед. наук, доцент кафедры физики и методики преподавания физики, директор УФМШ М.А. Кучеренко) с детальным изложением особенностей организации образовательного процесса, возможностей преподавательского корпуса и материальной базы школы и учебных лабораторий физического факультета и факультета математики и информационных технологий для обеспечения углубленного изучения школьниками математики, физики, информатики и программирования.

Таблица 1- Информация по набору в УФМШ за период 2018-2020г.г.

Учебный год	Количество учащихся на начало первого полугодия	Количество учащихся на конец второго полугодия	Количество учебных групп по классам и по предметам (М-математика, МО-математика олимпиадная; Ф-физика, ФО-физика олимпиадная; ИиП-информатика и программирование)			
			8	9	10	11
2018-2019	59	51	1-М 1-Ф	1-М	1-Ф 1-М	1-М 1-Ф
			1-ИиП		1-ИиП	
2019-2020	105	81	1-М 1-Ф	1-М 2-Ф	1-М 1-МО 1-Ф 2-ФО	1-М 2-Ф
			1-ИиП		1-ИиП	
2020-2021	55	Учебный год не завершен	1-М	1-М 2-Ф	1-М 1-Ф	2-Ф

В 2019/2020 учебном году на основании обработки заявок для поступления в УФМШ было принято решение открыть на первое полугодие учебного года олимпиадные группы по математике и физике в 9-11 классах, в которых начали работу канд. физ.-мат.наук, доцент кафедры физики и методики преподавания физики (далее: ФиМПФ) В.В. Гуньков, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры радиофизики и электроники (далее: РФиЭ) А.П. Русинов, канд. физ.-мат. наук, старший преподаватель кафедры биофизики и физики конденсированного состояния М.Р. Арифиллин.

Вместе с тем, на конец вышеуказанного учебного года не удалось полностью сохранить контингент учащихся в УФМШ. Так 24 (23%) школьника по разным причинам были отчислены за период «сентябрь 2019г. - март 2020г.»; из оставшихся 81-го только 27% полностью завершили учебный год, 73% не включились по разным причинам в дистанционное обучение после объявления периода действия самоизоляции в марте 2019г.. Главными причинами описанной ситуации, на наш взгляд, являются:

1. Смена части преподавательского состава школы и связанная с ней необходимость длительного периода адаптации для новых субъектов образовательной деятельности - университетских и приглашенных в университетскую образовательную среду преподавателей. Новым сотрудникам необходимо было освоить и структурировать содержание обучения, принять или сформулировать новые учебные цели, активизировать собственные мотивационно-волевые ресурсы, переориентироваться с вузовских особенностей на психологические особенности и образовательные потребности обучающихся раннего подросткового и старшего школьного возраста.

2. Отмена, в связи с пандемией по коронавирусу, основного государственного экзамена по математике, физике, информатике и программированию в 9-ом классе основной школы.

3. Объективная техническая (отсутствие у участников учебной деятельности стартового набора: компьютерной техники с подключением к Интернету; веб-камеры; микрофона) и психологическая неподготовленность преподавателей и школьников к дистанционному обучению с новыми моделями и формами образования, предложенными, в частности, в источниках [1],[2] и [3].

Касательно третьей причины следует заметить, что преподаватель математики-ведущий инженер кафедры геометрии и компьютерных наук Т.А. Фомина сумела в короткие сроки освоить образовательные возможности платформы ZOOM для разнообразной по содержанию и форме (чат-занятие; варианты форум-занятия) совместной работы с теми учениками 8-9-х классов, которые были готовы к совершенно новой для них, серьезной дистанционной работе. Содержание и способы учебной деятельности, предложенные преподавателем на онлайн-конференциях ZOOM, позволили учащимся не только получить новые и углубить уже сформированные математические знания, но и стали хорошим подспорьем для развития внимательности, организованности, умения организовывать и регулировать время и собственную учебную работу. Учащиеся, изучающие математику и физику в 11-х классах УФМШ (преподаватели Е.И. Аболончикова и М.А.Кучеренко) и готовящиеся к единому государственному экзамену по этим предметам, включились из-за переноса сроков ЕГЭ в дистанционное обучение на базе платформы ZOOM и программного обеспечения Skype позже и завершили его в конце июня — начале июля, перед самым началом экзаменационных испытаний. Заметим также, что физический факультет Оренбургского государственного университета создал для абитуриентов, выбравших физику для единого государственного экзамена в 2020 году, ютуб-канал «Физика, ОГУ». Сотрудники факультета, являющиеся одновременно преподавателями УФМШ — доценты кафедры ФиМПФ В.В. Гуньков, М.А. Кучеренко и доцент кафедры РФиЭА.П. Русинов — еженедельно, с апреля 2020 года, готовили и размещали на канале видеоконсультации различного формата по заданиям базового, повышенного и высокого уровня сложности единого государственного экзамена (далее: ЕГЭ) по физике. По отзывам выпускников УФМШ 2019/2020 учебного года, созданный ютуб-канал стал эффективным и своевременным средством самостоятельной учебной работы, допол-

нил возможности образовательной платформы ZOOM для подготовки к итоговому государственному экзамену по физике. Выпускники 2019/2020 учебного года, несмотря на сложности периода самоизоляции и освоения новых форм дистанционного обучения, сдали единый государственный экзамен по физике и математике на средний тестовый балл 70. Для нас важно, что более 60 % выпускников, сдававших физику, показали результаты в интервале 66-93 тестовых баллов и стали студентами физического, геолого-географического и архитектурно-строительного факультетов, Аэрокосмического института и факультета математики и информационных технологий Оренбургского государственного университета. Часть выпускников продолжила образование в МФТИ, в МГТУ им. Н.Э. Баумана, Московском авиационном институте, Санкт-Петербургском политехническом университете и Самарском национальном исследовательском центре им. С.П. Королева.

Предметом тревоги для нас сегодня является не только сохранение контингента школьников, но и преемственность в их обучении, ведь только 21,5% учащихся 8-10-х классов 2019/2020 учебного года продолжили обучение в школе, а в 2020/2021-ом - всего 12,3%. Все школьники 11-го класса в группе изучения физики нынешнего учебного года - ученики новые. В данных условиях путями решения проблемы преемственности в обучении, по нашему мнению, могут стать следующие меры:

1. Большинство преподавателей понимают, что университетская физико-математическая школа-это не бизнес-проект, а способ реализации, прежде всего, собственных потребностей профессионального развития в дополнительной к вузовской образовательной среде, возможности ясного понимания проблем на переходе «школа-вуз» и обеспечения подготовленных абитуриентов для естественно-научных и технических факультетов университета в соответствии с известными, заявленными в [4] или модифицированными моделями профориентационной работы. Однако, очевидно, что одним из факторов поддержки стабильности коллектива высокопрофессиональных преподавателей должна быть налаженная и устойчивая система мотивации, обеспеченная использованием, например: премиального фонда школы; балльно-рейтинговой системы университета; привлечения к освоению предмета учащихся со специальными способностями; создания усовершенствованной, современной учебно-лабораторной и компьютерной базы школы. Вместе с тем, в силу специфики самофинансирования УФМШ, появление премиального фонда школы напрямую зависит от наполняемости учебных групп, при критическом максимуме в 10 человек. На сегодня этот показатель в большинстве групп практически отсутствует.

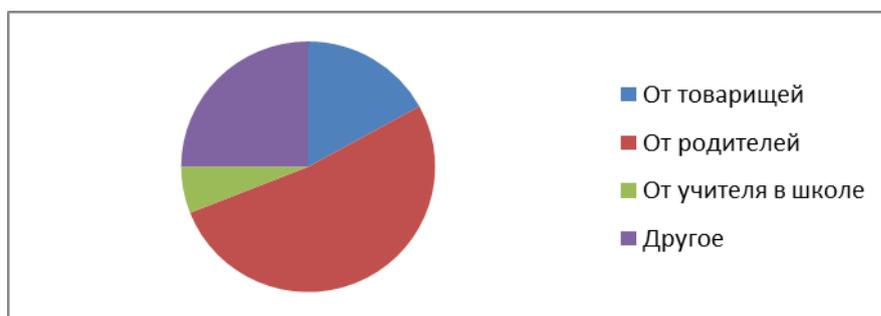
2. В своей учебной деятельности школа вынуждена переключить акцент с систематического, фундаментального изучения предметов по 3-х - 4-х-годовалым, сквозным образовательным программам на программы подготовки 9-ти и 11-тиклассников к основному и единому государственным экзаменам по математике и физике. Родители и учащиеся, поступающие в школу, указывают именно на такую образовательную потребность. А это значит, что следует модернизировать образовательные программы для всех без исключения параллель-

лей (8-11 классы) в контексте целей, задач и ожидаемых результатов. Необходимо научиться проектировать учебные занятия с применением электронных и дистанционных технологий, на основе собственных методических разработок, с четкой ориентацией на тестовые баллы в интервале 61-79 (средний результат в одних группах) и 81-100 (высокий результат в группах других). Дифференциация в обучении, заметим, также возможна при наличии критической наполняемости групп в 10 человек.

3. Комплектование фонда самостоятельно разработанных учебно-методических комплексов по типу материалов заочной физико-технической школы МФТИ. За годы существования школы ее преподавателями уже создан фонд учебных изданий (учебно-методических пособий и методических указаний) по различным разделам углубленного курса физики средней школы (авторы: канд.пед.наук, доцент кафедры общей физики М.Н. Перунова, доцент кафедры ФМПФ А.А. Чакак, д-р физ.-мат.наук, профессор, научный консультант УФМШ Н.А. Манакон). Мы понимаем, что такая работа должна быть продолжена. Пополнение фонда не может быть массовым, оно специфично и возможно только при стабильности коллектива и приемлемой кафедральной и другой нагрузке преподавателей, исключаяющей, широкую многозадачность профессиональной деятельности педагогов. Добавим к этому, что большая часть преподавателей УФМШ участвует в работе с учителями математики и физики г.Оренбурга и Оренбургской области на факультете повышения квалификации преподавателей ОГУ.

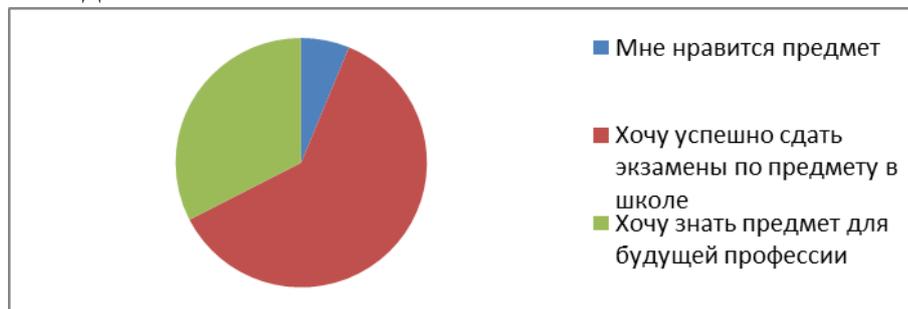
Далее мы проанализируем образовательные потребности учащихся УФМШ 2020/2021 учебного года по результатам письменного опроса, включающего вопросы открытого и закрытого типа.

На вопрос анкеты «Как Вы узнали об Университетской физико-математической школе?» были получены варианты, представленные на рисунке 1. Укажем на то, что в качестве источников информации школьники называли и своих товарищей, и других, кроме родителей, членов семьи, и самостоятельный выход на страницу УФМШ на сайте университета. Отсутствие очной рекламной компании закономерно обеспечило лидерство родителей как главного источника информации о школе и явную, в этом ключе, аутсайдерную позицию учителя школы.



*Рисунок 1-Источники информации*

На рисунке 2 приведены ответы учащихся на вопрос «Почему Вы пришли учиться в УФМШ?», выявляющие невысокую предметную направленность слушателей и, вместе с тем, отчетливый, осознанный выбор ими своей будущей профессиональной деятельности.



*Рисунок 2-Мотивация школьников*

Вместе с тем, можно заключить, анализируя данные опроса по участию школьников в олимпиадах различного уровня, что при отсутствии ярко выраженного интереса к математике и физике, они достаточно активны в олимпиадной деятельности. Так в олимпиадах школьного уровня приняли участие в разные годы учебы 79% поступивших в УФМШ, муниципального-17%, регионального-12, во Всероссийской-1 школьник. Следовательно, наши сегодняшние ученики ориентированы на достижение учебных результатов и понимают их значимость для своей дальнейшей профессиональной жизни. Вышеперечисленное вполне коррелирует с тенденциями, изложенными в [5],[6],[7].

Кроме олимпиадной деятельности (33% участников-опрашиваемых) - одного из способов интеллектуального и творческого самоопределения, учащиеся выразили желание заниматься в УФМШ проектной (6%) и учебно-исследовательской работой с преподавателями университета (27%). Данный факт-повод для организационных решений в будущем учебном году.

При анкетировании важно было выявить точки комфорта и антикомфорта учащихся для дальнейшего совершенствования сложившейся образовательной среды. Для нас существенно, в этой связи, что школьники приняли главную задачу обучения – освоение предметного содержания на повышенном и высоком уровне сложности: на вопрос «Что Вам нравится в УФМШ?» 73% выделили «углубленное изучение предмета». На общение со сверстниками - ведущую деятельность старшего школьного возраста, указали только 10% девяти- и одиннадцатиклассников, на возможность приходить для занятий в университет-23%. Важно, что почти 55% учеников УФМШ на сегодняшний день отметили, что они не стали бы ничего менять в работе школы, предлагая при этом дополнить учебные занятия предварительными индивидуальными консультациями для разбора трудных домашних заданий, включить пробные ОГЭ и ЕГЭ для выявления наличного уровня знаний, умений и понимания учебной информации.

Отвечая на вопрос анкеты «Планируете ли Вы учиться в УФМШ в следующем учебном году?», только 17% учащихся 8-10 классов ответили утвердительно, большая же часть в середине учебного года (54%) пока находится в состоянии совместного с родителями будущего общего выбора. Очевидно, что этот выбор для девятиклассников будет обусловлен все более набирающая

популярности возможность получения среднего и начального профессионального образования в колледже, с ускоренной социальной адаптацией и психологическим развитием личности.

Определяя стратегические задачи, стоящие перед университетской физико-математической школой на ближайший учебный год, мы обратились к опыту лучших в России специализированных учебно-научных центров (СУНЦ), созданных в 1963 г. и позднее в Новосибирске, Москве, Киеве, Ленинграде и Екатеринбурге в целях отбора и обучения молодежи, проявляющей интерес к изучению естественных и точных наук. К таким центрам относятся СУНЦ: Новосибирского государственного университета им. М.А. Лаврентьева; Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова-школа А.Н. Колмогорова; Санкт-Петербургского государственного университета - Академическая гимназия им. Д.К. Фаддеева; Московского государственного технического университета им. Н.Э. Баумана. Нельзя не учитывать и многолетний опыт работы заочной физико-технической школы при Московском физико-техническом институте.

К стратегическим задачам, которые, по нашему мнению, могут быть вынесены для обсуждения на заседание ученого совета физического факультета, исходя из сегодняшних профессиональных возможностей преподавателей УФМШ и квалификации сотрудников физического факультета и факультета математики и информационных технологий, имеющейся учебной и научно-исследовательской базы, мы относим следующие:

1. Создание в УФМШ физико-математического и IT-профиля обучения, дополняющих группы подготовки к ОГЭ и ЕГЭ и обеспечивающих углубленное обучение школьников точным дисциплинам по программам повышенного и высокого уровня сложности.

2. Организация учебных спецкурсов(принцип «знание из первых рук») ведущих исследователей Центра лазерной и информационной биофизики (директор ЦЛИБФ, д-р физ.-мат.наук, профессор М.Г. Кучеренко ) и Института микро- и нанотехнологий (директор института МиНТ, д-р физ.-мат.наук, профессор С.Н. Летута).

3. Обеспечение индивидуальной траектории подготовки одаренных школьников посредством привлечения их к работе в научно-исследовательских лабораториях физического факультета.

4. Внедрение в физико-математический и IT-профили обучения вузовской системы контроля в виде сессий с письменными и устными экзаменами.

5. Разработка налаженной системы мотивации преподавателей и обучающихся в Университетской физико-математической школе.

Безусловно, реализация данной группы задач невозможна без понимания важности «общего дела» всеми субъектами образовательного процесса, без обеспечения финансовой составляющей деятельности тех, кто осознанно может и будет готовить задел для дальнейшего развития физико-математического и технического образования и науки в Оренбургской области.

### Список литературы

1. Днепровская, Н.В., Шевцова, И.В. Открытые образовательные ресурсы и цифровая среда обучения /Н.В. Днепровская, И.В. Шевцова // Высшее образование в России.-2020.-№12.- С. 144-155.
2. Афанасьев, А.Н., Егорова, Т.М. Современные тенденции развития электронного образования /А.Н. Афанасьев, Т.М. Егорова //Электронное обучение в непрерывном образовании.-2017.-№1.- С. 205-211.
3. Методические рекомендации по реализации образовательных программ с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий[Электронный ресурс] //Вестник образования. Режим доступа: <https://vestnik.edu.ru/uploads/files/8908eca5a881878be3e26d5c558cd1d7.docx>
4. Овсиенко, Л.В, Зимина, И.В. Модель профориентационной работы в вузе в контексте непрерывного образованияобучения /Л.В. Овсиенко, И.В. Зимина // Высшее образование в России.-2020.-№12.- С. 134-143.
5. Болотов, В.А., Седова, Е.А., Ковалева, Г.С.Состояние математического образования в РФ: общее среднее образование (аналитический обзор) /В.А. Болотов, Е.А. Седова, Г.С. Ковалева //Проблемы современного образования.-2012.-№6.- С. 23-39.
6. Андреева, Н.Д. Проблемы, недостатки и достоинства естественнонаучного образования российских школьников /Н.Д. Андреева //Известия ДПГУ.-2014.-№3.-С. 90-94.
7. Основные результаты международного исследования качества математического и естественнонаучного образования TIMSS: Аналитический отчет/М.Ю. Демидова и др.-М.: МАКС ПРЕСС.-2013.-154 с.

# СТРУКТУРА АДСОРБИРОВАННОГО СФЕРОИДАЛЬНОЙ НАНОЧАСТИЦЕЙ ОПУШЕЧНОГОСЛОЯ ИЗ ГАУССОВОЙ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОЙ ЦЕПИ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор  
Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент

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

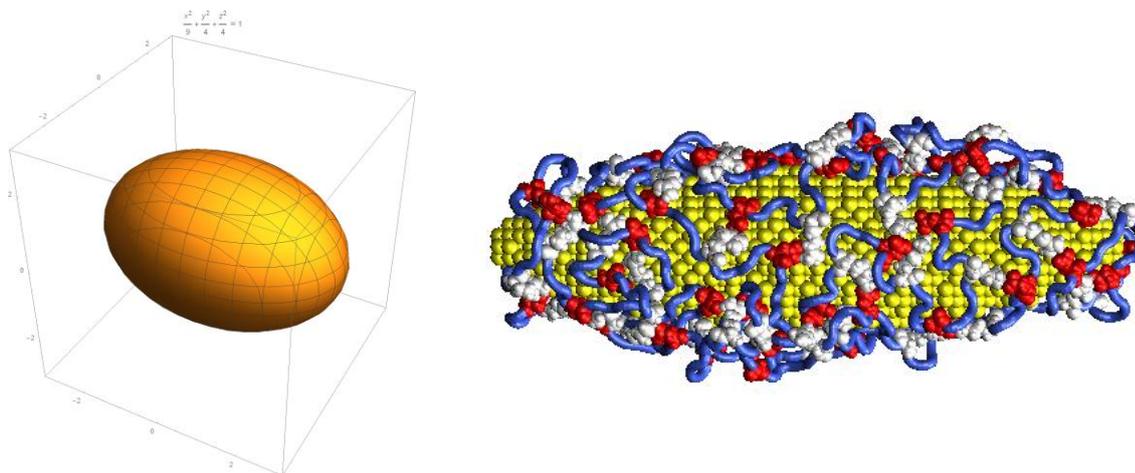
В ряде наших предыдущих работ было осуществлено построение математических моделей формирования конформационных перестроек адсорбированной на сферической наночастице или нанопроволоке макроцепей полиамфолита и полиэлектролита, вызванных распределенными электрическими зарядами на поверхностях нанотел, поляризованных внешним электрическим полем. Полимерные молекулы представлялись идеальными гауссовыми цепями без объемных взаимодействий, но учитывалось ван-дер-ваальсово притяжение звеньев макромолекулы к поверхности адсорбента. Помимо аналитического подхода были проведены МД-расчеты ряда полипептидов в коллоидных растворах золотых (серебряных) наночастиц или наностержней. В обоих случаях проявлялась геометрическая специфика формы адсорбента, в том числе и такая как кривизна его поверхности.

В данной работе будет осуществлено дальнейшее изучение этого вопроса. Вместо сферических наночастиц и нанопроволок будут исследованы свойства сфероидальных наночастиц, т.е. частиц, имеющих форму вытянутых или сплюснутых эллипсоидов вращения. Очевидно, что такие объекты будут занимать промежуточное положение между цилиндром и сферой, поскольку характеризуются двумя конечными радиусами кривизны. То, что конформационная структура адсорбированных макроцепей будет зависеть от особенностей формы частиц, на это указывает особый вид дифференциального оператора, определяющего основное уравнение для конформационной функции гауссовой макроцепи, моделирующей полимерную молекулу, размещенную в растворителе вблизи криволинейной поверхности адсорбента.

Это дифференциальное уравнение – уравнение Гроссберга-Хохлова[1] для конформационной функции  $\psi(\mathbf{r})$  гауссовой макроцепи имеет вид

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

где  $a$  – размер звена цепи,  $kT$  – энергия теплового кванта. В отсутствие адсорбирующего потенциала ( $V=0$ ) уравнение (1) принимает вид уравнения на собственные значения оператора свободной диффузии, или уравнения Гельмгольца для области вне сфероида.



**Рис. 1а.** Вытянутый электронейтральный эллипсоид вращения и равновесная конформация полиамфолитного полипептида  $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ , полученная МД-моделированием на поверхности золотого незаряженного сфероида

В вытянутых сфероидальных координатах уравнение (1) принимает вид [2]

$$\nabla^2 \psi(\xi, \eta) + \frac{6d^2 \varepsilon}{4a^2 kT} \psi(\xi, \eta) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right] + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + c^2 (\xi^2 - \eta^2) \psi(\xi, \eta) = 0, \quad \left( c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}} \right), \quad (2)$$

где  $d$  – фокусное расстояние. В сплюснутых сфероидальных координатах

$$\nabla^2 \psi(\xi, \eta) + \frac{6d^2 \varepsilon}{4a^2 kT} \psi(\xi, \eta) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\xi^2 + 1) \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right] + \frac{\xi^2 + \eta^2}{(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + c^2 (\xi^2 + \eta^2) \psi(\xi, \eta, \varphi) = 0, \quad \left( c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}} \right). \quad (3)$$

Решения уравнений (2) и (3) могут быть представлены в виде произведений

$$\psi(\xi, \eta, \varphi) = F(\xi)S(\eta)\exp(\pm im\varphi). \quad (4)$$

После разделения переменных для вытянутого сфероида получаем

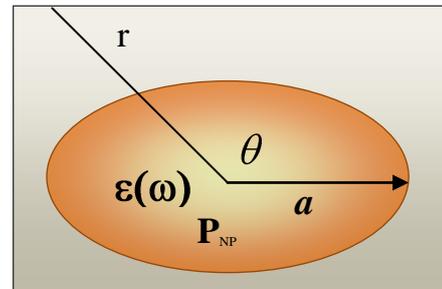
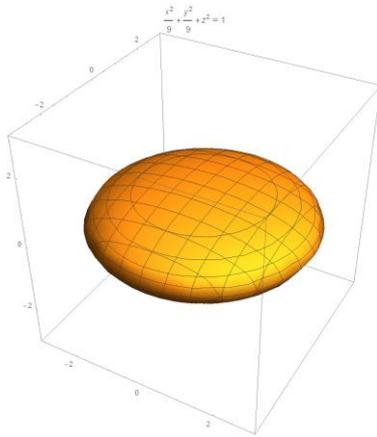
$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} F_{ml}(c, \xi) - \left[ \lambda_{ml} - c^2(\xi^2 - 1) + \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)} \right] F_{ml}(c, \xi) = 0. \quad (4a)$$

$$\frac{d}{d\eta}(1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S_{ml}(c, \eta) + \left[ \lambda_{ml} + c^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)} \right] S_{ml}(c, \eta) = 0. \quad (4б)$$

В осесимметричном случае  $m=0$ , который более соответствует реальным конформациям макроцепи, уравнения для вытянутого сфероида принимают вид

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} F_{0l}(c, \xi) \right] - [\lambda_{0l} - c^2(\xi^2 - 1)] F_{0l}(c, \xi) = 0, \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}}$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S_{0l}(c, \eta) \right] + [\lambda_{0l} + c^2(1 - \eta^2)] S_{0l}(c, \eta) = 0.$$



**Рис. 16.** Сплюснутый эллипсоид вращения, его параметры и соответствующая система координат.

В случае сплюснутого сфероида уравнение для соответствующей конформационной функции после разделения переменных распадается на два следующих

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} F_{ml}(c, \xi) \right] - \left[ \lambda_{ml} - c^2(\xi^2 + 1) - \frac{m^2}{(\xi^2 + 1)} \right] F_{ml}(c, \xi) = 0. \quad (5a)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S_{ml}(c, \eta) \right] + \left[ \lambda_{ml} - c^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)} \right] S_{ml}(\eta) = 0. \quad (5б)$$

Уравнения для осесимметричных функций сплюснутого сфероида вращения, т.е. при  $m=0$

$$\frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} F_{0l}(c, \xi) \right] - [\lambda_{0l} - c^2(\xi^2 + 1)] F_{0l}(c, \xi) = 0, \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}}$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S_{0l}(c, \eta) \right] + [\lambda_{0l} - c^2(1 - \eta^2)] S_{0l}(\eta) = 0 .$$

Параметры и характеристики эллипса. Фокусы  $(ae, 0)$ ,  $(-ae, 0)$ .  $b = a\sqrt{1 - e^2}$ .

Эксцентриситет  $e = \sqrt{1 - b^2 / a^2}$ . Фокальные радиусы  $r_1 = a + ex$ ,  $r_2 = a - ex$ ,  $r_1 + r_2 = 2a$ . Уравнения эллипса в полярной системе координат и системе координат, связанной с фокусом

$$\rho^2 = \frac{b^2}{1 - e \cos^2 \theta} = \frac{a^2(1 - e^2)}{1 - e \cos^2 \theta}, \quad r = \frac{p}{1 + e \cos \theta}, \quad p = b^2 / a.$$

Угловые сфероидальные функции задаются в виде ряда [2]

$$S_{ml}(c, \eta) = \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) P_{m+r}^m(\eta), \quad (6)$$

где присоединенные полиномы Лежандра  $P_l^m(\eta)$  удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} P_l^m(\eta) \right] + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] P_l^m(\eta) = 0$$

Другая форма записи удобна для использования при малом параметре  $c$

$$S_{ml}(c, \eta) = P_l^m(\eta) + \sum_{k=1}^{\infty} c^{2k} [S(\eta)]_k \quad (7)$$

$$\lambda_{ml} = l(l+1) + \sum_{k=1}^{\infty} c^{2k} [\lambda]_{2k}, \quad [\lambda]_2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{(2m-1)(2m+1)}{(2l-1)(2l+3)} \right]$$

$$[S(\eta)]_k = d_{l-m}^{ml}(c) \sum_{r=l-m-2k \geq 0}^{l-m+2k} [d_r]_k P_{m+r}^m(\eta)$$

*Радиальная вытянутая сфероидальная функция*

Могут быть использованы вытянутые радиальные функции двух родов

$$\begin{aligned}
F_{ml}(c, \xi) &= \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} \right]^{-1} \times \\
&\times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)! i^{r+m-l}}{r!} J_{m+r+1/2}(c\xi), \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}} \\
F_{ml}^{(3)}(c, \xi) &= \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} \right]^{-1} \times \\
&\times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)! i^{r+m-l}}{r!} H_{m+r+1/2}^{(1)}(c\xi), \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}}
\end{aligned}$$

Поведение радиальных сфероидальных функций при  $|c| \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
F_{ml}(c, \xi) &= \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} J_{m+r+1/2}(c\xi) + O(c^2), \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}} \\
F_{ml}^{(3)}(c, \xi) &= \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} H_{m+r+1/2}^{(1)}(c\xi) + O(c^2), \quad c = i \frac{d}{a} \sqrt{\frac{3|\varepsilon|}{2kT}}
\end{aligned}$$

Поведение радиальных сфероидальных функций при  $|c| \gg 1$ .

$$F_{ml}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} J_m \left( c\sqrt{\xi^2 - 1} - \frac{2(l-m)+1}{2} \operatorname{arctg} \sqrt{\xi^2 - 1} \right) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right],$$

Подобно тому, как элементарные функции связаны с функциями мнимого аргумента

$$\operatorname{sh} x = -i \sin(ix), \quad \sin(x) = -i \operatorname{sh}(ix), \quad \operatorname{ch} x = \cos(ix), \quad \cos(x) = \operatorname{ch}(ix),$$

цилиндрические функции мнимого аргумента выражаются через функции Бесселя и Ханкеля

$$\begin{aligned}
I_\nu(x) &= \exp\left(-\frac{\pi}{2}\nu i\right) J_\nu(ix), \quad K_\nu(x) = \frac{\pi i}{2} \exp\left(\frac{\pi}{2}\nu i\right) H_\nu^{(1)}(ix), \\
H_\nu^{(1)}(x) &= \frac{i}{\sin(\pi\nu)} \left[ J_\nu(x) \exp -i\pi\nu - J_{-\nu}(x) \right].
\end{aligned}$$

Это дает возможность записать вытянутые радиальные сфероидальные функции через монотонно изменяющиеся функции Бесселя мнимого аргумента, удобные для построения решения краевой задачи.

Осесимметричное решение краевой задачи.

Для слоя  $2a/d \leq \xi \leq 2(a + \delta r_0)/d$  и снаружи от него, т.е. при  $\xi > 2(a + \delta r_0)/d$  решение уравнения (1) для конформационной функции макроцепи может быть записано в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_l^{\infty} [A_l F_{0l}^{(1)}(c, \xi) + B_l F_{0l}^{(3)}(c, \xi)] S_{0l}(c, \eta), \quad 2a/d \leq \xi \leq 2(a + \delta r_0)/d \\ \sum_l^{\infty} C_l F_{0l}^{(3)}(c, \xi) S_{0l}(c, \eta), \quad \xi > 2(a + \delta r_0)/d \end{array} \right. \quad (8)$$

При этом граничные условия на поверхности сфероида и условие сшивки решений в точке разрыва первой производной определяются выражениями

$$\begin{aligned} A_l F_{0l}^{(1)}(c, 2a/d) + B_l F_{0l}^{(3)}(c, 2a/d) &= 0, & \xi_a &= 2a/d \\ A_l F_{0l}^{(1)}(c, 2(a + \delta r_0)/d) + B_l F_{0l}^{(3)}(c, 2(a + \delta r_0)/d) &= \\ = C_l F_{0l}^{(3)}(c, 2(a + \delta r_0)/d) & & \xi_{a+\delta} &= 2(a + \delta r_0)/d \end{aligned}$$

Коэффициенты  $B_l$ ,  $C_l$  и уравнение для собственных значений имеют вид

$$B_l = -\frac{F_{0l}^{(1)}(c, 2a/d)}{F_{0l}^{(3)}(c, 2a/d)} A_l, \quad C_l = \left[ 1 - \frac{F_{0l}^{(3)}(c, 2a/d) F_{0l}^{(1)}(c, 2(a + \delta r_0)/d)}{F_{0l}^{(1)}(c, 2a/d) F_{0l}^{(3)}(c, 2(a + \delta r_0)/d)} \right] B_l$$

$$F_{II}'(2(a + \delta r_0)/d) - F_{II}'(2(a + \delta r_0)/d) = -\frac{3\alpha}{2a^2 kT} \cdot \frac{F_{II}(2(a + \delta r_0)/d)}{(2(a + \delta r_0)/d)^2 + 1}.$$

**Молекулярно-динамическое моделирование конформаций полипептида на поверхности заряженного и поляризованного вытянутого золотого сфероида**

Было произведено молекулярно-динамическое моделирование (МД-моделирование) для полиамфолитных и однородно заряженных полипептидов на поверхности вытянутого золотого сфероида с малыми полуосями  $a=c=1.5$  нм и большой полуосью  $b$ , длиной  $b$  нм.

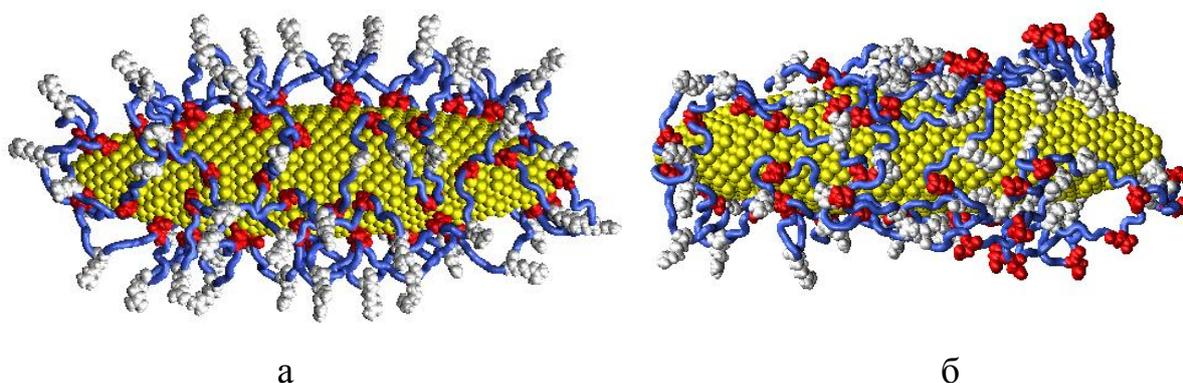
Распределения поверхностной плотности  $\square_Q(x, y, z)$  сфероида с зарядом  $Q$  и плотности  $\square_P(x, y, z)$  сфероида, поляризованного во внешнем однородном поле, направленном вдоль большой полуоси определены выражениями [3]:

$$\sigma_Q = \frac{Q}{4\pi a^2 b \sqrt{\left(\frac{x^2 + z^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4}\right)}}, \quad \sigma_P = \frac{\sigma_{\max} y}{b^2 \sqrt{\left(\frac{x^2 + z^2}{a^4} + \frac{y^2}{b^4}\right)}}. \quad (9)$$

Большая полуось сфероида направлена вдоль оси  $y$ . Для распределения  $\sigma_Q(x,y,z)$  поверхностная плотность заряда на полюсе в 4 раза выше поверхностной плотности на экваторе с радиусом, равным длине  $a$  малой полуоси. Для распределения  $\sigma_P(x,y,z)$  максимальная плотность  $\sigma_{\max} = D_y / V$  заряда формируется на полюсе, где  $D_y$  – наведенный дипольный момент поляризованного сфероид,  $V$  – объем сфероид.

МД-моделирование проводилось с использованием программного комплекса NAMD 2.14 [4] с силовым полем CHARMM22 [5] при постоянной температуре 900 К на начальном участке траектории, а затем на конечном участке при температуре 300 К. Атомы сфероид в процессе моделирования оставались зафиксированными. Вся молекулярная система была помещена в куб, заполненный молекулами воды.

На рисунке 2 изображены конформации полиамфолитного полипептида  $(A_2DA_4RA_2)_{60}$  из 600 звеньев, полученные по результатам МД-моделирования на поверхности заряженного (рис. 2а) и поляризованного (рис. 2б) в направлении длинной полуоси сфероид (дипольный момент сфероид направлен влево). Видно, что по сравнению со стартовой конформацией, полученной по результатам МД-моделирования на поверхности незаряженного сфероид, конформационные структуры (рис. 2а и 2б) значительно отличаются.

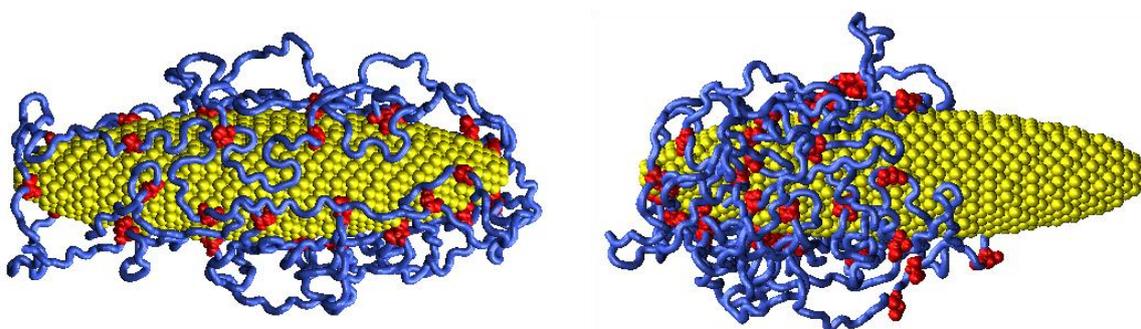


**Рис. 2.** Полиамфолитный полипептид  $(A_2DA_4RA_2)_{60}$  на поверхности вытянутого положительно заряженного сфероид (а), а также поляризованного в направлении оси вращения сфероид (б) (синяя трубка – звенья Ala, белым цветом – Arg, красным – Asp, желтым – золотой сфероид).

На поверхности положительно заряженного сфероид (рис. 2а) происходит смещение отрицательно заряженных звеньев Asp к поверхности, а положительно заряженные звенья Arg отдаляются от поверхности на максимальное расстояние. На поверхности поляризованного вдоль большой полуоси сфероид

(рис. 2б) аминокислотные остатки полипептида распределены в различных его частях по-разному. В центральной области, где атомы золота на поверхности нейтральны или несут небольшой заряд, заряженные звенья разного знака адсорбированы на поверхности сфероиды. По мере удаления к разным полюсам сфероиды, конформационная структура зеркально меняется: по мере приближения к положительному полюсу (слева) на поверхности адсорбируется все большая доля звеньев Asp, а звенья Arg отдаляются от поверхности. В районе отрицательно заряженного полюса наблюдается обратная картина.

На рисунке 3 изображены конформации однородно заряженного полипептида  $(A_{10}DA_9)_{40}$  из 800 звеньев, полученные по результатам МД-моделирования на поверхности заряженного (рис. 3а) и поляризованного (рис. 3б) вдоль длинной полуоси сфероиды (дипольный момент сфероиды направлен влево). В случае положительно заряженного сфероиды (рис. 3а) отрицательно заряженный полипептид полностью его обволакивает.



а

б

**Рис. 3.** Однородно заряженный полипептид (полиэлектролит)  $(A_{10}DA_9)_{40}$  на поверхности вытянутого сфероиды: положительно заряженного (а) и поляризованного в направлении оси вращения (б) (синяя трубка – звенья Ala, фрагменты красного цвета – Asp).

При этом все заряженные звенья Asp находятся на поверхности, а петли из нейтрально заряженных остатков Ala вынесены в раствор. В случае поляризованного сфероиды (рис. 3б) почти вся макромолекулярная цепь оказалась смещенной в положительно заряженную область сфероиды. В этом случае, чем ближе к положительно заряженному полюсу (слева) сфероиды расположены фрагменты полипептида, тем большая часть его отрицательно заряженных звеньев адсорбируются на поверхности. В экваториальной области размещаются макромолекулярные петли, выведенные в раствор вместе со звеньями Asp.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.

Список литературы

1. Гросберг А.Ю. Статистическая физика макромолекул / А.Ю. Гросберг, А.Р. Хохлов. - М.: Наука, 1989.
2. Комаров И.В. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции / И.В. Комаров, Л.И.Пономарев, С.Ю. Славянов – М. Наука. 1976. – 318 с.
3. ЛандауЛ.Д.Теоретическая физика Электродинамика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. 2-е изд., исп. -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982. - 621 с.
4. Phillips, J.C. Scalable molecular dynamics with NAMD / J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang et al. // Journal of Comput. 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 et al. // Journal of Physical Chemistry B. – 1998. – V. 102. – P. 3586-3616.

# ПЕРЕСТРОЙКА КОНФОРМАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ АДСОРБИРОВАННОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОПРОВОДА В ПОПЕРЕЧНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

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»

В ряде работ исследовались наносистемы, в которых макромолекулярные цепи были адсорбированы на поверхностях нанообъектов различной формы с целью использования таких наноструктур в люминесцентно-оптических датчиках молекулярного кислорода [1-5]. Изменение конформаций макроцепей полиамфолита или полиэлектролита, адсорбированных на нанопроволоке может быть осуществлено внешним электрическим полем, поляризующим проводник. В характерном случае поперечной относительно оси  $z$  цилиндра ориентации вектора напряженности  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-i\omega t)$  внешнего однородного монохроматического (на частоте  $\omega$ ) поля возникают вынужденные колебания поверхностной плотности заряда – локализованные плазмоны. В простейшей модели полимерные молекулы представляются идеальными гауссовыми цепями, но учитывается притяжение звеньев к поверхности адсорбента.

Напряженность квазистатического поля вне цилиндра радиуса  $R$ , т.е. при  $r > R$  и помещении его в поле  $\mathbf{E}_0$  имеет вид [6]

$$\mathbf{E}_2(r, \varphi) = E_0 \mathbf{n}_x + E_0 \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2} \frac{R^2}{r^2} \left[ (1 - 2 \sin^2 \varphi) \cdot \mathbf{n}_x + \sin 2\varphi \cdot \mathbf{n}_y \right]. \quad (1)$$

В случае циркулярно поляризованного монохроматического электромагнитного поля, распространяющегося вдоль оси  $z$ , параллельно оси наноцилиндра

$$\mathbf{E}(t, z) = (E_0 \mathbf{n}_x + iE_0 \mathbf{n}_y) \exp(i\Omega t - ikz). \quad (2)$$

Здесь, в (2),  $\mathbf{n}_x$ ,  $\mathbf{n}_y$  – единичные орты координатных декартовых осей  $x$  и  $y$ . В длинноволновом пределе для волнового числа  $k \rightarrow 0$ , фазы  $kz$ ,  $k(z + \Delta z)$  волны (2) мало отличаются друг от друга, и на длине  $l \ll 1/k$  получаем вращающееся с частотой  $\Omega$  электрическое поле напряженности  $E_0$ . В работе [3] рассмотрен вариант циркулярной поляризации СВЧ-поля в задаче о цилиндре с адсорбированными макроцепями. В адиабатически медленном варианте вращения поля необходимо чтобы частота  $\Omega$  была много меньше характерных частот  $\omega_c$  конформационных переходов фрагментов макроцепи  $\sim 1$  ГГц ( $1 \text{ нс}^{-1}$ ).

Адсорбционный потенциал поверхности нанопровода кругового сечения, в случае ван-дер-ваальсовой адсорбции может быть эффективно представлен комбинацией простейших модельных потенциалов «твердая стенка–дельта-функциональная яма»:  $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$  ( $R$ – радиус цилиндра) [3]. При помещении нанопровода в однородное электрическое поле его потенциал в результате поляризации проводника приобретает зависимость от угловой переменной  $\varphi$  в плоскости поперечного сечения. В переменном монохроматическом СВЧ-поле  $\mathbf{E}(t) = E_0(\mathbf{n}_x + i\mathbf{n}_y)\exp(i\Omega t)$  или  $\mathbf{E}_x(t) = E_0\mathbf{n}_x \exp(i\Omega t)$ , имеет место изменение поляризации по гармоническому закону с частотой  $\Omega$ , и к адсорбционному потенциалу  $V_1(r)$  добавляется потенциал  $-eE_0r \cos(\varphi - \Omega t)$  внешнего поля  $\mathbf{E}_x(t)$ , а также потенциал  $V_p(r, \varphi - \Omega t)$  поля поляризованной поверхности нанопровода:  $V_2(r, \varphi, \Omega t) = -eE_0r \cos(\varphi - \Omega t) + V_p(r, \varphi - \Omega t)$ . Тогда потенциал суммарного поля в пространстве вне нанопровода с поляризованной составляющей  $\mathbf{E}_x(t)$  может быть записан в виде

$$V(\mathbf{r}, t) = V_1(r) + V_2(r, \Phi(t)) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0) - eE_0r \cos \Phi + V_p(r, \Phi), \quad (3)$$

где фаза  $\Phi(t) = \varphi - \Omega t$ , а

$$V_2(r, \Phi) = -eE_0r \cos \Phi + \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2} R^2 e E_0 \frac{\cos \Phi}{r} \quad (4)$$

– энергия взаимодействия звена полиэлектролита, несущего заряд  $e$ , с первичным внешним электрическим полем и полем поляризации провода. Диэлектрические проницаемости  $\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2$  в (4) характеризуют металл нанопровода и окружающую среду, соответственно. Напряженность квазистатического поля  $\mathbf{E}_2(r, \varphi, t) = -\nabla V_2 / e$  вне цилиндра, т.е. для  $r > R$ , при помещении его в поле  $\mathbf{E}(t)$  с циркулярной поляризацией принимает вид

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_2(r, \varphi, t) = E_0\mathbf{n}_x \cos \Omega t + E_0\mathbf{n}_x \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2} \frac{R^2}{r^2} \left[ (1 - 2\sin^2 \varphi) \cdot \cos \Omega t + \sin 2\varphi \cdot \mathbf{n}_y \sin \Omega t \right] + \\ + E_0\mathbf{n}_y \sin \Omega t + E_0\mathbf{n}_y \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2} \frac{R^2}{r^2} \left[ \sin 2\varphi \cdot \cos \Omega t - (1 - 2\sin^2 \varphi) \cdot \sin \Omega t \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

При  $\Omega \rightarrow 0$  циркулярно поляризованное поле (5) переходит в статическое поле (1) с линейной поляризацией.

В случае макроцепного полиамфолита вместо заряда  $e$  звена можно ввести эффективный дипольный момент  $\mathbf{p}$  электронейтральной группы звеньев. Используя (5) можем записать энергию  $V_2^p = -\mathbf{p}\mathbf{E}_2(r, \varphi, t)$  взаимодействия поля  $\mathbf{E}_2(r, \varphi, \Omega t)$  с дипольным моментом  $\mathbf{p}$  полиамфолита.

В случае слабого СВЧ-поля учет потенциалов  $V_2(r, \Phi)$  (4) и  $V_2^p = -\mathbf{p}\mathbf{E}_2(r, \varphi, t)$  с полем (5) при построении аналитической модели перестрой-

ки конформационной структуры макроцепи, как это было сделано, например, в работах [1, 3-4], может быть произведен в рамках теории возмущений.

Таким образом, целью данной работы является исследование перестройки конформационной структуры полиамфолитных и однородно заряженных полипептидов на поверхности поляризованного в поперечном направлении золотого нанопровода. При необходимости полученные результаты легко могут быть обобщены в том числе и на случай вращения вектора поляризующего электрического поля.

Для решения дифференциального уравнения шредингеровского типа [7]

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

где  $a$  – размер звена цепи, определяющего конформационную функцию  $\psi(\mathbf{r})$ , в случае слабого СВЧ-поля учет потенциала (3) может быть произведен в рамках теории возмущений. Уравнение (6) с потенциалом (3) содержит угловую переменную, поэтому его следует записывать в виде

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi(\mathbf{r}) = [V(\mathbf{r}) - \varepsilon] \psi(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Решение (7) может быть представлено в виде  $\psi(\mathbf{r}) = F(r) \Phi_m(\varphi)$ , где  $\Phi_m(\varphi)$  – СФ проекции орбитального момента с целым  $m$ :  $\Phi_m(\varphi) = 1 / \sqrt{2\pi} \exp(im\varphi)$ .

Тогда, с учетом спектра собственных значений для функций  $\Phi_m(\varphi)$

$$\frac{\partial^2 \Phi_m}{\partial \varphi^2} = -m^2 \Phi_m(\varphi), \quad (8)$$

для радиальной функции  $F_l(r)$  получаем уравнение

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} - \frac{m^2}{r^2} \right] F_m(r) = [V(r) - \varepsilon_m] F_m(r). \quad (9)$$

Здесь в (9) радиальный потенциал  $V(r) = V_1(r) + V_2(r)$ , а  $V_2(r)$  определен соотношением  $V_2(r, \theta) = V_2(r) \Phi_1(\varphi)$ , или

$$V_2(r, \varphi) = - \left[ 1 - \alpha'(\omega) \left( \frac{R}{r} \right)^2 \right] r E_0 \cos \varphi$$

$$V_2(r, \varphi) = -e E_0 r \cos \varphi + \frac{\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_2}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2} R^2 e E_0 \frac{\cos \varphi}{r}$$

Здесь для простоты записи (4) принято, что частота  $\Omega \rightarrow 0$ .

Для функции  $F_m(r)$  получаем уравнение

$$F_m''(r) + \frac{1}{r} F_m'(r) - \frac{m^2}{r^2} F_m(r) = \frac{6}{a^2 k T} V_1(r) - \varepsilon_l F_m(r), \quad (10)$$

которое в отсутствие потенциала  $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha \delta(r - r_0)$  представляет собой уравнение Бесселя для цилиндрических функций  $Z_m(\xi)$ . Таким образом, решением (10) являются функции Бесселя мнимого аргумента  $I_m(q_m r)$  и  $K_m(q_m r)$ ,  $\xi = q_m r$ ,  $q_m^2 = -\frac{6\varepsilon_m}{a^2 k T}$ . В качестве решений уравнения (6) с определенным индексом  $m$  в поле  $V(r) = V_1(r)$ , затухающих на бесконечности, можем записать следующие

$$\begin{cases} F_m^I(r) = A_m I_m(q_m r) + B_m K_m(q_m r), & R < r < r_0 \\ F_m^{II}(r) = C_m K_m(q_m r), & r_0 < r < \infty \end{cases} \quad (11)$$

Постоянные  $A_m$ ,  $B_m$  и  $C_m$  находим из тех соображений, что  $\psi$ -функции должны удовлетворять следующим граничным условиям

$$\psi_I(R) = 0, \quad \psi_I(r_0) = \psi_{II}(r_0), \quad \psi_{II}'(r_0) = \psi_I'(r_0) - \frac{6\alpha}{a^2 k T} \psi_{II}(r_0). \quad (12)$$

Последнее уравнение позволяет определить единственный дискретный уровень спектра  $\varepsilon_m$  для каждого  $m$ . При  $m=0$  приходим к уже исследованной нами ранее в ряде работ задаче с круговой симметрией.

В общем случае произвольного индекса  $m$  для определения параметров  $q_m$  и  $\varepsilon_m$  (важный случай  $m=1$ ) необходимо воспользоваться уравнением

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

Из (12) находим соотношения между константами  $A_m$ ,  $B_m$  и  $C_m$ :

$$B_m = -A_m \frac{I_m(q_m R)}{K_m(q_m R)}, \quad C_m = A_m \left[ \frac{I_m(q_m r_0)}{K_m(q_m r_0)} - \frac{I_m(q_m R)}{K_m(q_m R)} \right]. \quad (14)$$

Тогда решения (11) принимают вид

$$\begin{cases} F_m^I(r) = A_m \left[ I_m(q_m r) - \frac{I_m(q_m R)}{K_m(q_m R)} K_m(q_m r) \right], & R < r < r_0 \\ F_m^{II}(r) = A_m \left[ \frac{I_m(q_m r_0)}{K_m(q_m r_0)} - \frac{I_m(q_m R)}{K_m(q_m R)} \right] K_m(q_m r), & r_0 < r < \infty \end{cases}. \quad (11')$$

Подставляя (11') в (13) получаем общее трансцендентное уравнение для собственных значений  $q_m$

$$\frac{a^2 k T}{6\alpha r_0} = I_m(q_m r_0) K_m(q_m r_0) - K_m^2(q_m r_0) \frac{I_m(q_m R)}{K_m(q_m R)}. \quad (15)$$

При  $m=1$  из (11) получаем

$$\begin{cases} \psi_I^{(m=1)}(r, \varphi) = A_1 I_1(q_1 r) + B_1 K_1(q_1 r) \Phi_1(\varphi), & R < r < r_0 \\ \psi_{II}^{(m=1)}(r, \varphi) = C_1 K_1(q_1 r) \Phi_1(\varphi), & r_0 < r < \infty \end{cases}. \quad (16)$$

Заметим, что плотность  $n(r, \varphi) = \psi^2(r, \varphi)$  звеньев адсорбированной макроцепи будут по-прежнему определять функции (11) или эквивалентные им (11') с индексом  $m=0$ , а не (16), т.к. собственные значения  $\varepsilon_1$ , соответствующие (16), имеют больший модуль, чем  $\varepsilon_0$ . Кроме того, обратим внимание и на тот факт, что поправки первого порядка к собственному значению  $\varepsilon_0$ , при учете возмущения  $V_2(r, \varphi) = -eE_0 r \cos \varphi + V_p(r, \varphi)$  равны нулю для состояний (11) и (11'). Корректное использование теории возмущений Релея-Шредингера требует учета состояний (16) для уточнения базисного состояния  $F_0(r)$ .

### *Теория возмущений по СВЧ-полю*

Учитывая ортогональность СФ  $\Phi_m(\varphi)$  с различными индексами  $m$  и структуру угловой зависимости оператора возмущения  $V_2(r, \varphi) \sim \cos \varphi$ , замечаем, что вклад в поправки базисного состояния  $\psi_{I,II}^{(m=0)}(r)$  будут вносить только функции (16) с  $m=1$ .

Исправленное базисное состояние  $\psi_{I,II}^{(m=0)}(r)$  во втором порядке по малому параметру  $\eta = eE_0 a / |\varepsilon_1 - \varepsilon_0|$  может быть записано в виде

$$\begin{cases} \psi_I(r, \varphi) = \psi_I^{(m=0)}(r) + \frac{\langle \psi_I^{(m=0)} | V_2 | \psi_I^{(m=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_I^{(m=1)}(r, \varphi) - \frac{1}{2} C_I^{(2)} \psi_I^{(m=0)}(r), & R < r < r_0 \\ \psi_{II}(r, \varphi) = \psi_{II}^{(m=0)}(r) + \frac{\langle \psi_{II}^{(m=0)} | V_2 | \psi_{II}^{(m=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} \psi_{II}^{(m=1)}(r, \varphi) - \frac{1}{2} C_{II}^{(2)} \psi_{II}^{(m=0)}(r), & r_0 < r < \infty \end{cases} \quad (17)$$

Выражения для радиально-углового распределения плотности звеньев адсорбированной гауссовой макроцепи могут быть записаны в виде

$$n_I(r, \varphi) = n_I^{(m=0)}(r) + n_I^{(1)}(r) \cos \varphi + n_I^{(2)}(r) \cos^2 \varphi, \quad R < r < r_0, \quad (18)$$

$$n_{II}(r, \varphi) = n_{II}^{(m=0)}(r) + n_{II}^{(1)}(r) \cos \varphi + n_{II}^{(2)}(r) \cos^2 \varphi, \quad r_0 < r < \infty, \quad (19)$$

где

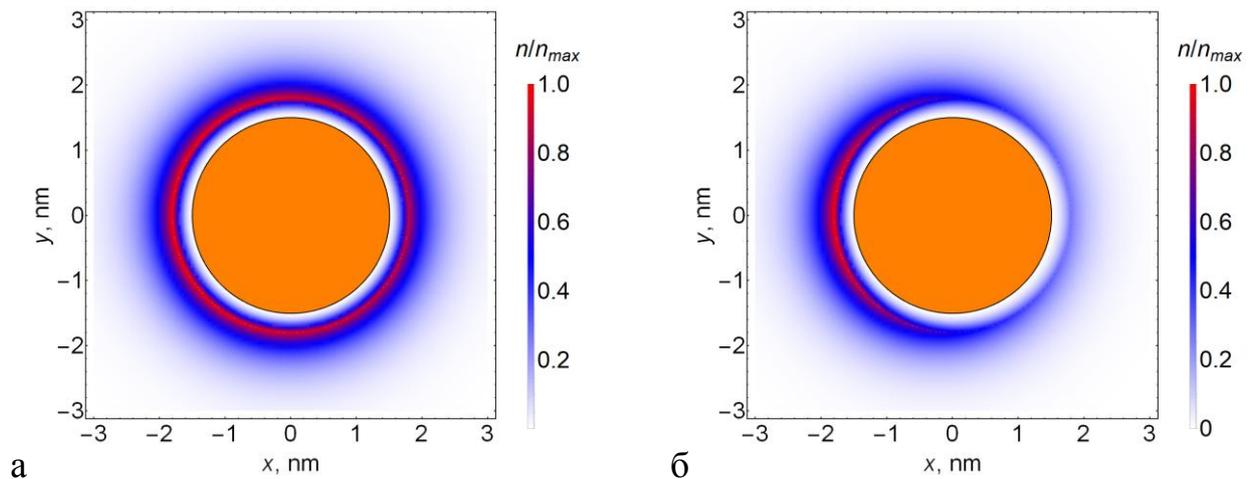
$$n_{I,II}^{(1)}(r) = 2 \frac{\langle \psi_{I,II}^{(m=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(m=1)} \rangle}{\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}} F_0^{I,II}(r) F_1^{I,II}(r),$$

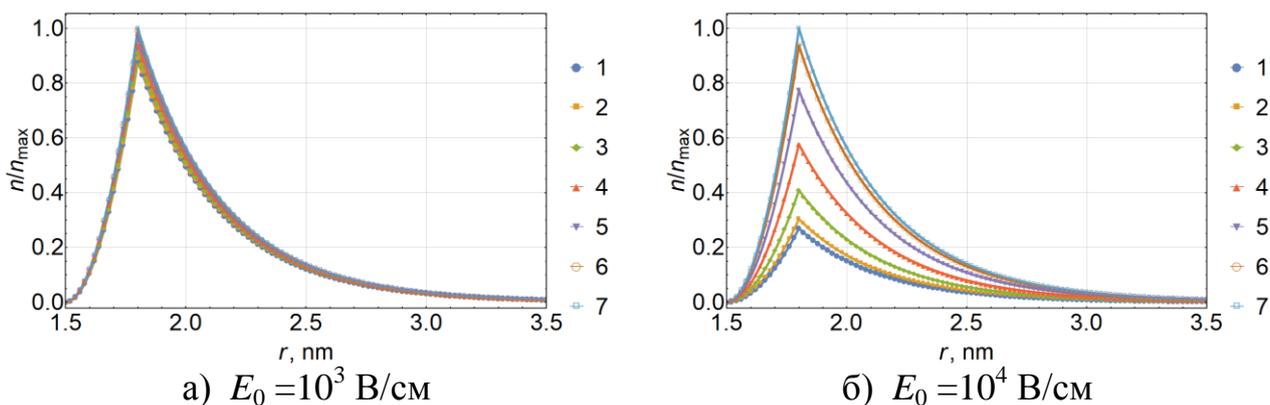
$$n_{I,II}^{(2)}(r) = \frac{\left| \langle \psi_{I,II}^{(m=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(m=1)} \rangle \right|^2}{|\varepsilon_1^{(0)} - \varepsilon_0^{(0)}|^2} \left| F_1^{I,II}(r) \right|^2.$$

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

$$\langle \psi_{I,II}^{(m=0)} | V_2 | \psi_{I,II}^{(m=1)} \rangle = \begin{cases} \int_R^{r_0} F_0^I(r) V_2(r) F_1^I(r) r dr, & I : R < r < r_0 \\ \int_{r_0}^{\infty} F_0^{II}(r) V_2(r) F_1^{II}(r) r dr, & II : r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (20)$$

где радиальные функции  $F_{m=0;1}^{I,II}(r)$  определены выражениями (11').

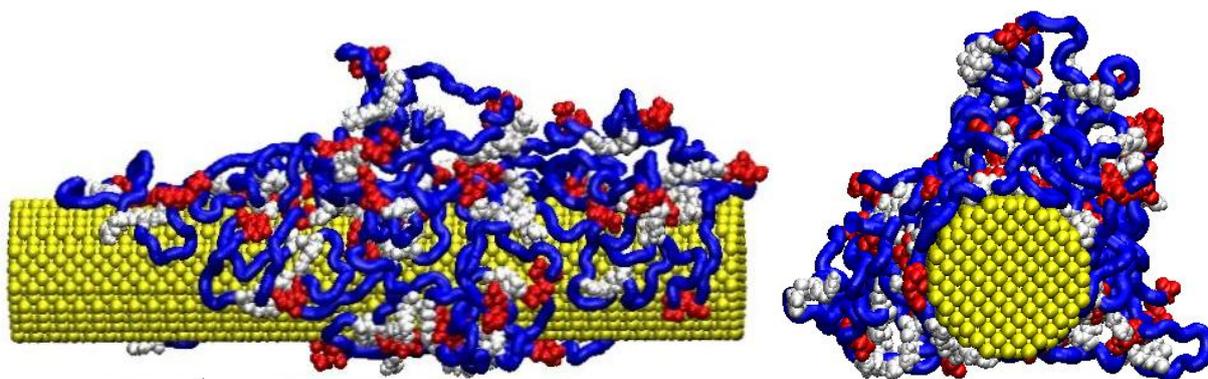




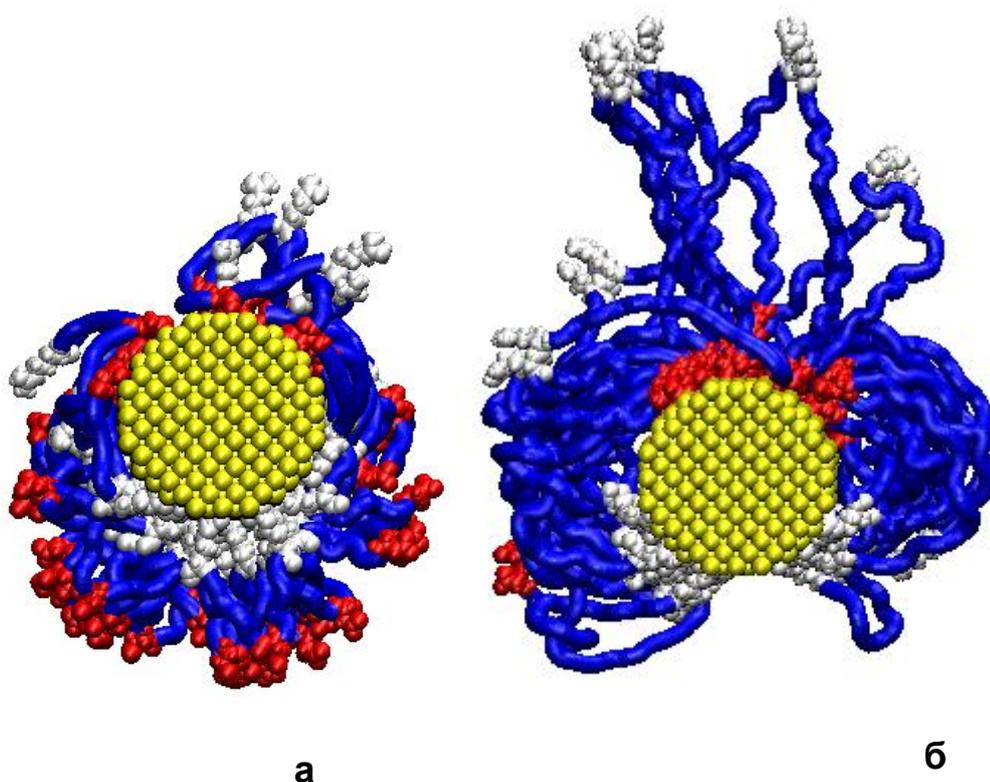
**Рис. 1.** Радиально-угловые распределения плотности звеньев адсорбированной гауссовой цепи полиэлектролита на поверхности наноцилиндра, поляризованного в электрическом поле  $E_0$ . Радиальные кривые плотности представлены с шагом по углу  $\Delta\varphi = \pi/6$

Результаты расчетов на основе (18)-(20) радиально-угловых зависимостей плотности звеньев цепи полиэлектролита, адсорбированной на поляризованном наноцилиндре в поле различной напряженности  $E_0$  приведены на рис. 1 с шагом по углу  $\Delta\varphi = \pi/6$ . С ростом поля  $E_0$  наблюдается смещение плотности звеньев в положительно заряженную область поверхности цилиндра. Амплитуда эффекта достигает 80 % при увеличении напряженности  $E_0$  от  $10^3$  до  $10^4$  В/см.

На рис. 2 и 3 представлены результаты МД-моделирования конформационной структуры полипептидов на поверхности золотого наностержня в отсутствие внешнего электрического поля (рис. 2) и при его наличии (рис. 3).



**Рис. 2.** Полипептидная цепь  $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$  на поверхности неполяризованного золотого нанопровода. Результаты МД-моделирования. а – вид сбоку, б – вид с торца (синие, белые и красные фрагменты цепи обозначают аминокислотные остатки Ala, Arg и Asp, соответственно).



**Рис. 3.** Полипептидные цепи  $(A_2DA_4RA_2)_{60}$  (а) и  $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$  (б) на поверхности поляризованного в поперечном направлении изолитого нанопровода с вертикально наведенным дипольным моментом  $p_{1,00}$ . Результаты МД-моделирования. Синие, белые и красные фрагменты цепи обозначают аминокислотные остатки Ala, Arg и Asp, соответственно).

На рис. 3 можно видеть изменения конформационной структуры адсорбированных на золотом нанопроводе полиамфолитных макроцепей, вызванные электрической поляризацией поверхности проводника во внешнем поле. Сравнение с рис. 2 показывают, что имеют место существенные отличия с сформированных конформаций от случая неполяризованного нанопровода. С увеличением наведенного во внешнем поле удельного дипольного момента нанопровода от  $p_{0,125} = 0.75 \text{ кД/нм}$  до  $p_{1,00} = 6.0 \text{ кД/нм}$ , число аминокислотных остатков Asp, смещенных в положительно заряженную область поверхности увеличивается (Рис. 3а), тогда как Arg остатки сдвигаются в отрицательно заряженную область (Рис. 3б).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.

#### Список литературы

1. Кручинин Н.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование перестройки конформационной структуры полиамфолитных макромолекул на поверхности поляризованной металлической наночастицы / Н.Ю. Кручинин, М.Г.

Кучеренко //Коллоидный журнал.2020.– Т.82. – № 2. – С. 177–185.

2. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения полиамфолитных полипептидов на поверхности металлической наночастицы в сверхвысокочастотном электрическом поле: молекулярно-динамическое моделирование / Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко //Коллоидный журнал.2020.– Т.82. – № 4. – С. 440–450.

3. Кручинин Н.Ю. Перестройка конформационной структуры полипептидов на поверхности металлического нанопровода во вращающемся электрическом поле: молекулярно-динамическое моделирование // Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко //Коллоидный журнал.2020.– Т.83. – № 1. – С. 53-61.

4. Кручинин Н.Ю. Конформационные изменения однородно заряженных цепей полиэлектролитов на поверхности поляризованной золотой наночастицы: молекулярно-динамическое моделирование и теория гауссовой цепи в поле / Н.Ю. Кручинин, М.Г. Кучеренко, П.П. Неясов // Журнал физической химии. 2021. – Т. 95. – № 2. – С. 262–271.

5. Кучеренко М.Г. Перенос энергии в цилиндрической наноструктуре, состоящей из металлической жилы и коаксиальной оболочки с молекулами люминофора / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева //Журнал приклад. спектр. 2017. – Т. 84. – № 3. – С. 358–367.

6. Новотный, Л. Основы нанооптики / Л. Новотный, Б.Хехт. - М.: Физматлит, 2009. – 483 с.

7. Гросберг А.Ю. Статистическая физика макромолекул / А.Ю. Гросберг, А.Р. Хохлов. - М.: Наука, 1989.

# ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ВБЛИЗИ ЗАМАГНИЧЕННЫХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,  
Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент

Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Оренбургский государственный университет»  
Центр лазерной и информационной биофизики

Построена спектральная модель люминесценции двухкомпонентной системы «экситон-активированная полупроводниковая квантовая точка (КТ) – слоистая плазмонная композитная наночастица (КНЧ)» во внешнем магнитном поле с учетом неоднородности поля, создаваемого КТ в области КНЧ. Использован тензорный формализм записи характеристик поля в каждом из слоев КНЧ, а также вне КНЧ. Установлено, что с изменением структуры ядра или оболочечного слоя нанокompозита трансформация спектрального отклика системы на действие внешнего магнитного поля принимает особенную форму, связанную с характерными магнитными свойствами компонентов наночастицы.

В работах [1-2] было обнаружено, что спектры фотолюминесценции двухкомпонентной системы из квантовых точек (КТ) и металлических наночастиц (НЧ) изменяются во внешнем магнитном поле. В [3-4] был предложен механизм наблюдаемого полевого эффекта, основанный на замагничивании электронной плазмы металла НЧ [5]. В данной работе объектом исследования является двухчастичный кластер, образованный из экситон-активированной полупроводниковой квантовой точки и двухслойной плазмонной наночастицы со структурой «ядро-оболочка». Рассматривается гибридный нанокompозит, в котором ядро и сопряженная с ним оболочка образуют сочетание «металл-диэлектрик», или его инверсию.

Исследуемая двухчастичная система представляет собой экситон-активированную сферическую полупроводниковую квантовую точку (КТ) радиуса  $R_1$ , с содержащейся в ней электрон-дырочной парой или экситоном Ванье-Мотта, и глобулярную слоистую металлгибридную наночастицу радиуса  $R_2$ , расположенную на расстоянии  $r_0 > R_1, R_2$  от КТ. Поле  $\mathbf{E}$  источника – КТ с дипольным моментом  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 \exp(-i\omega t)$  осциллирует с частотой  $\omega$ . Оно наводит в наночастице дипольный момент  $\mathbf{p}_2$ , который в простейшем – квазиоднородном приближении определяется как  $\mathbf{p}_2 = \tilde{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{E}$ , где  $\tilde{\alpha}(\omega | \mathbf{B})$  – магнитозависимый тензор дипольной динамической поляризуемости слоистой НЧ. Именно такой подход был реализован в работах [6-8]. В металлических компонентах наночастиц возникают плазмонные колебания. Во внешнем магнитном поле индукции  $\mathbf{B}$  электронная плазма металла приобретает анизотропные свойства, и диэлектрическая проницаемость проводящей части НЧ  $\varepsilon_2(\omega | \mathbf{B})$  становится

тензором второго ранга. Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon_{QD}$  КТ принималась постоянной в области частот экситонного перехода. Для материала сопряженной части НЧ  $\varepsilon_1$  частотная дисперсия учитывается, если этот материал относится к экситоногенному типу, в противном случае  $\varepsilon_1 = \text{const}$ . Окружающая среда предполагается прозрачной на экситонных частотах и характеризуется диэлектрической постоянной  $\varepsilon_3$ .

Тензор диэлектрической проницаемости металла  $\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})$  в магнитном поле с индукцией  $\mathbf{B}$

$$\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ -\varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix}, g(\omega) = \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx}, \varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{\parallel} = \varepsilon_{zz}, \quad (1)$$

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

где  $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_e / m}$  – плазменная (ленгмюровская) частота металла,  $\gamma$  – частота столкновений электронов в металле,  $\Omega_L = eB / mc$  – ларморовская (циклотронная) частота электронов в магнитном поле индукции  $B$ .

Отождествляемая с сигналом люминесценции спектральная плотность  $N_{\omega}$  числа фотонов, испущенных объединенной системой «КТ-НЧ» на частоте  $\omega$

$$N_{\omega}(\omega | \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G}) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{w_{sp}^2(\omega | \mathbf{B}, r_0) \Gamma(\omega | \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G})}{(\omega - \omega_{if})^2 + \Gamma^2(\omega | \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G})}, \quad (2)$$

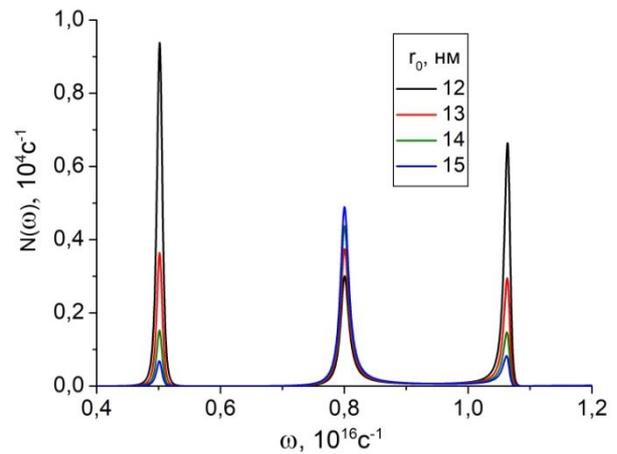
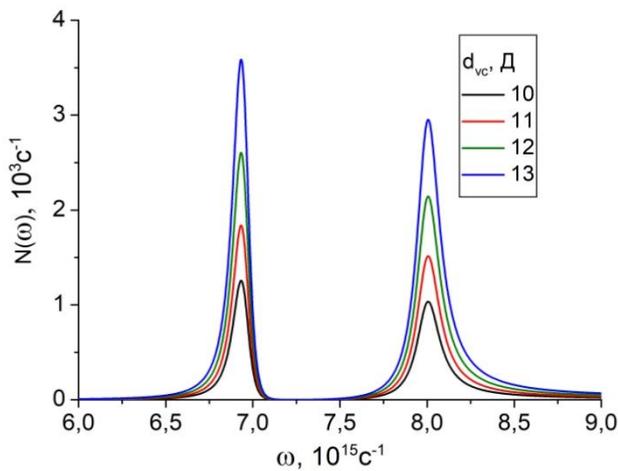
в приближении дипольной поляризуемости [6] определяется вероятностью  $w_{sp}$  спонтанного перехода в квантовой точке

$$w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, r_0) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \left[ \vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \vec{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \right] \mathbf{p} \right|^2, \quad (3)$$

расположенной вблизи наночастицы, на расстоянии  $r_0$  от ее центра. Здесь  $\vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3} (3\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \vec{\mathbf{I}})$  – квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника;  $\vec{\mathbf{I}}$  – единичная диада. Функция спектральной ширины лоренцевой линии  $\Gamma(\omega | \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G}) = w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, r_0) + U(\omega | \mathbf{B}, r_0, \mathcal{G}) + K$  зависит от угла  $\mathcal{G}$  между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{r}_0$ . Функция  $U(\omega | \mathbf{B}, r_0)$  представляет собой скорость безызлучательной передачи энергии от КТ к наночастице, и в приближении дипольной поляризуемости она принимает вид

$$U(\omega | \mathbf{B}, r_0) = \frac{1}{2\hbar} \text{Im} \left[ \mathbf{p} \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \vec{\alpha}(\omega | \mathbf{B}) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \mathbf{p} \right]. \quad (4)$$

В спектре люминесценции комплекса «КТ – слоистая НЧ с металлическим ядром и диэлектрической оболочкой» (рис. 1) в высокочастотной области наблюдается спектральная полоса на резонансной частоте  $\omega_{if} = 8 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  перехода из возбужденного экситонного состояния  $i$  КТ в ее основное состояние  $f$ . Вторая спектральная полоса на частоте  $\omega \sim 6.91 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  соответствует условно плазмонному резонансу композитной наночастицы. При увеличении значения межзонного электронного дипольного момента перехода КТ спектр люминесценции, как видно из рисунка 1, возрастает по амплитуде на обеих резонансных частотах.



$$R_{OD} = 4 \text{ нм}, \Delta = 1 \text{ нм}, r_B = 5 \text{ нм}, r_0 = R_1 + R_2 + 1 \text{ нм}, R_{NP} = 7 \text{ нм},$$

$$\rho = 4 \text{ нм}, R_c = 3 \text{ нм}, d_{vc} = 12 \text{ Д}, \varepsilon_2 = 1.4, \varepsilon_{KT} = 6, \varepsilon_m = 2, \mathbf{B} = 0 \text{ Т},$$

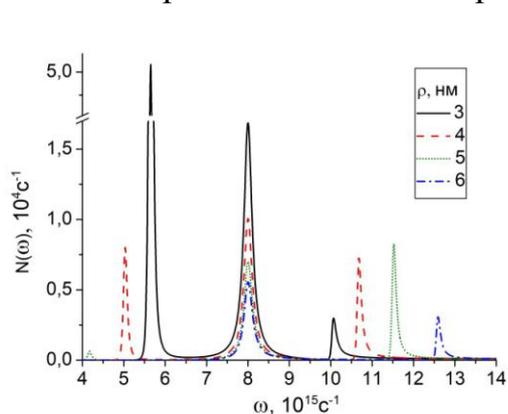
$$\omega_p = 13.87 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, \omega_{if} = 8 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}, \gamma = 1.6 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}, K = 2 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$$

**Рис. 1.** Зависимость спектра люминесценции комплекса «КТ – слоистая НЧ с металлическим ядром и диэлектрической оболочкой» от межзонного электронного дипольного момента перехода

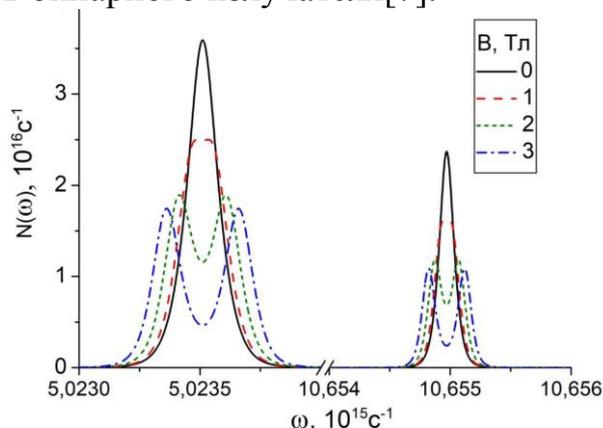
**Рис. 2.** Зависимость спектра люминесценции комплекса «КТ – слоистая НЧ с диэлектрическим ядром и металлической оболочкой» от расстояния между частицами

Для двухчастичного комплекса, образованного из квантовой точки и слоистой наночастицы с бездисперсионным диэлектрическим ядром и металлическим (анизотропным) слоем, на всех спектрах люминесценции наблюдается дополнительная спектральная полоса в высокочастотной области. На рисунке 2 показано изменение спектра люминесценции комплекса при увеличении расстояния между КТ и НЧ. С увеличением расстояния от 12 до 15 нм амплитуды плазмонных полос сильно уменьшаются, а интенсивность экситонной полосы, лежащей между ними, незначительно возрастает.

Были произведены расчеты спектров скоростей (3) и (4) системы «КТ-компози́тная НЧ» в магнитном поле различной величины индукции  $\mathbf{B}$ , на основе чего определялись спектральные плотности (2) для различных конфигурационных и электродинамических параметров бинарного излучателя [7].



**Рис. 3.** Зависимость спектральной плотности числа фотонов, испущенных объединенной системой «КТ-слоистая НЧ» от радиуса диэлектрического ядра наночастицы. Приближение дипольной поляризуемости.  $K = 3 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$



**Рис. 4.** Модификация условно плазмонных полос спектральной плотности излучения объединенной системы «КТ-слоистая НЧ» в магнитном поле. Приближение дипольной поляризуемости.  $\omega_{if} = 8 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $\gamma = 1.6 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$

При увеличении радиуса диэлектрического ядра композитной НЧ от 3 до 6 нм (при этом внешний радиус НЧ не изменялся, то есть толщина металлического слоя композита уменьшалась) спектральная плотность числа испущенных фотонов уменьшается на частоте экситонного перехода (рис. 3). На частотах плазмонных резонансов, связанных с оболочкой слоистой наночастицы, наблюдается рост интенсивности свечения вплоть до значений радиуса ядра 5 нм – в высокочастотной области для  $\omega \sim 10^{16} \text{ c}^{-1}$ , и монотонное падение амплитуды резонансного пика в низкочастотной области  $\omega \approx 4 \div 6 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ . При уменьшении частоты  $\gamma$  столкновений электронов на три порядка (рис. 4) интенсивность люминесценции комплекса увеличивалась на 12 порядков, в связи с этим условно экситонная полоса на частоте  $8 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$  становится незаметной по сравнению с двумя плазмонными полосами, которые испытывают характерное расщепление на две компоненты в магнитном поле. Примечательно, что изменение величины  $\gamma$  влияло только на амплитуды плазмонных полос, но не на экситонную полосу. При совпадении частоты  $\omega_{if}$  с одной из частот плазмонного резонанса наблюдалось дополнительное увеличение интенсивности плазмонных полос еще на один порядок [7].

В случае, когда дипольные моменты двух частиц, КТ и НЧ, формируются в неоднородном поле, формула для скорости  $w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, \mathbf{r})$  спонтанного излуче-

ния объединенной бинарной системой «квантовая точка – проводящая наночастица» должна быть модифицирована следующим образом [8]

$$w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, r_0) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \mathbf{p}_2(r_0 | \mathbf{B}) + \frac{3\varepsilon_3}{\varepsilon_1 + 2\varepsilon_3} \int_0^{R_c} \mathbf{P}(r_c) 4\pi r^2 dr \right|^2, \quad (5)$$

где

$$\mathbf{p}_2(r_0 | \mathbf{B}) = -\frac{1}{2\varepsilon_3} \int_0^{R_2} \int_0^\pi [\vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3 \vec{\mathbf{I}}] \vec{\nabla}_r \delta\varphi_2(r, \theta | \mathbf{B}) r^2 dr \sin\theta d\theta. \quad (6)$$

Интеграл  $\mathbf{p}_2(r_0 | \mathbf{B})$  (6) представляет собой наведенный дипольный момент НЧ [8] в неоднородном поле активированной квантовой точки и магнитном поле  $\mathbf{B}$ .

Аналогичной модификации должно быть подвергнуто выражение для скорости  $U(\omega | \mathbf{B}, r_0)$  безызлучательной передачи энергии от КТ к НЧ [8]. В случае неоднородного поля эта скорость без использования величины дипольной поляризуемости может быть представлена интегралом от мнимой части квадратичной формы вектора напряженности локального поля  $-\vec{\nabla}_r \delta\varphi_2(r, \theta | \mathbf{B}) = \mathbf{E}_2(r, \theta | \omega)$  внутри НЧ

$$U(\omega | \mathbf{B}, r_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^{R_2} \int_0^\pi \text{Im} \mathbf{E}_2^*(r, \theta | \omega) \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{E}_2(r, \theta | \omega) \sin\theta d\theta r^2 dr. \quad (7)$$

В случае композитной слоистой сферической наночастицы будем рассматривать три характерных структурных случая.

1. **Проводящий кор из металла с малым удельным сопротивлением** и выраженной частотной дисперсией  $\varepsilon_1(\omega)$  и непроводящая оболочка. Оболочка представляет собой диэлектрический слой со слабой дисперсией, либо в случае экситоногенного материала – с сильной частотной дисперсией  $\varepsilon_2(\omega)$ . Производится учет замагничивания внешним полем электронной плазмы кора с переходом ДП металла в тензорную форму  $\varepsilon_1(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B})$ . Влияние магнитного поля на экситоны оболочки не рассматривается.  $\varepsilon_3 = \text{const}$

2. **Непроводящий кор** а) из материала без дисперсии  $\varepsilon_1 = \text{const}$  или б) кор из экситоногенного материала с частотной дисперсией  $\varepsilon_1(\omega)$ , но не магниточувствительного. Оболочка представляет собой проводящий слой с сильной частотной дисперсией  $\varepsilon_2(\omega)$ . Производится учет замагничивания внешним полем электронной плазмы оболочки с переходом ДП металла оболочки в тензорную форму  $\varepsilon_2(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}_2(\omega | \mathbf{B})$ .

3. **Ферромагнитный кор** из металла (Fe, Co, Ni) или диэлектрика (магнетит) с а) выраженной частотной дисперсией  $\varepsilon_1(\omega)$  или б) без дисперсии

$\varepsilon_1 = \text{const}$ , характеризующийся высокой намагниченностью и анизотропией. Производится учет замагничивания кора внешним полем с переходом ДП металла в тензорную форму  $\varepsilon_1(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}_1(\omega | \mathbf{B})$  по механизму Фохта. Влияние магнитного поля на электронную плазму оболочки не учитывается по причине малости эффекта. Оболочка представляет собой проводящий металлический слой с сильной частотной дисперсией  $\varepsilon_2(\omega)$ , но без учета магниточувствительности и анизотропии.

Потенциалы  $\varphi_j(r, \theta)$  ( $j=1, 2, 3$ ) электрического поля внутри кора  $j=1$ ,  $r < R_1$ , внутри оболочки  $j=2$ ,  $R_1 < r < R_2$ , и вне композита  $j=3$ ,  $r > R_2$  – в среде с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_3$ , создаваемого точечным зарядом  $q$ , помещенным в точку  $(r_0, 0)$  ( $r_0 > R_2$ ) вне слоистого шара могут быть записаны в виде

$$\varphi_1(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = \sum_{l=1}^{\infty} \mathbf{r}_0 \vec{\mathbf{D}}_l(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{r} \cdot \frac{r^{l-1}}{r_0 R_1^l} \cdot P_l(\cos \theta), \quad r < R_1, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \varphi_2(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = \\ = \sum_{l=1}^{\infty} \left[ \mathbf{r}_0 \vec{\mathbf{B}}_l(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{r} \cdot \frac{r^{l-1}}{r_0 R_1^l} + \mathbf{r}_0 \vec{\mathbf{C}}_l(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{r} \cdot \frac{R_2^{l+1}}{r_0 r^{l+2}} \right] \cdot P_l(\cos \theta), \quad R_1 < r < R_2 \end{aligned} \quad (9)$$

$$\varphi_3(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = \frac{q}{\varepsilon_3 R_M} + \sum_{l=1}^{\infty} \mathbf{r}_0 \vec{\mathbf{A}}_l(\omega | \mathbf{B}) \mathbf{r} \cdot \frac{R_2^{l+1}}{r_0 r^{l+2}} P_l(\cos \theta), \quad r > R_2, \quad (10)$$

где  $P_l(\cos \theta)$  – полином Лежандра степени  $l$ ,  $\theta$  – угол, определяющий положение точки, в которой рассчитывается потенциал  $\varphi_j(r, \theta)$ ,  $R_M = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$  – расстояние между центром КТ и точкой наблюдения М.

Тензоры  $\vec{\mathbf{A}}_l(\omega | \mathbf{B})$ ,  $\vec{\mathbf{B}}_l(\omega | \mathbf{B})$ ,  $\vec{\mathbf{C}}_l(\omega | \mathbf{B})$  и  $\vec{\mathbf{D}}_l(\omega | \mathbf{B})$  могут быть найдены из граничных условий на поверхностях раздела слоев НЧ, причем тензор  $\vec{\mathbf{A}}_l(\omega | \mathbf{B})$ , с точностью до множителя, представляет собой  $2l$ -польную поляризуемость шарового замагниченного нанокompозита. Из (1)-(3) следует, что все тензоры  $\vec{\mathbf{A}}_l$ ,  $\vec{\mathbf{B}}_l$ ,  $\vec{\mathbf{C}}_l$  и  $\vec{\mathbf{D}}_l$  имеют размерность потенциала  $\varphi_j$ . Учтем, также, что

$$1/R_M = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{r^l}{r_0^{l+1}} \cdot P_l(\cos \theta), \quad r < r_0. \quad (11)$$

Соотношения между неизвестными тензорами  $\vec{\mathbf{A}}_l, \vec{\mathbf{B}}_l, \vec{\mathbf{C}}_l, \vec{\mathbf{D}}_l$  находим из условий на граничных сферах  $S(R_1)$  и  $S(R_2)$  с учетом (11):

$$\varphi_1(R_1, \theta, \varphi) = \varphi_2(R_1, \theta, \varphi), \quad \varphi_2(R_2, \theta, \varphi) = \varphi_3(R_2, \theta, \varphi), \quad (12)$$

$$\vec{\varepsilon}_1(\omega) \left( \frac{\partial \varphi_1}{\partial r} \right)_{R_1} = \varepsilon_2 \left( \frac{\partial \varphi_2}{\partial r} \right)_{R_1}, \quad \varepsilon_2 \left( \frac{\partial \varphi_2}{\partial r} \right)_{R_2} = \varepsilon_3 \left( \frac{\partial \varphi_3}{\partial r} \right)_{R_2}. \quad (13)$$

Тогда из (8)-(10) и (12)-(13) следует

$$\tilde{\mathbf{D}}_l = \tilde{\mathbf{B}}_l + \tilde{\mathbf{C}}_l \left( \frac{R_2}{R_1} \right)^{l+1}, \quad \frac{qR_2^l}{\varepsilon_3 r_0^{l+1}} \tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{A}}_l = \tilde{\mathbf{B}}_l \left( \frac{R_2}{R_1} \right)^l + \tilde{\mathbf{C}}_l, \quad (14)$$

$$\tilde{\varepsilon}_1(\omega) \tilde{\mathbf{D}}_l = \varepsilon_2 \left[ \tilde{\mathbf{B}}_l - \tilde{\mathbf{C}}_l \frac{(l+1)}{l} \left( \frac{R_2}{R_1} \right)^{l+1} \right], \quad (15)$$

$$\frac{qR_2^{l-1}}{r_0^{l+1}} \tilde{\mathbf{I}} - \varepsilon_3 \tilde{\mathbf{A}}_l \frac{(l+1)}{lR_2} = \varepsilon_2(\omega) \left[ \tilde{\mathbf{B}}_l \frac{R_2^{l-1}}{R_1^l} - \tilde{\mathbf{C}}_l \frac{(l+1)}{lR_2} \right]. \quad (16)$$

Последовательно исключая посредством линейных преобразований тензоры  $\tilde{\mathbf{A}}_l, \tilde{\mathbf{C}}_l, \tilde{\mathbf{D}}_l$  из уравнений (14)-(16), получаем для тензора  $\tilde{\mathbf{B}}_l$  выражение

$$\tilde{\mathbf{B}}_l = \frac{q(2l+1)R_2^{l-1}}{r_0^{l+1}} \tilde{\mathbf{p}}_l, \quad (17)$$

где

$$\tilde{\mathbf{p}}_l(\omega) = \left\{ \tilde{\eta}'_2(\omega | \mathbf{B}) \frac{R_2^{l-1}}{R_1^l} + \left[ \varepsilon_3 \tilde{\mathbf{I}} - \tilde{\varepsilon}_2(\omega) \right] \left[ \tilde{\eta}'_1(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \tilde{\varepsilon}_2(\omega) - \tilde{\varepsilon}_1 \frac{l(l+1)}{R_2} \left( \frac{R_1}{R_2} \right)^{l+1} \right\}^{-1}, \quad (18)$$

$\tilde{\eta}'_j(\omega | \mathbf{B}) = (l+1)\tilde{\varepsilon}_{j+1}(\omega | \mathbf{B}) + l\tilde{\varepsilon}_j(\omega | \mathbf{B})$ ,  $\tilde{\varepsilon}_3 = \varepsilon_3 \tilde{\mathbf{I}}$ , а тензор  $\left[ \tilde{\eta}'_j(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1}$  обратен тензору  $\tilde{\eta}'_j(\omega | \mathbf{B})$ . Тензор  $\tilde{\mathbf{p}}_l$  имеет размерность радиуса.

Для тензора  $\tilde{\mathbf{C}}_l(\omega | \mathbf{B})$  получаем

$$\tilde{\mathbf{C}}_l(\omega | \mathbf{B}) = \frac{q(2l+1)lR_2^{l-1}}{r_0^{l+1}} \left( \frac{R_1}{R_2} \right)^{l+1} \tilde{\varepsilon}_2(\omega) - \tilde{\varepsilon}_1 \left[ \tilde{\eta}'_1(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \tilde{\mathbf{p}}_l. \quad (19)$$

Тензор  $\tilde{\mathbf{D}}_l(\omega | \mathbf{B})$  определяется первым уравнением (14)

$$\tilde{\mathbf{D}}_l(\omega | \mathbf{B}) = \frac{q(2l+1)R_2^{l-1}}{r_0^{l+1}} \tilde{\mathbf{I}} + l \tilde{\varepsilon}_2(\omega) - \tilde{\varepsilon}_1 \left[ \tilde{\eta}'_1(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \tilde{\mathbf{p}}_l, \quad (20)$$

а для тензора  $\tilde{\mathbf{A}}_l$ , пропорционального  $2l$ -польной поляризуемости слоистого композита с анизотропной сердцевиной, из второго уравнения (14) следует

$$\vec{\mathbf{A}}_l \vec{\mathbf{e}}_1, \vec{\mathbf{e}}_2, \varepsilon_3 = -\frac{qR_2^l}{\varepsilon_3 r_0^{l+1}} \vec{\mathbf{I}} + \left[ \xi^{-l} \vec{\mathbf{I}} + l \xi^{l+1} \vec{\mathbf{e}}_2(\omega) - \vec{\mathbf{e}}_1 \left[ \vec{\mathbf{n}}_1^l(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \right] \frac{q(2l+1)R_2^{l-1}}{r_0^{l+1}} \vec{\mathbf{p}}_l,$$

где  $\xi = R_1 / R_2$ .

Потенциалы  $\delta\varphi_j(r, \theta | \mathbf{B})$  ( $j=1,2,3$ ) ближнего электрического поля наночастицы, иницированного радиально выстроенным точечным диполем  $\mathbf{p}_0 = q\delta\mathbf{r}_0$  получаем дифференцированием потенциалов  $\varphi_j(r, \theta)$ , заданных выражениями (8)-(10) по переменной  $r_0$ :  $\delta\varphi_j(r, \theta) = \nabla(r_0)\varphi_j(r, \theta | r_0)\delta r_0$ .

$$\begin{aligned} \delta\varphi_1(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) &= \\ &= -\sum_{l=1}^{\infty} \mathbf{p}_0 \left[ \vec{\mathbf{I}} + l \vec{\mathbf{e}}_2(\omega) - \vec{\mathbf{e}}_1 \left[ \vec{\mathbf{n}}_1^l(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \right] \vec{\mathbf{p}}_l \mathbf{r} \cdot \frac{(2l+1)(l+1)R_2^{l-1}r^{l-1}}{r_0^{l+2}R_1^l} \cdot P_l(\cos\theta), \quad r < R_1 \\ \delta\varphi_2(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) &= -\sum_{l=1}^{\infty} \frac{(2l+1)(l+1)R_2^{l-1}}{r_0^{l+2}} \times \\ &\times \mathbf{p}_0 \left[ \frac{r^{l-1}}{R_1^l} \vec{\mathbf{I}} + \vec{\mathbf{e}}_2(\omega) - \vec{\mathbf{e}}_1 \left[ \vec{\mathbf{n}}_1^l(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} l \cdot \frac{R_1^{l+1}}{r^{l+2}} \right] \vec{\mathbf{p}}_l \mathbf{r} \cdot P_l(\cos\theta), \quad R_1 < r < R_2 \\ \delta\varphi_3(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) &= \frac{p_0}{\varepsilon_3 R_M^3} (r \cos\theta - r_0) - \sum_{l=1}^{\infty} \mathbf{p}_0 \frac{(l+1)}{r^{l+2}} P_l(\cos\theta) \times \\ &\times \left\{ -\frac{R_2^{2l+1}}{\varepsilon_3 r_0^{l+2}} \vec{\mathbf{I}} + \left[ \xi^{-l} \vec{\mathbf{I}} + \xi^{l+1} \vec{\mathbf{e}}_2(\omega) - \vec{\mathbf{e}}_1 \left[ \vec{\mathbf{n}}_1^l(\omega | \mathbf{B}) \right]^{-1} \right] \frac{(2l+1)lR_2^{2l}}{r_0^{l+2}} \vec{\mathbf{p}}_l \right\} \mathbf{r}, \quad r > R_2 \end{aligned} \quad (21)$$

(22)

Поле (22) с потенциалом  $\delta\varphi_3(r, \theta; r_0 | \mathbf{B})$  определяет безызлучательный перенос энергии экситона КТ вблизи проводящей НЧ к малой частице-акцептору радиусом  $R_A$  (молекуле или молекулярному кластеру) в магнитном поле.

В случае, когда дипольные моменты двух частиц, КТ и НЧ, формируются в неоднородном поле, формула (5) для скорости  $w_{sp}(\omega | \mathbf{B}, \mathbf{r})$  спонтанного излучения [8] объединенной бинарной системы «КТ-НЧ» содержит момент

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_2(r_0 | \mathbf{B}) &= -\frac{1}{2\|\varepsilon_2\|} \int_0^{R_1} \int_0^\pi [\vec{\mathbf{e}}_1(\omega | \mathbf{B}) - \vec{\mathbf{e}}_2] \vec{\nabla}_r \delta\varphi_1(r, \theta | \mathbf{B}) r^2 dr \sin\theta d\theta - \\ &- \frac{1}{2\varepsilon_3} \int_{R_1}^{R_2} \int_0^\pi [\vec{\mathbf{e}}_2(\omega | \mathbf{B}) - \varepsilon_3 \vec{\mathbf{I}}] \vec{\nabla}_r \delta\varphi_2(r, \theta | \mathbf{B}) r^2 dr \sin\theta d\theta \end{aligned}$$

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.

Список литературы

1. Briskina S.M., Tarasov A.P., Markushev V.M., Shiryayev M.A. Magnetic field influence on the intensity of ZnO random lasing // *Journal of Nanophotonics*. 2018. T. 12. № 4. С. 043506.
2. Брискина С.М., Тарасов А.П., Маркушев В.М., Ширяев М.А. Усиление краевого излучения наностержней ZnO в магнитном поле // *Ж. прикл.спектр.* 2018. Т. 85. № 6. С. 1018-1020.
3. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М. Трансформация спектров люминесценции квантовых точек вблизи плазмонных наночастиц в магнитном поле // VIII межд. конфер. по фотонике и информ. оптике: Сб. научных трудов. М.: НИЯУ МИФИ, 2019. – 752 с. – С. 403-404.
4. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М., Чмерева Т.М. Люминесценция комплексов из КТ и плазмонных наночастиц в магнитном поле. С. 93-96. Сб. трудов XI Межд. конфер. «Фунд. проблемы оптики – 2019». С.-Петербург. 2019 /СПб: Ун-тет ИТМО, 2019. – 406 с.
5. Kucherenko M. G. and Nalbandyan V. M. Polarizability spectra of magnetized layered nanocomposites with an anisotropic core // *J. Opt. Technol.* **85**, 524-530 (2018).
6. Kucherenko M.G. and Nalbandyan V.M. Absorption and spontaneous emission of light by molecules near metal nanoparticles in external magnetic field // *Physics Procedia*. **73**. 136-142. (2015)
7. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М. Проявление оболочечной структуры замагниченных плазмонных нанокомпозитов с КТ // Сб. трудов X Межд. конфер. «Фунд. проблемы оптики – 2020». С. 79-81. С.-Петербург. 2020 / СПб: Ун-тет ИТМО, 2020. – 418 с.
8. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М. Люминесценция двухчастичного комплекса из сферической квантовой точки и плазмонной наноглобулы во внешнем магнитном поле // *Оптика и спектроскопия*. – 2020. – Т. 128. – Вып. 11. – С. 1776-1783.

## **СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛ, СВЯЗАННЫХ С АДСОРБИРОВАННЫМИ ПОЛИПЕПТИДАМИ НА ЗАРЯЖЕННЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ НАНОЧАСТИЦ**

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

Произведена оценка характеристик люминесцентных сигналов окрашенных белковых цепей и полипептидов, адсорбированных сферическими плазмонными наночастицами (Au, Ag, C<sub>60</sub>). Рассмотрены случаи нейтральных и электрически заряженных наночастиц, а также полиамфолитных и полиэлектролитных полимеров. Показано, что проблема люминесцентных спектров коллоидных систем рассматриваемого типа имеет два четко различимых аспекта: структурный, который связан со спецификой формирования радиального распределения пептидных звеньев, и плазмонно-резонансный, связанный с особенностями возникновения излучательной способности системы на резонансных частотах наночастицы.

**Ключевые слова:** люминесценция молекул, полипептид, адсорбция, плазмонная наночастица, плазмонный резонанс, полиамфолит, полиэлектролит

Спектры люминесценции молекул, связанных со звеньями макроцепи, адсорбированной проводящей сферической наночастицей (НЧ), должны содержать характерную полосу, обусловленную плазмонным резонансом этой наночастицы. Сферически-симметричная функция плотности звеньев полимерной опушки имеет специфическую радиальную зависимость, отражающую особенности взаимодействия макроцепи с растворителем [1]. В хороших растворителях опушка становится рыхлой и представляет собой клубковый полимерный слой, в плохих – тонкую и плотную глобулярную оболочку. При переходе из клубковой в глобулярную фазу связанные с цепью молекулы – центры окраски, приближаются к поверхности НЧ, и возбуждаемые в НЧ плазмонные колебания становятся более высокоамплитудными [2].

Задача детализированного описания люминесцентных спектров коллоидной системы рассматриваемого типа имеет два отчетливо различимых аспекта: 1°. Структурный, который заключается в формировании специфического радиального распределения звеньев макромолекулы в опушечном слое, и 2°. плазмонно – резонансный, определяющий особенности становления излучательной способности системы на резонансных частотах частицы-наноантенны. Со вторым аспектом связан, также, вопрос необходимости учета потерь, связанных с диссипацией энергии в проводящей НЧ.

### **1°. Формирование сферически-симметричного распределения**

### плотности звеньев в опушке.

Типичными являются два варианта практически реализуемых наносистем.

#### 1.1. Электрически нейтральная сферическая наночастица.

Для этого варианта известен закон радиального распределения звеньев идеальной гауссовой макроцепи [3-5]. Равновесные конфигурации адсорбированной макроцепи в модели идеальных гауссовых цепей, не учитывающей объемные взаимодействия звеньев, задаются конформационной функцией  $\psi(\mathbf{r})$ , определяющей плотность мономеров  $n(\mathbf{r}) = \psi^2(\mathbf{r})$ , и являющейся решением дифференциального уравнения, изоморфного уравнению Шредингера типа [1]

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

где  $a$  – размер звена цепи,  $kT$  – тепловая энергия. В работах [3-5] было показано, что ван-дер-ваальсов адсорбционный потенциал поверхности наночастиц может быть эффективно представлен комбинацией модельных потенциалов «твердая стенка – дельта-функциональная яма»:  $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha \delta(r - r_0)$  ( $R$  – радиус НЧ). В случае сферически симметричного потенциала  $V(r) = V_1(r)$  радиальные функции  $\psi(\mathbf{r}) = F_0(r)$  определены в [4-5] внутри сферического слоя  $R < r < r_0$  и в сопряженной с ним области  $r > r_0$

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A_0 \left[ \frac{I_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A_0 \left[ \frac{I_{1/2}(q_0 r_0)}{K_{1/2}(q_0 r_0)} - \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)} \right] \frac{K_{1/2}(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (2)$$

где  $I_{1/2}(q_0 r)$  и  $K_{1/2}(q_0 r)$  – модифицированные функции Бесселя первого и второго рода с полуцелым индексом, и собственными значениями  $q_0^2 = -\frac{6\varepsilon_0}{a^2 kT}$ .

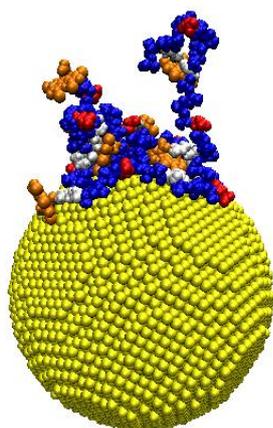
Трансцендентное уравнение для собственного значения  $q_0$

$$\frac{a^2 kT}{6\alpha r_0} = I_{1/2}(q_0 r_0) K_{1/2}(q_0 r_0) - K_{1/2}^2(q_0 r_0) \frac{I_{1/2}(q_0 R)}{K_{1/2}(q_0 R)}. \quad (3)$$

позволяет определить  $q_0$ , а вместе с ним и единственный дискретный уровень спектра  $\varepsilon_0$ . В условиях прямого влияния плазмонной наночастицы на излучательные переходы в опушке люминесцентный сигнал от отдельной НЧ с окрашенной полимерной цепью, адсорбированной на ее поверхности, будет определяться выражением

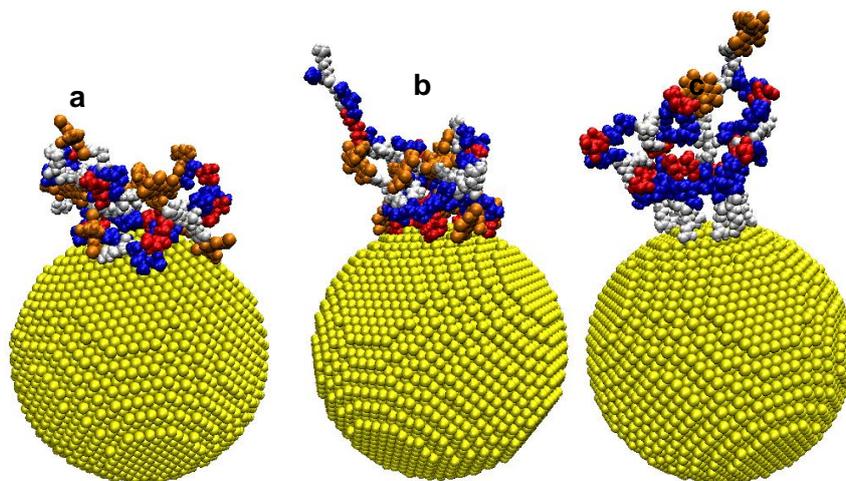
$$I \sim \int_R^{\infty} I_1(r) n(r) 4\pi r^2 dr \sim 4\pi \int_R^{r_0} I_1(r) [F_0^I(r)]^2 r^2 dr + 4\pi \int_{r_0}^{\infty} I_1(r) [F_0^{II}(r)]^2 r^2 dr, \quad (4)$$

где  $I_1(r)$  - интенсивность люминесценции одиночной молекулы на цепи, удаленной от центра НЧ на расстоянии  $r$ .



**Рис. 1.** Полипептидная цепь  $(A_2DA_4RA_2)_{10}$  (80 звеньев Ala с последовательно предстоящими 10 звеньями Asp и 10 звеньями Arg) с молекулами эозина (отображены оранжевым цветом, связаны со звеньями цепи), адсорбированная на поверхности золотой наночастицы (МД-моделирование NAMD 2.12 [6], синим цветом отображены звенья Ala, белым – Arg, красным – Asp).

### 1.2. Наночастица с избыточным электрическим зарядом на ее поверхности.



**Рис. 2.** Полипептидная цепь  $(A_2D_2A_3R_2A)_{10}$  с молекулами эозина (отображены оранжевым цветом, связаны со звеньями цепи) адсорбированная на поверхности золотой наночастицы (синий - Ala, белый - Arg, красный – Asp). МД-моделирование [7] при различных значениях поверхностной плотности заряда: а) 0, б)  $+2.7e/\text{нм}^2$ , в)  $-2.7e/\text{нм}^2$ .

На рис. 2. приведены результаты МД-моделирования полипептида  $(A_2D_2A_3R_2A)_{10}$  на поверхности золотой наночастицы из начальной случайной клубковой конфигурации при различных значениях поверхностной плотности заряда: 0,  $+2.7e/\text{нм}^2$  и  $-2.7e/\text{нм}^2$ .

В случае заряженной наночастицы следует различать, к какой категории относится белковая или полипептидная цепь: (1) *полиамфолиты*; (2) *полиэлектролиты*.

1.2.1. *Полиамфолиты*. В случае электронейтрального полиамфолита звено его цепи имеет характерный статический дипольный момент  $\mathbf{d}$ , и тогда взаимодействие  $V_2(r) = -(\mathbf{dr})Q / r^3$  сферически-симметрично распределенного заряда  $Q$  частицы с пептидным звеном макромолекулы вносит дополнительный вклад в общий потенциал  $V(r) = V_1(r) - (\mathbf{dr})Q / r^3$ . При достаточно малых значениях заряда  $Q$  и дипольного момента  $\mathbf{d}$  слагаемое в общем потенциале может рассматриваться как возмущение и тогда следует развивать соответствующий вариант теории.

В сферически симметричном случае, когда дипольные моменты звеньев цепи выстраиваются вдоль вектора  $\mathbf{E} = -\nabla V_2(r) / e = -3\mathbf{r}Qr^{-4}d / e$  напряженности поля в равновесии для радиальной функции  $F_0(r)$  получаем уравнение

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right] F_0(r) = [V(r) - \varepsilon_0] F_0(r), \quad (9)$$

с потенциалом  $V(r) = V_1(r) - d \cdot Q / r^2$ . Для нахождения функций  $F_0^I(r)$ ,  $F_0^{II}(r)$  дельта-функциональная потенциальная яма  $V_\alpha(r) = -\alpha\delta(r - r_0)$  может временно не рассматриваться. Вводя новую радиальную функцию  $\chi(r)$  подстановкой  $F_0(r) = \chi(r) / \sqrt{r}$  получаем для нее уравнение

$$\chi'' + \frac{1}{r} \chi' - \left( q_0^2 + \frac{(1/4 - \gamma)}{r^2} \right) \chi(r) = 0, \quad (10)$$

где  $q_0^2 = -\frac{6|\varepsilon_0|}{a^2 kT}$ ,  $\gamma = -\frac{6d|Q|}{a^2 kT}$ . Замечаем, что уравнение (10) представляет собой уравнение Бесселя, и тогда его решение может быть представлено набором функций  $I_\nu(q_0 r)$  и  $K_\nu(q_0 r)$  модифицированных функций Бесселя первого и второго рода с индексом  $\nu = \sqrt{1/4 - \gamma}$ :  $\chi(r) = AI_\nu(q_0 r) + BK_\nu(q_0 r)$ . Тогда радиальные функции  $F_0^I(r)$ ,  $F_0^{II}(r)$  будут определены выражениями, аналогичными формулам (2)

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A \left[ \frac{I_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], & R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A \left[ \frac{I_\nu(q_0 r_0)}{K_\nu(q_0 r_0)} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \right] \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}}, & r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (11)$$

Нетрудно заметить, что при  $\gamma \rightarrow 0$ ,  $\nu = 1/2$  и формулы (11) переходят в (2). Уравнение для собственного значения  $q_0$  аналогично (2) с заменой индекса функций Бесселя  $1/2 \rightarrow \nu$ .

*Конформация полиамфолитной макроцепи на поверхности заряженного наноцилиндра.* В аксиально симметричном случае, когда дипольные моменты звеньев цепи радиально выстроены вдоль вектора напряженности  $e\mathbf{E} = -\nabla V_2(r) = \mathbf{rd} \cdot 2\kappa \nabla(1/r^2)$ , где  $\square$  – заряд единицы длины цилиндра, в равновесии для радиальной функции  $F_0(r)$  получаем уравнение

$$\frac{a^2 kT}{6} \left[ \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r \frac{d}{dr} \right] F_0(r) = [V(r) - \varepsilon_0] F_0(r), \quad (12)$$

с потенциалом  $V(r) = V_1(r) - 2d \cdot \kappa / r$ . Вводя безразмерный радиус  $\sqrt{2}q_0 r = \rho$ , где

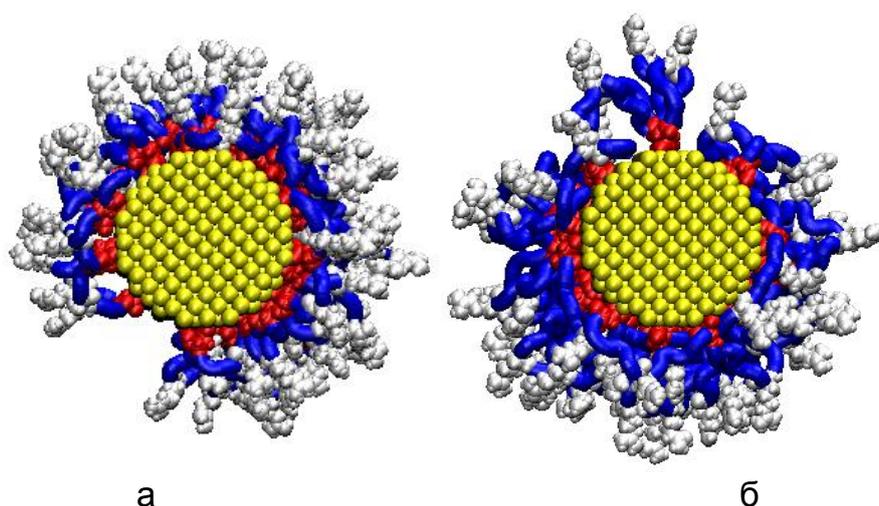
$$q_0 = \sqrt{\frac{6\varepsilon_0}{a^2 kT}}, \quad \gamma_a = \sqrt{\frac{|\varepsilon_0| kT \cdot a^2}{24\kappa^2 d^2}},$$

и новую радиальную функцию  $F(\rho)$ :  $F_0(\rho) = \exp(-\gamma_a \rho) F(\rho)$ , получаем для нее уравнение

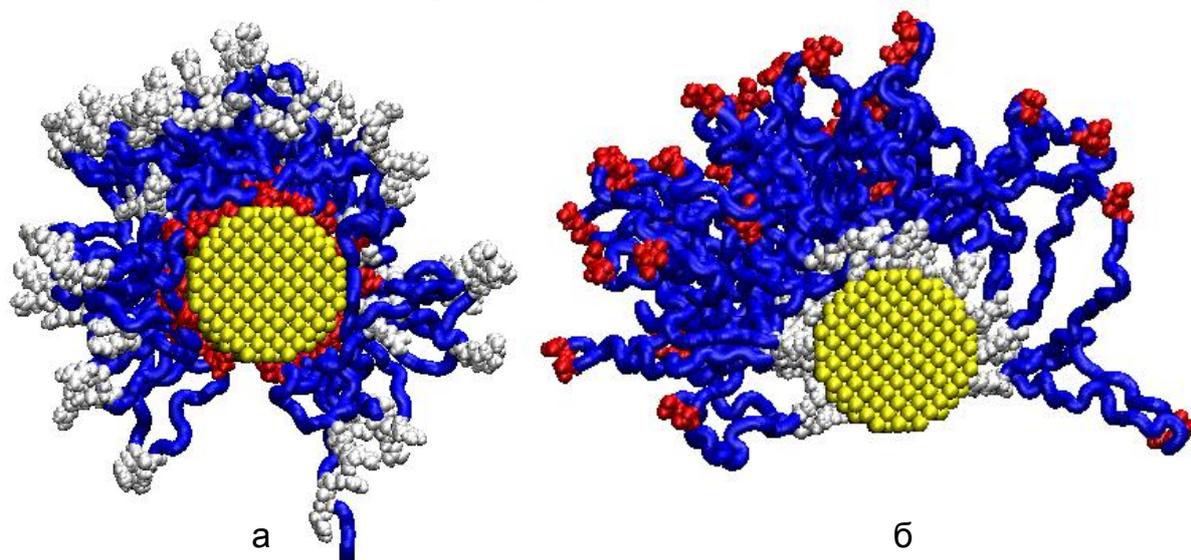
$$F'' + \left[ \frac{1}{\rho} - 1 \right] F' - \frac{(1 - \gamma_a)}{\sqrt{2}\rho} F(\rho) = 0, \quad (13)$$

которое представляет собой уравнение для вырожденной гипергеометрической функции  $F(\alpha, 1, \rho)$  с  $\alpha = (1 - \gamma_a) / \sqrt{2}$ . Общее решение уравнения (13) с константами  $C_1$  и  $C_2$  тогда может быть записано в виде [8]

$$F(\rho) = C_1 F(\alpha, 1, \rho) + C_2 \left[ F(\alpha, 1, \rho) \ln \rho + \sum_{k=1}^{\infty} C_{\alpha+k-1}^k \frac{\rho^k}{k!} \times \sum_{\nu=0}^{k-1} \left( \frac{1}{\alpha + \nu} - \frac{2}{1 + \nu} \right) \right]. \quad (14)$$



**Рис. 3** Конформации полипептидных цепей (а)  $(ADA_2RA)_{100}$  и (б)  $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ , адсорбированных заряженным золотым наностержнем с поверхностной плотностью  $+3.3e/\text{нм}^2$ , (синими, белыми и красными фрагментами обозначены аминокислотные остатки Ala, Arg, и Asp, соответственно).



**Рис. 4.** МД-моделирование конформаций полипептидных цепей, адсорбированных заряженным золотым наностержнем: (а)  $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ , поверхностная плотность заряда  $+3.3e/\text{нм}^2$  и (б)  $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$ , поверхностная плотность заряда  $-3.3e/\text{нм}^2$  (синими, белыми и красными фрагментами обозначены аминокислотные остатки Ala, Arg, и Asp, соответственно).

Нарис. 3 представлены конформационные структуры двух амфолитных полипептидов, полученные в результате МД-симуляции вблизи однородно заряженной по поверхности золотой нанопроволоки. При увеличении абсолютной величины поверхностной плотности заряда от  $\pm 1.1e/\text{нм}^2$  до  $\pm 3.3e/\text{нм}^2$  наблюдается существенная перестройка структуры адсорбированных макроцепей. Все большая часть аминокислотных остатков, име-

ющих тот же самый знак заряда, что и поверхность нанопровода, удаляется от него, и все большее число остатков с противоположным знаком заряда локализуется на поверхности. При значении поверхностной плотности  $\pm 3.3e / \text{нм}^2$  все аминокислотные остатки, имеющие тот же самый знак заряда, что и нанопровод, максимальным смещены от его поверхности посредством разделения противоположно заряженных остатков электронейтральными фрагментами макроцепи (Рис. 4).

1.2.2. *Полиэлектролиты.* В случае полиэлектролита можно сформулировать задачу определения конформационной структуры опушки не апеллируя к теории возмущений. При этом в перспективе можно надеяться на получение аналитического решения для конформационной функции  $\psi(\mathbf{r})$ , удовлетворяющего уравнению (1), аналогичному уравнению Шредингера с кулоновским потенциалом. Другими словами, возникает задача, схожая с задачей о водородоподобном атоме с дополнительным потенциалом  $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0)$ . Общий потенциал  $V(r)$  в этом случае принимает вид  $V_1(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_0) - e'Q/r$ , где  $e'$  – эффективный заряд звена цепи.

## 2°. Люминесценция двухчастичной системы «молекула-наночастица»

### 2.1. Спонтанные переходы, ускоренные частицей-наноантенной.

Электронно-возбужденная молекула с дипольным моментом перехода  $\mathbf{p}_0 = \langle i | e\delta\mathbf{r} | f \rangle$ , закрепленная на макроцепи и отстоящая от центра НЧ на расстоянии  $r$ , создает внутри наночастицы неоднородное поле с потенциалом  $\delta\varphi(r', \theta; r, \vartheta)$

$$\delta\varphi(r', \theta; r, \vartheta) = -p_0 \cos \vartheta \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(l+1)}{l\varepsilon(\omega) + (l+1)\varepsilon_2} \frac{(r')^l}{r^{l+2}} \cdot P_l(\cos \theta), \quad r' < R. \quad (15)$$

Здесь, в (15)  $P_l(\cos \theta)$  – полином Лежандра;  $\vartheta$  – угол между векторами  $\mathbf{p}_0$  и  $\mathbf{r}$ . Неоднородное поле (15) наводит в НЧ дипольный момент

$$\mathfrak{P}(\omega | r, \vartheta) = -\frac{1}{2\varepsilon_2} \int_0^R \int_0^\pi [\varepsilon(\omega) - \varepsilon_2] \nabla \delta\varphi(r', \theta; r, \vartheta) r'^2 dr' \sin \theta d\theta,$$

величина которого зависит от расстояния  $r$  между центром НЧ и молекулой. Тогда интенсивность люминесценции системы «молекула-наночастица» будет определяться выражением

$$I_1(\omega | r, \vartheta) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{w_{sp}^2(\omega | r, \vartheta) \Gamma(\omega | r, \vartheta)}{(\omega - \omega_{if})^2 + \Gamma^2(\omega | r, \vartheta)}, \quad (16)$$

$$\Gamma(\omega | r, \vartheta) = w_{sp}(\omega | r, \vartheta) + U(\omega | r, \vartheta) + K, \quad K = \text{const}$$

$$w_{sp}(\omega | r, \mathcal{G}) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{p}_0 + \mathfrak{P}(\omega | r, \mathcal{G})|^2.$$

Здесь  $\Gamma(\omega | r, \mathcal{G})$  – спектральная ширина линии излучения системы М-НЧ на частоте  $\omega$ ;  $w_{sp}(\omega | r, \mathcal{G})$  – скорость спонтанного перехода на частоте  $\omega$ .

Следует отметить, что ранее в [5] был рассмотрен аналогичный эффект влияния плазмонной наночастицы на скорость безызлучательного переноса энергии между молекулами в опущечном слое адсорбированной макроцепи, который был назван «эффектом кинетической линзы».

## 2.2. Диссипация энергии в наночастице.

Скорость диссипации энергии поля в НЧ, т.е. скорость безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от молекулы к металлической глобуле может быть записана в виде

$$U(\omega | r, \mathcal{G}) = \frac{1}{2\hbar} \int_0^R \int_0^\pi \text{Im} \varepsilon(\omega) |\nabla \delta\varphi(r', \theta; r, \mathcal{G})|^2 r'^2 dr' \sin \theta d\theta. \quad (17)$$

Теперь квантовый выход люминесценции изолированной пары М-НЧ, определяющий интенсивность  $I_1(r)$  в (4) и (16) полностью задан выражением

$$\eta(\omega | r, \mathcal{G}) = \frac{w_{sp}(\omega | r, \mathcal{G})}{w_{sp}(\omega | r, \mathcal{G}) + U(\omega | r, \mathcal{G}) + K}.$$

Выражения (15)-(17) позволяют произвести расчет регистрируемых экспериментально спектров люминесценции полимерных растворов с плазмонными НЧ на основе (4).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.

## Список литературы

1. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул. М.: Наука, 1989.
2. Климов В.В., Дюклуа М., Летохов В.С. Спонтанное излучение атома в присутствии нанотел // Квантовая электроника. 2001. – Т. 31. - № 7. – С. 569-586.
3. 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.

4. 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.
5. Кучеренко М.Г. , Измоденова С.В. , Чмерева Т.М. Эффект «кинетической линзы» в безызлучательном переносе электронной энергии вблизи металлической наночастицы с макромолекулярным линкером // Вестник ОГУ. 2013. №1. С. 112-120.
6. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. Молекулярно-динамическое моделирование конформационной структуры полиамфолитов на поверхности золотой наночастицы // Сибирский физический журнал. 2018. Т. 13. № 2. С. 86-94.
7. Кручинин Н. Ю., Кучеренко М. Г. Молекулярно-динамическое моделирование электрически индуцированных конформационных изменений полиамфолитных полипептидов на поверхности золотой наночастицы // Коллоидный журнал. 2019. -Том 81. № 2. -С. 175–184.
8. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М. Наука. 1976. – 576 с.

## **ИНАКТИВАЦИЯ БАКТЕРИЙ ПРИ РЕЛАКСАЦИИ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЕЙ**

**Летута С.Н., д-р. физ.-мат. наук, профессор.;**

**Никиян А.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент;**

**Раздобреев Д.А., канд. физ.-мат. наук.;**

**Ишемгулов А.Т., канд. физ.-мат. наук.;**

**Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е., Дорошкевич А.В.**

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

С ростом резистентности многих штаммов патогенных микроорганизмов к традиционным антибиотикам всё большую актуальность представляет разработка качественно новых противомикробных стратегий. Одним из перспективных методов является фотообработка бактериальных сред, когда источником энергии, используемой для поражения микробов, является свет, а промежуточными агентами – фото- или термосенсибилизаторы, трансформирующие энергию света либо в формирование в среде химически активных соединений, с последующим образованием (разрывом) новых химических связей, либо в тепло [1].

Фотодинамическая инактивация микроорганизмов включает стадию образования свободных радикалов, прежде всего активных форм кислорода, т.е. имеет место в средах, содержащих молекулярный кислород. Если содержание кислорода в среде снижено (например, в биоплёнках) такой метод малоэффективен [2]. В отсутствие кислорода повреждение бактерий возможно путем гипертермии бактериальных клеток. При этом крайне важно, чтобы скорость тепловыделения превышала скорость рассеяния тепла (клетка не успевала «остыть»). Наиболее эффективными теплосенсибилизаторами считаются металлические наночастицы. Однако показано, что молекулы красителей также могут выступать в качестве источников тепла, если дополнительно «включить» реакции с участием их высоких электронно-возбуждённых состояний (ВЭВС) [3-6]. Релаксация ВЭВС преимущественно осуществляется безызлучательно за очень короткое время около  $10^{-11}$  секунд. Для эффективного заселения ВЭВС молекул требуется предварительно заселить нижние возбуждённые синглетные состояния молекул  $S_1$ . Для этого, вместо возбуждения молекул непрерывным светом низкой интенсивности, воздействие необходимо производить короткими импульсами высокой интенсивности. Использование молекулярных сенсибилизаторов возможно в тех ситуациях, когда применение наночастиц нецелесообразно. Кроме того, молекулярные сенсибилизаторы, имеющие высокий квантовый выход в триплетное состояние, могут инициировать реакции с участием активных форм кислорода, т.е. дополнительно инициировать фотодинамический режим инактивации микроорганизмов.

В настоящей работе представлены некоторые результаты фотоинактивации микроорганизмов в реакциях с участием ВЭВС молекул красителей.

Исследованы культуры клеток *Escherichiacolii* *Bacillus subtilis* в физрастворах при нормальных условиях. Выживание бактерий после облучения определялось посредством подсчёта колониобразующих единиц (КОЕ). В качестве сенсibilизаторов использовались органические красители–анионы эритрозин и эозин, а также краситель–катион родамин 6Ж. Фотосенсibilизаторы облучались излучением второй гармоники твердотельного лазера на YAG:Nd, работающего в импульсно-периодическом режиме. Параметры возбуждения: длина волны  $\lambda = 532$  нм, длительность импульса 15 нс, плотность мощности излучения (1 – 50) МВт/см<sup>2</sup>. Информацию о релаксации возбужденных состояний ФС получали по кинетике их замедленной флуоресценции и фосфоресценции, которые регистрировались с помощью ФЭУ-84 через монохроматор МДР-41.

Дополнительные сведения о процессах в растворах, содержащих бактерии и ФС, при воздействии на них интенсивным (свыше 10 МВт/см<sup>2</sup>) возбуждающим светом, получали по рассеянию зондирующего излучения гелий-неонового (He-Ne) лазера. С помощью цилиндрической линзы в кювете с исследуемым раствором формировалась узкая сфокусированная (0.3 x 10 мм<sup>2</sup>) область возбуждения. Вдоль неё пропусклся зондирующий луч He-Ne лазера диаметром 1 мм. Кинетика изменения интенсивности рассеянного света измерялась с помощью ФЭУ. Синхронизация запуска лазера и регистрирующей системы, а также сбор, накопление и обработка сигналов производились в автоматизированном режиме.

На рисунке 1 представлены гистограммы КОЕ клеток *Escherichiacoli* после облучения светом длины волны  $\lambda = 532$  нм различной плотности мощности, нормированные на контрольные значения КОЕ.

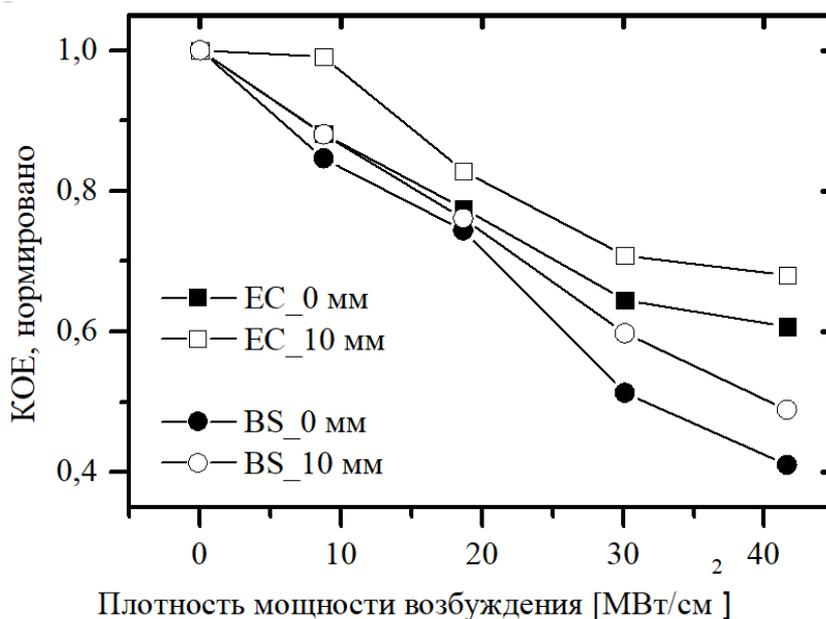


Рисунок 1 – Нормированные величины КОЕ клеток *Escherichiacoli* (EC) и *Bacillussubtilis*(BS) в зависимости от плотности мощности накачки на расстояниях 0 и 10 мм от сфокусированной области возбуждения

И ксантеновые красители (эритрозин, эозин), и родамин демонстрируют хороший антибактериальный эффект. При этом ксантеновые сенсibilизаторы обладают большим квантовым выходом в триплетное состояние, следовательно, в присутствии кислорода проявляют высокую фотодинамическую активность. Обращает на себя внимание то, что эозин, имея выход в триплетное состояние почти на 30% меньше, чем эритрозин, в условиях наших экспериментов показывает лучшую антимикробную активность, чем эритрозин. Родамин 6Ж в физрастворе практически не имеет выхода в триплетное состояние, тем не менее, его противомикробный эффект выше, чем у ксантеновых красителей. Таким образом, инактивация бактерий в условиях наших экспериментов преимущественно осуществлялась не только через фотодинамический, но и через тепловой механизм.

Релаксация ВЭВС молекул возможна по одному из следующих каналов: излучение (флуоресценция  $S_n \rightarrow S_i$  или  $T_m \rightarrow T_j$ ); интеркомбинационная конверсия (ИКК)  $S_n \rightarrow T_m$  или  $T_m \rightarrow S_k$ ; безызлучательная внутренняя конверсия (переход энергии в тепло); перенос энергии на молекулы окружения. Интенсивная ИКК из высоких синглетных  $S_n$  состояний многоатомных молекул экспериментально доказана и хорошо теоретически обоснована. Квантовый выход ИКК из  $S_n$  состояний, примерно на 25 – 30 % превышает выход в триплетное состояние с  $S_1$ -возбужденных уровней [3, 4].

На рисунке 2 представлена зависимость интенсивности фосфоресценции эозина в физрастворе ( $c = 0.1$  мМ) от плотности мощности возбуждающего излучения длины волны  $\lambda = 532$  нм. При небольших мощностях возбуждения (участок в диапазоне  $1 \div 5$  МВт/см<sup>2</sup>) интенсивность ЗФ красителей быстро нарастает, достигая насыщения, что связано с выходом на насыщение заселенности  $T_1$ -состояний молекул, образовавшихся в результате ИКК  $S_1 \rightarrow T_1$ . Интенсивность свечения начинает вновь заметно расти при дальнейшем повышении мощности возбуждения. Это возможно только при наличии двухквантового поглощения и заселения ВЭВС молекул  $S_n$ , откуда ИКК на триплетные уровни  $T_m$  происходит интенсивнее, в результате чего заселённость  $T_1$ -состояний увеличивается.

Учитывая неравномерное распределение молекул красителей в пространстве между бактериями и на поверхности клеточных стенок, можно ожидать существенного локального разогрева микрообластей с высокой концентрацией красителя при безызлучательной релаксации их ВЭВС. В этом случае возможны два сценария гибели бактерий: гибель клеток в результате локальной гипертермии и повреждение компонентов клеток ударными волнами, возникающими при локальном нагреве среды или в результате образования и схлопывания микропузырьков пара.

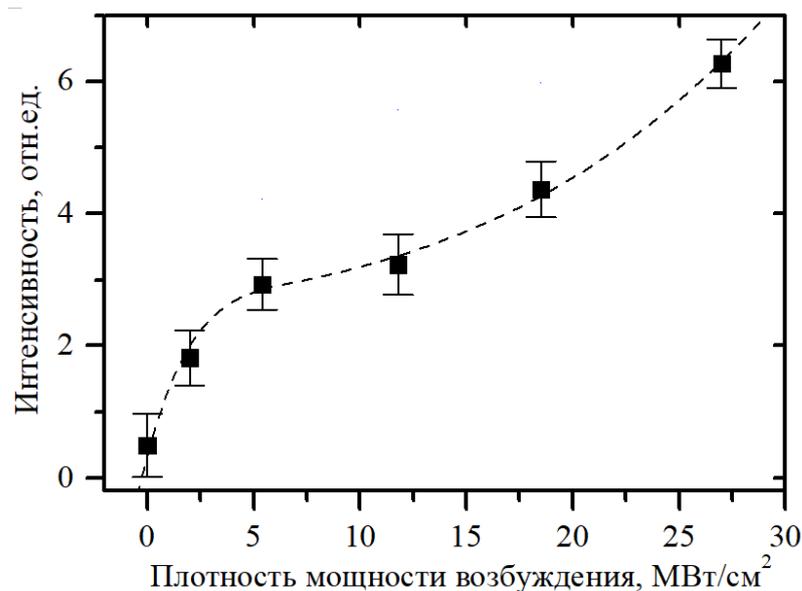


Рисунок 2 – Зависимость интенсивности флуоресценции эозина ( $c = 0.1 \text{ мМ}$ ) в физрастворе от плотности мощности возбуждающего излучения длины волны  $\lambda = 532 \text{ нм}$ .

Регистрация локальной гипертермии экспериментально затруднена, однако обнаружение пузырьков пара и ударных волн в среде возможно. Кинетика возникновения и исчезновения пузырьков и ударных волн в растворах исследована по рассеянию света зондирующего *He-Ne* лазера. На рисунке 3 представлены кинетические кривые изменения интенсивности зондирующего луча *He-Ne* лазера, прошедшего через кювету с эритрозином концентрацией  $0.1 \text{ мМ}$  в физрастворе на различных расстояниях от области сфокусированного возбуждения.

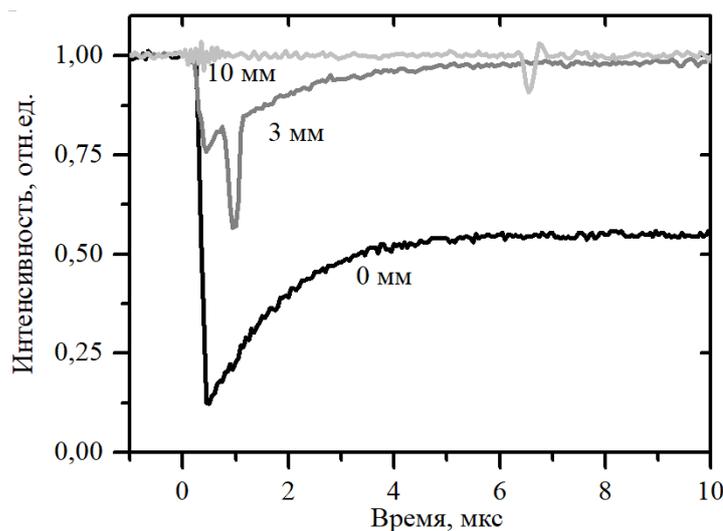


Рисунок 3 – Кинетические кривые изменения интенсивности рассеянного света от луча *He-Ne* лазера, проходящего через кювету с эритрозином концен-

трацией 0.1 мМ в физрастворе на различных расстояниях от сфокусированной области возбуждения

Непосредственно в области возбуждения наблюдается ступенчатое изменение интенсивности. По нашему мнению, оно соответствует рассеянию зондирующего луча лазера на долгоживущих пузырьках пара (интенсивность возвращается к изначальной в течение миллисекунд, что не показано на рисунке). Экспоненциально затухающий сигнал на первых микросекундах по своему характеру и продолжительности соотносится с триплет-триплетным поглощением красителя.

При смещении зондирующего луча от области возбуждения появляются постепенно уменьшающиеся с расстоянием резкие провалы интенсивности прошедшего через образец света. Данные провалы возникают при пересечении луча *He-Ne* лазера фронтом ударной волны. Зная расстояние от области возбуждения и время появления таких провалов, мы определили скорость распространения ударных волн, которая оказалась равной скорости звука в воде (около 1500 м/с).

Аналогичные провалы получены в растворах с наночастицами серебра (40 нм). Наличием ударных волн на большом удалении от области возбуждения (до 10 мм) объясняется инактивация бактерий в этих областях. Иные механизмы инактивации (фотодинамические реакции, гипертермия или перенос энергии) здесь не имеют места.

Таким образом, для генерации ударных волн можно использовать разнообразные сенсibilизаторы, включая молекулярные. Необходимым условием для эффективной фотоинактивации является быстрое преобразование энергии света в тепло. Применение молекулярных сенсibilизаторов с высоким выходом в триплетное состояние также целесообразно с точки зрения их универсальности: в зависимости от ситуации они могут реализовывать как фотодинамический, так и тепловой механизм инактивации.

#### Список литературы

1. Pang, X. et al. Beyond Antibiotics: Photo/Sonodynamic Approaches for Bacterial Theranostics / X. Pang, D. Li, J. Zhu, J. Cheng, D. Liu // Nano-Micro Letters, 2020. – V. 12. – P. 144.

2. Vinagreiro, C.S. et al. Antibacterial Photodynamic Inactivation of Antibiotic-Resistant Bacteria and Biofilms with Nanomolar Photosensitizer Concentrations / C.S. Vinagreiro, A. Zangirolami, F.A. Schaberle // ACS Infect. Dis. 2020. – V. 6. – P. 1517-1526.

3. Летута, С.Н. и др. Фототермическая инактивация микроорганизмов при релаксации высоковозбужденных состояний сенсibilизаторов / С.Н. Летута, С.Н. Пашкевич, А.Т. Ишемгулов, А.Н. Никиян // Биофизика, 2020. – Т. 65. - № 4. – С. 705-712.

4. Летута, С.Н. Фотопроцессы с участием высоких электронно-возбужденных состояний многоатомных молекул. Автореферат диссертации на

соискание ученой степени доктора физико-математических наук/ С.Н. Летута. // Москва: МГУ им. М.В. Ломоносова, 2003. – 40 с.

5. Летута, С. Н. Триplet-синглетная интеркомбинационная конверсия в многоатомных молекулах / Летута С. Н. // Вестник Оренбургского государственного университета, 2002. – № 5. – С. 88-91.

6. Кучеренко, М.Г. Кинетика нелинейных фотопроцессов в конденсированных молекулярных системах. / М.Г. Кучеренко. – Оренбург: Изд-во ОГУ, 1997. – 386 с.

## МАГНИТНАЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ БАКТЕРИЙ *E. COLI*

Летуга У.Г., канд. физ.-мат. наук

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

Химические элементы присутствуют в природе в нескольких формах – изотопах. Изотопы одного и того же элемента отличаются количеством нейтронов и, соответственно, массой ядра. В зависимости от способности подвергаться радиоактивному распаду различают радиоактивные и стабильные изотопы. Длительное время только радиоактивные изотопы наиболее активно использовались в биологических экспериментах в качестве меток благодаря легкости их детектирования. В настоящее время с развитием высокочувствительных методов предпочтение отдаётся стабильным изотопам ввиду отсутствия ионизирующих излучений и их безопасности для биологических объектов.

Изотопное воздействие на живые организмы широко распространено и носит комплексный характер. Биологические эффекты, вызываемые стабильными изотопами, могут быть обусловлены как различиями атомной массы, так и магнитными характеристиками ядра. Различия масс являются причиной фракционирования изотопов в биологии (масс-зависимые изотопные эффекты): живые организмы по-разному потребляют и используют лёгкие и тяжёлые изотопы одного и того же химического элемента. Физико-химические причины такого фракционирования связаны с различиями в скоростях реакций или диффузии лёгких и тяжелых изотопов, а также - в константах равновесия.

Эффекты фракционирования стабильных изотопов исследуются уже не одно десятилетие. Наиболее интересные масс-зависимые изотопные эффекты обнаружены для ядер водорода  $^1\text{H}/^2\text{H}$  [1]. Другой тип биологических эффектов, обусловленных различиями магнитных характеристик ядер изотопов, получил название магнитно-изотопных эффектов (МИЭ) и был обнаружен в ферментативных реакциях *in vitro* в начале 21-ого столетия [2]. МИЭ представляют наибольший интерес, так как их величина превосходит эффекты фракционирования изотопов в несколько раз. Причина этого кроется в особенности магнитных изотопов, например,  $^{25}\text{Mg}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{67}\text{Zn}$ , - ядра этих элементов имеют ненулевой спин и магнитный момент, способный влиять на квантово-химическое состояние ближайшего молекулярного окружения и изменять константы скоростей ферментативных реакций.

Впервые различное влияние магнитных и немагнитных изотопов было продемонстрировано в опытах с выделенными фосфорилирующими ферментами и изолированными митохондриями [2-3]. Наличие магнитного изотопа магния  $^{25}\text{Mg}$  в активном сайте фермента увеличивало выход АТФ по сравнению с немагнитными изотопами  $^{24,26}\text{Mg}$ . Магний имеет три стабильных изотопа  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{25}\text{Mg}$  и  $^{26}\text{Mg}$  (природное содержание 78.60%, 10.11%, 11.29%, соответственно), из которых только  $^{25}\text{Mg}$  имеет магнитное ядро (спин  $I=5/2$ ). Впоследствии вышел цикл работ о магнитно-изотопных эффектах магния  $^{25}\text{Mg}$ , кальция  $^{43}\text{Ca}$  и

<sup>67</sup>Zn цинка в синтезе АТФ и ДНК [3-4]. Обнаруженные МИЭ в синтезе АТФ и ДНК [2-4] заложили основу для появления нового научного направления – магнитной изотопии и спиновой биохимии. Однако оставалось загадкой, будет ли магнитно-изотопное влияние отражаться на одно- и многоклеточных организмах в процессе роста, и способны ли они различать тип изотопа – магнитный или немагнитный. Поиск ответа на эти вопросы и стало целью данной работы.

В качестве объекта исследования выбраны хорошо изученные микроорганизмы – бактерии *Escherichiacoli*, бесплазмидный штамм K12TG1. Бактерии культивировались в питательных средах М9, в которых сульфат природного магния был полностью заменен на изотопные аналоги: <sup>24</sup>MgSO<sub>4</sub>, <sup>26</sup>MgSO<sub>4</sub> для немагнитных и <sup>25</sup>MgSO<sub>4</sub> для магнитного изотопов магния. Контролем служила смесь изотопов в их природном соотношении. Бактерии, растущие на среде с магнитным изотопом магния <sup>25</sup>Mg быстрее адаптировались к новой питательной среде. Константа скорости роста таких микроорганизмов также увеличивалась на 10-15% по сравнению с клетками, растущими на средах с немагнитными изотопами магния. Измерение КОЕ на стационарной фазе роста показало, что их количество выше в 1,5-2 раза в случае, когда бактерии *E. coli* растут в среде с магнитным изотопом магния <sup>25</sup>Mg. Магнитную природу обнаруженных эффектов доказывает отсутствие достоверных различий в регистрируемых показателях (продолжительность адаптационной фазы, скорость роста КОЕ) между немагнитными изотопами магния <sup>24</sup>Mg и <sup>26</sup>Mg [5].

Описанные МИЭ магния демонстрируют уникальное свойство микробиологических объектов - чувствительность бактерий *E. coli* к наличию магнитного момента у ядра изотопа магния <sup>25</sup>Mg. *Escherichiacoli* – самый распространённый объект, используемый для получения изотопно-меченых белков. Для этих целей бактерии *E. coli* культивируют в присутствии самых различных стабильных изотопов (азота, углерода, водорода) уже несколько десятилетий [6]. При этом данные о различном влиянии магнитных и немагнитных изотопов на бактерии в процессе роста получены впервые.

Усиление МИЭ магния оказалось возможным с помощью постоянных магнитных полей: КОЕ клеток *E. coli*, выращенных на среде М9 с магнием <sup>25</sup>Mg, было выше до 4-х раз, чем у бактерий, культивированных в среде с немагнитными <sup>24</sup>Mg и <sup>26</sup>Mg изотопами в постоянных магнитных полях 76-85 мТл [5]. Интересно, что в экспериментах с магнитными полями значение КОЕ бактерий, культивируемых на среде М9 с естественным соотношением изотопов магния, было выше, чем у клеток *E. coli*, выращенных на среде с немагнитными изотопами, но ниже, чем у клеток с магнитными <sup>25</sup>Mg. Это является дополнительным доказательством стимулирующего влияния магнитных ядер <sup>25</sup>Mg на внутриклеточные процессы, так как природный магний на 10,11% состоит из магнитного изотопа. Внешнее постоянное магнитное поле усилило действие этих магнитных ядер.

Влияние изотопов магния было исследовано и на ключевой феномен микроорганизмов, представляющий особый интерес для медицины – это антибиотикорезистентность. Антимикробная активность также оказалась магнито-

чувствительным процессом, зависимым от наличия ядерного спина и магнитного момента у изотопа магния [7]. Обнаружены МИЭ  $^{25}\text{Mg}$  в резистентности бактерий *Escherichiacoli* к ципрофлоксацину, левофлоксацину и налидиксовой кислоте из группы хинолонов/фторхинолонов, амикацину и тобрамицину из группы аминогликозидов и клиндамицину из линкозамидов. Резистентность к этим антибиотикам отличалась именно для бактерий, которые культивировались на среде с магнитным изотопом магния  $^{25}\text{Mg}$  по сравнению с немагнитными  $^{24,26}\text{Mg}$  и природным магнием, что говорит именно о магнитной природе эффекта. При этом в случае хинолонов/фторхинолонов магнитный магний  $^{25}\text{Mg}$  усиливал действие антибиотика, а для других групп – ослаблял.

Особый интерес представляет МИЭ магния в резистентности к хинолонам. Для этой группы наблюдается потенцирование антимикробных средств изотопом магния. При определении антимикробной активности к налидиксовой кислоте и ципрофлоксацину с помощью диско-диффузионного метода зона задержки роста бактерий *E. coli*, инкубированных с магнитным магнием  $^{25}\text{Mg}$ , была больше на 9.5-13.5 % для этих антибиотиков по сравнению с клетками *E. coli*, инкубируемыми на среде М9 с  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{26}\text{Mg}$  или природным магнием Mg. При росте микроорганизмов в жидкой минимальной среде М9 с концентрацией ципрофлоксацина 1/2 от МИК скорость роста бактериальной культуры, растущей с магнитным изотопом  $^{25}\text{Mg}$ , уменьшается на 80% по сравнению с контролем, в то время как для других клеток не более, чем на 50%. Исследование совместного влияния изотопов магния и антибиотиков различных групп на морфологию бактерий *Escherichia coli* с помощью атомно-силовой микроскопии подтвердило МИЭ магния для антибиотиков группы хинолонов/фторхинолонов. Нарушается процесс деления клеток и происходит их частичное разрушение. Об этом свидетельствуют наличие перетяжек, следы лизиса, а также изменение ширины и высоты бактерий, выращенных с магнитным магнием, по сравнению с контрольными образцами. Прикладное значение обнаруженных МИЭ состоит в применении магнитного изотопа магния для усиления действия антибиотика - его потенцировании.

Важно отметить, что культивирование бактерий *E. coli* на минимальных питательных средах М9 с изотопами магния влияет не только на показатели роста клеток, но также и на биохимические характеристики. Впервые была обнаружена необычная зависимость между содержащимся в среде изотопом магния и внутриклеточным элементным составом зрелых микроорганизмов. Так, содержание изотопа магния в питательной среде изменяет относительную концентрацию двухвалентных ионов  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ , а также Na, K, P, S. Очевидно, что роль магнитных изотопов в клетках не сводится к ускорению отдельных ферментативных процессов. Магнитно-изотопное обогащение клеток и изменение биологических процессов включает процессы внутриклеточной регуляции, что приводит к удалению одних химических элементов и накоплению других.

В работе описаны экспериментальные данные подтверждающие, что микробы способны чувствовать наличие магнитного момента у ядра изотопа

магния  $^{25}\text{Mg}$ . Бактерии *E. coli* обладают удивительным и уникальным свойством – магнитной чувствительностью, для которой не требуется наличие специальных органелл или внутриклеточных включений наподобие магнетита. Полученные результаты уже заложили фундамент для развития магнитной изотопии в микробиологии и биофизике, а также имеют важное прикладное значение в фармацевтике и медицине как средство управления метаболизмом бактерий.

Работа выполнена в рамках государственного задания № FSGU-2020-0003, а также при поддержке Совета по грантам Президента Российской Федерации, 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, No 4. –P. 261-272.
- 2 Buchachenko, A.L. Magnetic isotope effect in chemistry and biochemistry / A.L. Buchachenko. –New York: Nova Science Publishers, 2009. –149 p.
- 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 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.
- 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 McIntosh, L.P. Biosynthetic incorporation of  $^{15}\text{N}$  and  $^{13}\text{C}$  / L.P. McIntosh, F.W. Dahlquist // Q. Rev. Biophys., 1989. – Vol. 23. – P. 1–38.
- 7 Лету́та, У. Г. Влияние изотопов магния на чувствительность бактерий *E. coli* к антибиотикам / У. Г. Лету́та, А. С. Биндер, Т. А. Тихонова // Микробиология, 2020. - Т. 89, № 3. - С. 284-289

## **ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ И ВОСПИТАНИЯ**

**Манаков Н.А., д-р физ.-мат.наук., профессор,**

**Гуеньков В.В., канд.физ.-мат.наук**

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

Отличительной чертой человека как биологического вида является, вероятно, стремление создавать и совершенствовать орудия труда. Многочисленные мелкие изменения орудий труда привели к научно-техническому прогрессу, изменению естественной среды обитания, возникновению цивилизации.

Трудно представить, сколько проб (экспериментов) и ошибок пережил человек, познавая окружающий мир, изобретая орудия охоты, войны и труда, адаптируясь в окружающей среде, преобразуя среду обитания, создавая социальные, политические и общественные организации и т. п.

Поэтому поддержка и развитие исследовательских навыков у школьников и студентов – одна из главных задач обучения и воспитания. Не случайно в настоящее время повсеместно проводятся многочисленные конференции, на которых учащиеся представляют свои исследовательские работы. При этом они овладевают навыками сбора, обобщения и анализа информации, планирования эксперимента, проведения исследований и формулировки их результатов, подготовки статей, докладов (презентаций) и публичных выступлений.

К сожалению, во многих случаях исследовательская деятельность как школьников, так и студентов ограничивается подготовкой рефератов, представляющих эклектичный набор мало осмысленных материалов, скачанных из интернета. И часто это результат плохой организации начального этапа исследовательской работы или некомпетентность преподавателя в понимании сути науки как деятельности по добыванию и доказательству достоверности нового знания.

Современная физика, как и другие науки, базируется на наблюдениях, измерениях и эксперименте. Поэтому так важно на первом этапе приобщения учащихся к научной деятельности уделять данным компонентам повышенное внимание. Исследования школьников полагаем необходимым строить именно на данной основе и ставить доступные и понятные ребенку цели исследования.

На самом раннем этапе исследования учащийся совместно с преподавателем должен ответить на следующие вопросы. К какой общей проблеме относится выбранная тема исследования? Какой материал необходимо привлечь для ее изучения? Откуда его взять (из опубликованных источников, собрать самому)? Какие результаты и выводы уже получены предшествующими исследователями? Что именно не изучено совсем или изучено недостаточно в данном вопросе? Что нового предполагается узнать (доказать, выяснить) в результате планируемого исследования и зачем? Как это может быть использовано практически? [1]

Ответы на эти вопросы позволят сформулировать цель, задачи и гипотезу исследования, выбрать объект и предмет исследования. Например, объектом исследования может быть муравейник на даче, а предметом исследования – взаимоотношения муравьёв и насекомых вредителей, конфигурация муравьиных маршрутов и т. п. Целью исследований в данном случае может быть роль муравьёв в распространении тли в огороде, а гипотезой исследования – предположение о том, что муравьи распространяют тлю по всему огороду и охраняют её от хищных насекомых.

В этом случае следует поставить следующие задачи исследования:

1. Выявить основные муравьиные маршруты на участке.
2. Зафиксировать факты переноса тли муравьями на новые участки огорода.
2. Определить и зафиксировать насекомых поедающих тлю.
3. Изучить характер взаимодействия этих насекомых с муравьями.

Исследовательская работа может быть индивидуальной или коллективной. В последнем случае на демократической основе необходимо выбрать руководителя (координатора) исследования и распределить задачи исследования между исполнителями [2]. При этом сбор информации, формулировка цели, задач, гипотезы, объекта и предмета исследования, обсуждение результатов исследования, подготовка статьи, доклада (презентации) осуществляется коллективно.

Сбор информации – это важный и длительный процесс, который завершается только после подготовки доклада или статьи. Он включает ряд этапов: поиск источников; ознакомительное чтение; углубленное чтение с выписками отдельных фрагментов; использование источников в процессе исследования для объяснения и интерпретации собственных результатов; составление и грамотное оформление библиографического списка.

Список использованных источников является важной составляющей исследовательской работы, влияющей на её оценку. Он дает возможность читателю по указанным источникам более глубоко и детально ознакомиться с состоянием рассматриваемого вопроса. Кроме того, он в определенной степени характеризует эрудицию авторов (автора) работы, широту их кругозора, степень новизны и значимости работы. Если в списке только учебники, учебные и методические пособия и нет работ последних лет, то либо рассматриваемый вопрос не представляет интереса на настоящий момент, либо у авторов нет информации о последних работах в этой области.

Очень важно дать грамотное библиографическое описание использованных источников, необходимое для того, чтобы читатели могли при необходимости легко их найти [1].

После того, как были определены объект и предмет исследования, цель и задачи, необходимо выбрать методы (метод) исследования. Они могут быть как теоретические, так и экспериментальные. В первом случае необходимо реалистично оценить потенциальные возможности учащихся, во втором — выяснить возможности использования имеющегося оборудования или возможности изго-

товления необходимого оборудования. Далее необходимо составить детальный план проведения теоретического анализа или эксперимента.

Еще более важными являются этапы наблюдения над изучаемыми объектами, фиксация и измерение наблюдаемого [3-5 и др.]. Эксперимент является универсальным способом изучения процессов и явлений. Он позволяет многократно воспроизводить протекающий в действительности процесс или явление в лабораторных условиях, контролируя и варьируя его параметры. То есть с помощью эксперимента можно получить серию наблюдений одного и того же явления в одних и тех же или в разных условиях.

Так например, если наблюдать падение различных тел под действием силы тяжести в естественных условиях, то трудно прийти к заключению, что они падают с одинаковым ускорением. Но если падение разных тел наблюдать в колбе, из которой откачали воздух, то это становится очевидным. Особенно важен эксперимент при изучении редких быстро или очень медленно протекающих природных явлений. В настоящее время эксперимент как универсальный общенаучный метод исследования широко применяется не только в естественных, но и в гуманитарных науках [см. например, 6,7].

В научной работе важно последовательно и грамотно описать процедуру эксперимента с учетом того, что по данному описанию любой человек может повторить исследование и получить такие же результаты в пределах стандартной для данного случая точности измерений. Поэтому описание эксперимента, как правило, должно включать следующие блоки: условия и последовательность его проведения; методы наблюдения/измерения и наблюдаемые параметры; количество опытов и обработка полученных данных. Затем представляются систематизированные результаты проведенного эксперимента, которые, по возможности, сопоставляются с уже известными из источников, рассматриваются отличающиеся и новые результаты, полученные в данном исследовании, делаются выводы.

Результаты проведенного исследования необходимо тщательно зафиксировать, а затем проанализировать. Часто интересные, необычные результаты могут быть связаны с ошибкой вычислений, с неисправностью прибора, с неправильным использованием прибора или ошибочной методикой измерения. При анализе результатов исследования используются материалы найденных источников информации, справочники, консультации со специалистами. При сомнениях в полученных результатах полезно провести повторные эксперименты (расчеты), использовать другие приборы при измерениях или другие методы.

После соответствующего анализа полученных результатов можно приступить к написанию статьи или доклада. Полезно предварительно составить план изложения материала статьи (доклада) и подготовить её развернутый реферат.

Полезно познакомить учащихся с языковыми стандартами организации реферата, с основными чертами научного стиля речи, с общепринятой структурой научной статьи. Разделы статьи следует расположить в следующем порядке: аннотация; введение; экспериментальный раздел; аналитический (теорети-

ческий) раздел; заключение; список использованных источников; приложение (или приложения). Некоторые из перечисленных выше разделов могут отсутствовать, а порядок следования разделов может быть иной, что необходимо согласовать с научным руководителем.

Во вводной части статьи обычно отражается актуальность рассматриваемого вопроса со ссылками на источники, характеристика предмета, объекта (объектов), а также методов исследования; выдвигаемая гипотеза; научная новизна работы, ее теоретическая и практическая значимость.

Затем, как правило, излагается методика эксперимента (теоретического анализа). При этом часто допускаются следующие ошибки:

1. Описание методики исследования дается в слишком общей форме неясно и двусмысленно.

2. Не обосновывается выбор методики исследования, не проводится ее сравнение с другими, приемлемыми в данном случае.

3. Выбранная методика устарела или дискредитировала себя как научный метод.

4. Не проводится оценка достоверности, точности, надежности результатов, получаемых с помощью выбранной методики исследования.

После описания методики эксперимента обычно следует основная часть статьи (аналитический, теоретический разделы), в которой излагаются результаты исследования. Экспериментальные результаты обычно фиксируются в виде таблиц и подвергаются статистической обработке для оценки точности и надежности полученных результатов [3–5 и др.]. Для анализа и осмысления результатов эксперимента их часто представляют в виде схем, графиков, гистограмм, которые удобно делать на компьютере с использованием приложения Microsoft Office – Microsoft Excel.

Заключение в краткой форме подводит итоги всей работы в виде тезисов или выводов, согласованных с целью и задачами исследования; указывает теоретическую и практическую ценность полученных результатов, их возможное внедрения, намечает дальнейшие перспективы изучения данного вопроса.

Следует помнить, что стиль изложения статьи (научный стиль) существенно отличается от разговорного или стиля художественных произведений точностью, подчеркнутой логичностью, однозначным выражением мысли, которая строго аргументируется. При этом используются специфические языковые средства научного стиля, подробно описанные в работе [1].

Устный доклад для выступления на конференции строится на основе введения, развернутого реферата содержания работы и заключения. Следует помнить, что обо всем рассказать в отведенное время не удастся, поэтому для доклада необходимо отобрать наиболее значимые и интересные результаты, факты, выводы.

Наиболее важные и интересные результаты следует представить в виде слайдов или плакатов. Они облегчат ваше выступление, сделают более доступным его восприятие слушателями и придадут дополнительную значимость вашей работе.

Доклад следует рассчитывать на 5 – 10 минут (в зависимости от регламента) и построить следующим образом: название темы работы, обоснование ее новизны и практической значимости (можно указать мотивы выбора темы); цель и задачи работы; характеристика предмета и объекта исследования; методы исследования; основные результаты и выводы работы; в заключении можно указать дальнейшие перспективы исследования рассматриваемой проблемы.

После доклада обычно предстоят ответы на вопросы слушателей. При этом часто возникают следующие коммуникативно-речевые ситуации:

1. Вопрос понятен и на него дается развернутый, аргументированный ответ, показывающего эрудицию докладчика.

2. Вопрос непонятен. Тогда следует попросить уточнить или повторить вопрос и затем отвечать на него.

3. Вопрос понятен, но ответить на него затруднительно. В этом случае возможны реплики: *Это не входило в задачи данной работы; Это выходит за рамки настоящей работы; Этот вопрос, к сожалению, не рассматривался в работе (по какой-либо причине) и т. п.*

В процессе исследовательской деятельности и оформления её результатов учащийся сталкивается с разноаспектными задачами, решение которых развивает его интеллект, коммуникативные способности, формирует естественнонаучное мировоззрение, приучает к рациональному подходу при решении различных житейских проблем.

#### Список литературы

1. Манаков, Н.А. Ваша первая научная работа: методические указания / Н.А. Манаков, Г.Г. Москальчук. – Оренбург: ОЦДНТТ, 2006.— 33 с.

2. Манаков, Н.А. Ваш первый научный проект: методические рекомендации / Н.А. Манаков, О.Ю. Наумова. – Оренбург: ОЦДНТТ, 2006. – 35 с.

3. Сквайрс Дж. Практическая физика / Дж. Сквайрс; перевод с англ. под ред. Е.М. Лейкина. – М. : Мир, 1971. – 246 с.

4. Тьюки, Дж. Анализ результатов наблюдений. Разведочный анализ / Дж. Тьюки; пер. с англ. А.Ф. Кушнира, А.Л. Петросяна, Е.Л. Резникова; под ред. В.Ф. Писаренко. – М. : Мир, 1981. – 693 с.

5. Штремель, М.А. Инженер в лаборатории (организация труда) [Текст] / М.А. Штремель. – М. : Металлургия, 1983. – 128 с.

6. Москальчук, Г.Г. Экспериментальные методики формирования наивно-теоретических представлений студентов-филологов об абзаце и сложном синтаксическом целом / Москальчук Г.Г. // [Вестник Оренбургского государственного педагогического университета. Электронный научный журнал](#). 2012. № 2. С. 87–93.

7. Москальчук, Г.Г. Способы оценки целостных качеств письменных работ учащихся / Г.Г. Москальчук, Н.В. Солодянкина // [Педагог: наука, технология, практика](#). 2004. № 2. С. 70.

# СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ И ДЕФОРМАЦИИ СДВИГА

Носаев Е.В.

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

## Введение

Углеродные материалы широко применяются в современной науке и технике. При этом возрастает потребность в новых углеродных материалах и легкость получения углеродных материалов. В данной работе предлагается метод синтеза углеродных материалов из аморфного углерода путём сдвиговой деформации под высоким давлением.

Главным принципом является очень высокая скорость реакции зависимой от деформации сдвига. Поэтому работа с углеродными материалами могут дать большой прогресс, в котором будут получены твердые материалы, приближающиеся к твердости алмаза. Когда уменьшается объём в твердых телах естественным образом повышается плотность атомов в кристаллической решетке, зачастую наблюдается перестройка кристаллических решеток. После таких изменений твёрдое тело с уже новым расположением атомов кардинально отличается от исходной структуры. Например, получение алмаза из графита, в результате алмаз уже имеет жесткие связи, и тем самым обуславливает диэлектрические свойства. Важнейшей закономерностью реакций полимеризации в условиях деформации является зависимость хода реакции от величины деформации сдвига.[1] Процесс образования полимеров можно остановить на любой стадии— стоит только прекратить деформацию реакционной смеси, и, наоборот, снова возбудить полимеризацию, если продолжить деформирование реакционной смеси.

В проведенных экспериментах изучается интенсивность физических и химических процессов зависимых от величины деформации сдвига, в соответствии с деформацией сдвига соответствует ли угол поворота наковальни. В большинстве случаев наблюдается раскалывание образца на поверхности наковален, для этого используют метод окрашенных таблеток. Суть этого метода, на вещество наносится краситель, но это не должно оказывать особое влияния на напряжение сдвига и пластические свойства испытываемого образца.[2] В ходе использования этого метода, окрашенная зона соответствует углу поворота наковален, в этих методах встречается иной результат, когда угол смещения окрашенной зоны значительно меньше угла поворота пуансонов. Для оценки величины деформации вводится понятие коэффициента деформации и с его помощью устанавливается связь между углом поворота наковален и углом окрашенной зоны.

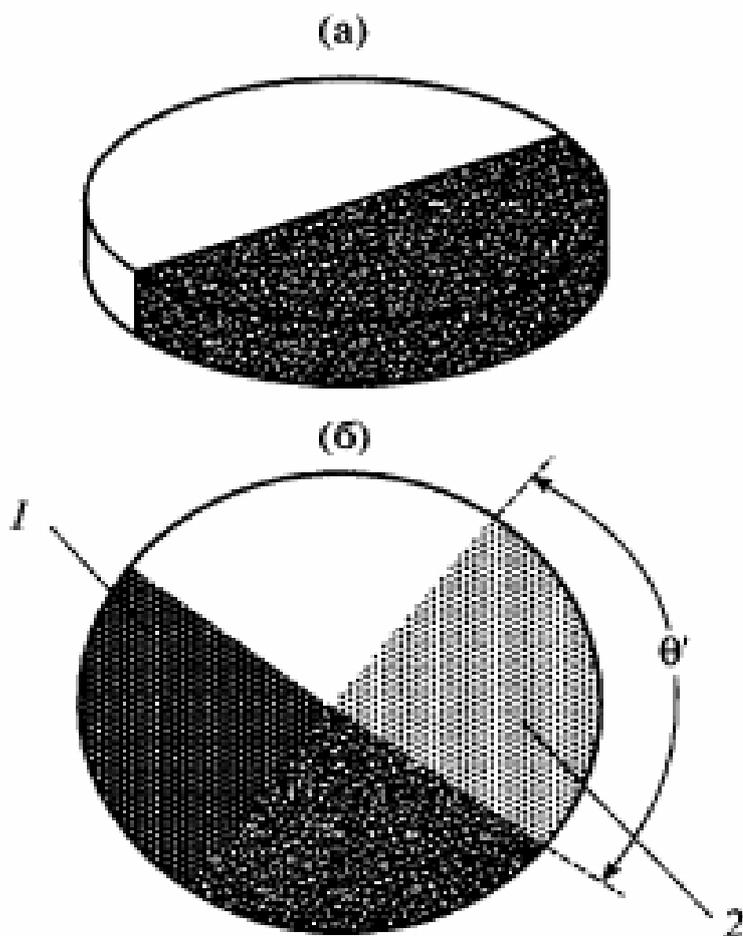


Рисунок 1 - Метод частично окрашенных таблеток как используемый для изучения движения вещества при ДС + ВД. (а) Исходный образец, составленный из двух дисков (окрашенного и неокрашенного) испытуемого вещества (б) вид образца после поворота наковальня на угол  $90^\circ$

Для создания высокого давления и деформации сдвига была собрана установка на базе гидравлического пресса. Эксплуатация пресса была направлена на получение сверхтвердых углеродных материалов путем деформацией сдвига под давлением. Образец помещался на наковальни заранее в установленную отпарку из полистирола и подвергался сжатию под давлением. Для сравнения в начале испытывалось обычное прессование, которое не дало нужных результатов и аморфное состояние углерода слабо переходило в однородное твердое тело. Когда в установку добавлялся подшипник и уже применялась методика, применили деформацию сдвига, это дало при первом же эксперименте хорошо устойчивую связь и образцы были уже твердыми.

Исходным материалом был аморфный мелкий порошок из сажи. Основными источниками углерода сажи являются двигатели внутреннего сгорания (в основном дизельные), сжигание древесины и угля в жилых помещениях, электростанции, использование тяжелого мазута или угля, сжигание сельскохозяйственных отходов, а также лесные пожары. Сажа относится к мелким частицам (диаметр менее  $2,5 \text{ мкм}$ ), но в основном встречается в самой маленькой частиц из них, равен или меньше  $1 \text{ мкм}$ . По этим двум характеристикам, углерод сажи

позволяет лучше понять поведение загрязнения частицами, связанного с источниками горения.

Опыт с углеродным порошком, добытого из выхлопной трубы дизельного автомобиля, проводили при помощи деформации сдвига: образец, помещенный между наковальнями, сжали под давлением 50 бар, нижний пуансон повернули порядка  $45^{\circ}$ . В результате чего получился твердый-хрупкий образец с гладкой монолитной поверхностью.



Рисунок 2 –Аморфный углерод после ДС и ВД

Центральная часть образца была очень твердой. Длина образца составила 15 мм.

Также была проведена экспериментальная оценка электрического сопротивления образцов. Оказалось, что вдоль длинной оси образца сопротивление  $R \sim 400$  КОм. В дальнейшем планируется провести более тщательные измерения электрических свойств и провести рентгеноструктурные исследования.

**Обсуждение результатов.** Отработаны методики деформации сдвига, которые дали удовлетворительные результаты по созданию твердых образцов с приложением давления. Из аморфного углерода (сажи) получены твердые углеродные материалы, в опыте с сажей синтез при наложении давления был положительным, в результате чего получился твердый монолитный образец. Также при наложении более высокого давления образец становился твердым и более плотным

#### Список литературы

- 1) Верещагин, Л.Ф. Об остаточной прочности при сдвиге под давлением/ В.А. Шапочкин, Л.Б. Пирогов, Л.Ф. Верещагин ФММ. - 1960.- Т.10. - Вып.5.

2) Верещагин, Л.Ф. Поведение окислов при действии высокого давления с одновременным приложением сдвига/ Е.В. Зубова, К.П. Бургина, Л.Ф. Верещагин, ДАН СССР.- 1971.- Т.196.- №4.- С.817.

# СОЧЕТАНИЕ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ СИНТЕЗА УГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА

**Носаев Е.В.**

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

Частым явлением в природе и в повседневной деятельности человека встречается вполне известная деформация вещества. К примеру, в природе это реализуется глубоко в недрах земли, при тектонических явлениях. Но мы рассмотрим конкретно деформацию сдвига (ДС) под высоким давлением (ВД), как это будет воздействовать на твёрдые углеродные вещества. В промышленности работа с твердыми материалами встречается довольно часто, используется в работе и обработке металлов. В контакте узлов трения всегда создаются деформация сдвига и высокое давление. Работы, связанные с исследованием в этой области, позволили получать соединения путём деформации сдвига и высокого давления, но в направлении работы с углеродными материалами исследований слишком мало. В ходе изучения были установлены основные закономерности химических процессов при деформации сдвига и высокого давления.

Главным принципом является очень высокая скорость реакции зависимой от деформации сдвига. В настоящее время известно недостаточно публикаций изученных в области деформации сдвига и высокого давления. Поэтому работа с углеродными материалами могут дать большой прогресс, в котором будут получены твердые материалы, приближающиеся по твердости алмаза.

Важнейшей закономерностью реакций полимеризации в условиях деформации является зависимость хода реакции от величины деформации сдвига. Процесс образования полимеров можно остановить на любой стадии — стоит только прекратить деформацию реакционной смеси, и, наоборот, снова возбудить полимеризацию, если продолжить деформирование реакционной смеси. Обнаруженная авторами закономерность может быть распространена (что доказано экспериментом) и на другие химические реакции, например реакции органического синтеза. Научное значение открытия состоит в выявлении закономерности протекания физико-химических процессов, происходящих, при деформации твердых веществ под действием неравновесных механических напряжений. Такие процессы, в частности, возникают в различных технологических операциях, при которых производится механическая обработка веществ, а также во время эксплуатации всевозможных узлов трения, экструдеров, машин для литья под давлением, вальцевания и т. д.

Практическая ценность открытия определяется тем, что оно обеспечивает возможности синтеза полимеров из веществ, которые с трудом полимеризуются или не полимеризуются при обычных условиях. Используя открытие, можно осуществить процессы полимеризации, протекающие в очень короткие промежутки времени, и при этом получать полимеры, не содержащие примесей,

свойственных высокомолекулярным соединениям, получаемым традиционными методами. Установленная закономерность служит созданию новых высокоэффективных химических технологий, связанных с другими химическими реакциями, например такими, как реакции разложения или органического синтеза» [1].

Реакции органических веществ при деформации сдвига высокого давления подчиняется фундаментальным кинетическим закономерностям. Некоторые протекания химических процессов зависит от глубины протекания и от величины деформации сдвига. Пример можно привести зависимость угла поворота наковален (величина, пропорциональная деформации сдвига  $x$ ).

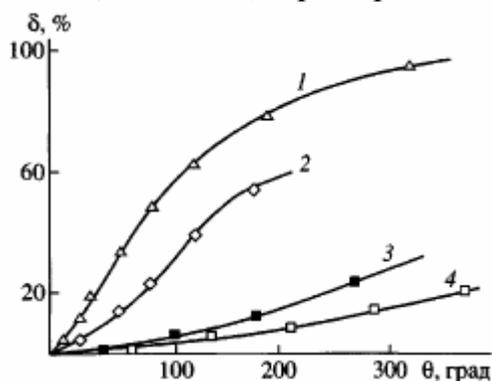


Рисунок 1 - Зависимость выхода полимера от угла поворота наковален. Полимеризация (1) акриламида, (2) метакриламида, (3) малеинового ангидрида, (4) - реакция фумаровой кислоты с водой, синтез яблочной кислоты

Стоит отметить, что при высоком давлении деформации сдвига глубина конверсии реагентов почти не зависит от скорости деформации.

Закономерность высокой реакционной способности в момент деформации образца возникают зоны, в которых из-за неоднородности деформирования вещества резко повышается температура. Температура в таких горячих точках не превышает температуру плавления вещества при заданном давлении. Концентрация таких локальных разогревов объясняется так, разогрев мономера при деформации происходит при температуре 100°C, превышающий метилметакрилата при данном давлении. Это опровергает существование локальных разогревов, температура которых не может быть выше среды.

Возникновение в сильно сжатых твердых образцах в момент их кручения, достигает величины, подобной прочности химических связей. В настоящее время обнаружено достаточно химических реакций, способных проникать в условиях деформации высокого давления.

Деформация сдвига и высокого давления очень похожи на методы интенсивной пластической деформации, которая осуществляется помещением образца между наковальнями и одновременным кручением одного из пуансонов.

Основная деформация создаётся за счёт угла поворота под давлением достигающие несколько ГПа. Приложенное давление в центральной части образца создает область препятствующая разрушению образца. Увеличивается сила трения между пуансонами, это дает возможность при большой силе трения де-

формировать образец в зависимости от крутящего момента наковальни. Обычно деформация сдвига металлов приводит к формированию новых структур. Одним из самых эффективных характеризуется аппаратура типа наковален. Под воздействием ударных волн помимо высокого давления и деформации вызывается значительные разогревы вещества, чем в большей степени и оказывает влияние на исходные данные образца.

Давление создаваемое на наковальнях, является усредненной, потому что прилагаемая нагрузка делится на площадь меньшей поверхности пуансонов. Если не контролировать давление, то оно будет распределено неравномерно, что приводит к неточности оценки эффектов, вызванных ДС и ВД. Распределение давления изменяется профиль образца с увеличением нагрузки, прилагаемым к наковальням. При небольших давлениях нагрузка находится в центре, если увеличивать толщину образца при одинаковой нагрузке давление будет проходить глубже в образец. Существует некоторый интервал нагрузок для пуансонов и конкретных образцов, при котором давление распределяется равномерно.[2] Это позволяет проводить эксперименты в условиях нормального распределения в исследуемом веществе. Кручение наковален даёт несущественное влияние на распределение давления. Если толщина образца подобрана так, что существенно не изменяется толщина, то давление распределено практически одинаково.

Установка для проведения экспериментов по взаимодействия ДС и ВД в углеродных материалах представляет собой гидравлический пресс со встроенными наковальнями. Одну из этих наковален можно вращать на определенные углы с различной скоростью. Испытуемый образец помещали между пуансонами, сжимали его, а затем производили вращение одной из наковален. В результате получались твердые хрупкие образцы с гладкой монолитной поверхностью.



Рисунок 2 - Установка в сборе

**Обсуждение результатов.** Отработаны методики деформации сдвига, которые дали удовлетворительные результаты по созданию твердых образцов с приложением давления. Получены твердые углеродные материалы, в опыте с сажей синтез при наложении давления был положительным, в результате чего получился твердый монолитный образец.

#### Список литературы

- 1) Брэдли, К. Применение техники высокого давления при исследовании твердого тела/ К. Брэдли. - М.: Мир, 1972.- 231с.
- 2) Верещагин, Л.Ф. Исследование силы сдвига материалов при гидростатическом давлении до  $17.103 \text{ кг/см}^2$  и выше/ В.А. Шапочкин, Л.Ф Верещагин ФММ.- 1959.- Т.7.- Вып.3.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СУГЛИНОК С БЕРЕГА РЕКИ ЧАГАН

**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 образовательное учрежде-  
ние высшего образования «Оренбургский государственный университет»**

В последние годы для исследований структурных и физико-химических свойств глинистых минералов все чаще используется ряд относительно современных физических методов. Один из них, спектроскопия электронного спинового резонанса (ЭПР), стал теперь важным методом исследования минералов типа глины. Большое количество публикаций были полностью или частично посвящены интерпретации спектров ЭПР, обусловленных парамагнитными ионами или радикалами, связанными с глинами. [1]

Хотя метод ЭПР ограничен определенным диапазоном парамагнитных частиц, он может давать широкий спектр подробной информации, касающейся:

- возникновение и расположение парамагнитных замещающих примесей и дефектов решетки (захваченными дырками или электронными центрами) в глинах;
- степень структурного беспорядка и характер тепловых фазовых переходов минералов глины;
- характер парамагнитных примесей, связанных с глинистыми поверхностями, включая органические радикалы и оксиды и гидроксиды переходных металлов;
- подвижность гидратированных ионов в межслойном пространстве расширяющихся кристаллических глин
- использование ионов переходных металлов или катионов органических радикалов в качестве «спиновых зондов»;
- распределение узлов решеточного заряда в глинах;
- реакции адсорбированных молекул на внешней и межслойной поверхностях, связанных с образованием и стабилизацией свободных радикалов.

Для глинистых минералов часто можно получить некоторую ориентационную информацию, даже когда монокристаллы недоступны. Таким образом, измерения ЭПР на осажденных пленках или порошков с магнитным полем, ориентированным под разными углами к образцу можно ожидать некоторую анизотропию.

Моделирование линий ЭПР может обеспечить количественное определение степени ориентации в глинах и других пластинчатых структурах.

ЭПР спектрометр CMS 8400 предназначен для измерения спектров электронного парамагнитного резонанса в жидких и твердых образцах для выявления парамагнитных веществ и детектирования свободных радикалов.

Спектрометр CMS 8400 обеспечивает высокую чувствительность и разрешающую способность, сравнимые с аналогичными параметрами стационарных ЭПР спектрометров, во много раз превышающих CMS 8400 по цене и габаритным размерам. Ключевыми особенностями спектрометра являются компактный дизайн электромагнита и СВЧ – тракта. Компактное исполнение спектрометра и малая потребляемая мощность позволяют использовать его в различных условиях, вплоть до полевых (в передвижном исполнении) [2,3].

Автоматизация управления и обработки результатов позволяют пользователю легко адаптировать спектрометр к решению исследовательских задач. Встроенный частотомер, датчики магнитного поля и температуры, расчет g-фактора, широкий динамический диапазон предусилителя и АЦП делают спектрометр привлекательным для использования в рутинных исследованиях и позволяют решать уникальные задачи в науке и технологиях [4,5].

Для предварительных экспериментов и для отработки методик ЭПР исследований керамических материалов и их сырья была использована Чаганская суглинка с берега реки Чаганв черте г. Уральск, ЗКО.

Для получения спектров ЭПР образцы суглинки в виде порошка помещались на полистирольную подложку, с двух сторон заклеивались скотчем и закреплялась с стандартной ЭПР ампуле. Эта ампула использовалась для совмещения полистирольной подложки со стандартными креплениями спектрометра ЭПР и для оптимального погружения керамических образцов в СВЧ резонатор.

После нескольких попыток найти оптимальные условия записи спектров ЭПР были выбраны следующие параметры:

Развертка магнитного поля – 200мТл

Центр развертки – 336мТл

Модуляция – 75 мкТл

На рисунке 1 представлен спектр ЭПР суглинки при большой развертке магнитного поля, записанный при температуре 29°С.

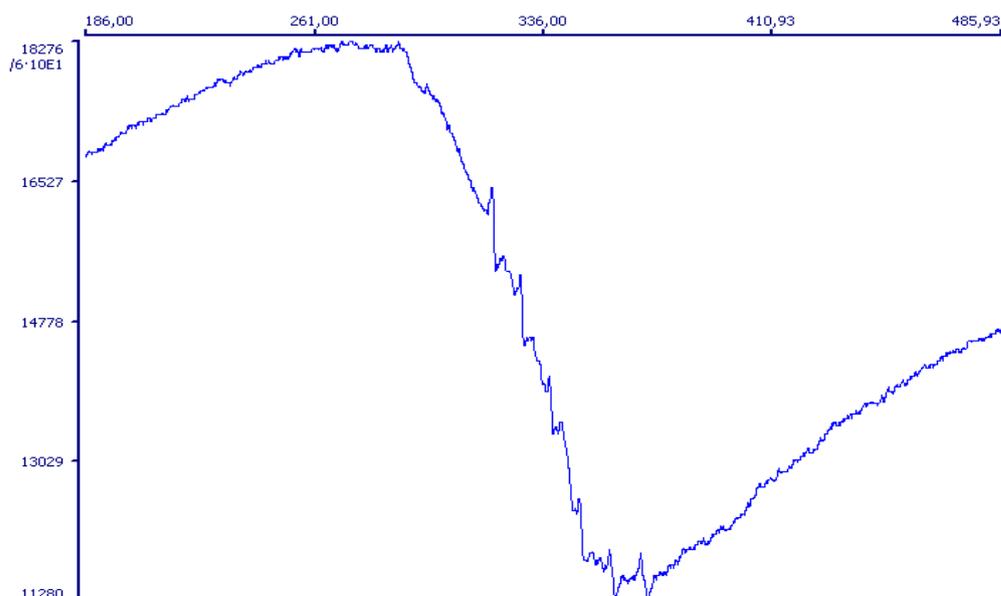


Рисунок 1 – Спектр ЭПР Чаганская суглинка с берега реки Чаган

Наличие посторонних примесей в образце может привести к появлению обменных процессов и, следовательно, к уширению линий. Обычно такими примесями являются нейтральные молекулы (в случае ион-радикалов) или растворенный кислород.

На ширину линий в спектре ЭПР оказывает влияние множество факторов, поэтому регистрация хорошо разрешенного спектра представляет собой достаточно сложную задачу и требует подбора целого ряда условий.

#### Список литературы

1. ЭПР Спектрометр CMS 8400: [электронный ресурс]. – Режим доступа. <http://lab.adani.by/products/produktovaya-liniya/epr-spektrometr-cms-8400/>. 06.06.2018.
2. Блюменфельд, Л.А. Электронный парамагнитный резонанс / Л.А. Блюменфельд, А.Н. Тихонов. - Физика. 1997. - с. 185-187.
3. EPR: Theory: [электронный ресурс]. – Режим доступа. [https://chem.libretexts.org/Core/Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry/Spectroscopy/Magnetic\\_Resonance\\_Spectroscopies/Electron\\_Paramagnetic\\_Resonance/EPR%3A\\_Theory](https://chem.libretexts.org/Core/Physical_and_Theoretical_Chemistry/Spectroscopy/Magnetic_Resonance_Spectroscopies/Electron_Paramagnetic_Resonance/EPR%3A_Theory)- 06.06.2018.
4. Черкасов В.К. Методы ЭПР и ЯМР в органической и элементоорганической химии / Ю.А. Курский, К.А. Кожанов, А.С. Шавырин, М.П. Бубнов, В.А. Куропатов.2010. – С. 4-18.
5. Krinichny, V.I. 2-mm wave band EPR spectroscopy of condensed systems. 1995. CRC Press, Inc– p. 17-18
6. Abragam A. Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions / Bleaney B. – Oxford: Oxford Academ, 2012. – p. 47-49

## **ПРОБЛЕМЫ ПРОВЕДЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОГО ПРАКТИКУМА ПО КУРСУ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ В УСЛОВИЯХ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ**

**Огерчук А.А. канд.пед.наук,  
Пискарёва Т.И., канд.тех.наук,  
Анисина И.Н., канд.тех.наук**

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

В условиях угрозы распространения коронавирусной инфекции большинство университетов по рекомендации Министерства науки и высшего образования РФ приняли решение о переходе на дистанционное обучение. Преподаватели вынуждены организовывать учебный процесс посредством дистанционных технологий обучения на основе доступных инструментов в электронной информационно-образовательной среде (ЭИОС). Однако часть дисциплин просто нельзя вывести полностью в онлайн, так как в рамках дистанционного обучения невозможно полноценно проводить лабораторные работы. Поэтому особенно важным становится вопрос применения информационных технологий в преподавании таких дисциплин для бакалавров инженерных направлений подготовки. Целью данной статьи является анализ проблем проведения лабораторного практикума в условиях дистанционного преподавания физики в вузе и нахождения актуальных путей их решения.

В современной образовательной среде компьютерное моделирование физических процессов и явлений, виртуальные демонстрации и компьютерные симуляции лабораторных работ широко распространены. Наиболее известным специализированным порталом является VirtualLab – проект, посвященный виртуальным образовательным лабораториям по физике, химии, биологии, экологии. Этот сайт отличается, в большинстве случаев линейностью опыта, т.е. вся последовательность действий и результаты опыта заданы заранее. Однако с его помощью можно решить задачу проведения лабораторных работ при отсутствии необходимого оборудования. Это бесплатный on-line ресурс

Виртуальный лабораторный практикум не может быть признан полноценной альтернативой реальной экспериментальной работе в полной мере. Совершенно невозможно подготовить полноценного специалиста инженерных направлений подготовки, который видел технический объект только на экране компьютера. Вместе с тем, виртуальные лабораторные работы обладают целым рядом преимуществ и являются достаточно эффективным средством для достижения поставленных образовательных целей. Вузовские планы организации учебного процесса по физике традиционно включают лабораторный практикум, однако, объем часов, отводимый для инженерных направлений подготовки бакалавров на этот вид работы, неуклонно сокращается. Большим недостатком в организации «реального» физического практикума по курсу общей физики в большинстве технических вузов является то, что он состоит из традиционного,

постоянного набора лабораторных работ, значительная часть которых уже морально устарела. В виртуальном практикуме, основанном на компьютерных моделях, студент попадает хорошо знакомую, по компьютерным играм, среду. и тяга к которой всем нам хорошо известна. Это создает мощную дополнительную мотивацию, значительно повышающую качество обучения.

Из-за ограниченности оборудования физических лабораторий студентам приходится выполнять и защищать работы по темам, которые ещё не освещались на лекциях, что вызывает определённые трудности, как для студентов, так и для преподавателя. При проведении виртуального практикума студенты могут выполнять лабораторные работы, соответствующие темам лекций и практических занятий, дополненные лекционными демонстрациями компьютерных физических опытов по этой теме. Существует также возможность проводить фронтальные лабораторные работы.

Виртуальные лабораторные работы обладают более наглядной визуализацией физических или химических процессов по сравнению с традиционными лабораторными работами. Например, появляется возможность более подробно и наглядно изучать такие физические процессы, как движение заряженных частиц, создающих электрический ток или принцип работы p-n-перехода, молекулярно-кинетические и термодинамические процессы, что способствует лучшему пониманию изучаемого явления. В ходе выполнения компьютерных лабораторных работ студенты могут наблюдать динамические иллюстрации изучаемых физических явлений и процессов, недоступных для наблюдения в реальном эксперименте и одновременно с ходом эксперимента наблюдать графическое построение соответствующих зависимостей физических величин. Становится возможным воспроизводить тонкие детали опыта, которые часто ускользают от студентов при выполнении реальных лабораторных работ, предоставляя, тем самым, уникальную, не достижимую в реальном физическом эксперименте.

Для реальных лабораторных работ по квантовой, атомной или ядерной физике требуются специально оборудованные лаборатории, оснащённые дорогостоящими и занимающими большие площади спектрографами, рентгеновскими аппаратами, электронными микроскопами, установками для проведения и регистрации атомных и ядерных процессов, а также опасные радиоактивные материалы. В виртуальном варианте постановки лабораторных работ можно изучать такие явления как опыт Резерфорда по рассеянию альфа-частиц, определение периода кристаллической решетки методом дифракции электронов, изучение газовых законов, ядерные реакторы на основе мультимедийного продукта [1].

Еще одно преимущество виртуальных лабораторных работ по сравнению с традиционными заключается в безопасности. В частности, использование виртуальных лабораторных работ в случаях, где идет работа с высоким напряжением или опасными химическими реактивами.

Однако, как отмечает ряд исследователей[2,3], виртуальные лабораторные работы обладают рядом существенных недостатков. Основным из них яв-

ляется отсутствие непосредственно контакта с объектом исследования, оборудованием, а значит отсутствие необходимости знаний и соблюдения требований техники безопасности работы с реальными приборами. Следовательно, будущие специалисты инженерных направлений подготовки не приобретают одну из основных компетенций, заложенных в рабочей программе дисциплины.

При выполнении только виртуальных лабораторных работ возникает привыкание к имитационному характеру исследовательской работы и ослабление представлений реального времени. Отсутствие рутинной трудоемкой исследовательской деятельности, которая включает в себя формирования навыков проведения реальных исследовательских экспериментов, способности оценки численного результата и адекватного восприятия полученных численных значений не позволяет в полной мере сформировать профессиональные компетенции будущего инженера.

Поэтому самым разумным решением в условиях дистанционного обучения является сочетание внедрения традиционных и виртуальных лабораторных работ в образовательном процессе с учетом их достоинств и недостатков.

Подход к проблеме создания виртуальных лабораторных работ по физике и их внедрения в учебный процесс должен быть дифференцированным и учитывать специфику направлений подготовки бакалавров. Логика представления материала в виртуальной лабораторной работе должна отличаться от реальной работы более детальным описанием процесса исследования, обилием подсказок и ссылок, а также наличием анимации.

Для успешного выполнения любой лабораторной работы студент должен тщательно проработать теоретический материал по теме исследования, поэтому в виртуальной лабораторной работе раздел с аналогичным названием должен быть представлен более подробно, чем в классическом практикуме.

Компьютерное моделирование различных физических экспериментов давно стало неотъемлемой реальностью виртуальной образовательной среды, в настоящее время трудно найти физический вопрос, который не был бы в той или иной мере освещен с использованием электронных ресурсов. Опыт использования авторами данной статьи элементов виртуального физического практикума в реальном учебном процессе для бакалавров инженерных направлений подготовки как дневной, так и заочной форм обучения, показал очень высокую эффективность виртуальных лабораторных работ при исследовании явлений в ядерной физике, дают основание для рекомендации внедрения виртуального практикума по курсу общей физики в условиях дистанционного обучения.

#### Список литературы:

1. Виртуальные лабораторные работы в вузовском курсе физики / Б.И. Бортник, Н.Ю. Стожко, Н.П. Судакова, И.А. Язовцев // Современные проблемы науки и образования. – 2017. – № 5. [Электронный ресурс] <http://science-education.ru/ru/article/view?id=26766>

2. Лаптенков Б.К. Тихомиров Ю.В. Физика : Виртуальный лабораторный практикум. В 2 х частях. – Чебоксары : Изд-во Чувашского ун-та, 2004. – 136 с.

3. Черемисина, Е.Н. Роль виртуальной компьютерной лаборатории на основе технологии облачных вычислений в современном компьютерном образовании / Е.Н. Черемисина, О.Е. Антипов, М.А. Белов // Дистанционное и виртуальное обучение. – 2012. – №1. – С. 50-64.

# СИНТЕЗ И ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ АНТРАЦЕН/ПММА

Пеньков С.А.,  
Алимбеков И.Р.,

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

За последние годы, такая область науки как нанотехнологии получила большое развитие. В начале, большое количество исследований было посвящено наноразмерным объектам и наночастицам из неорганических полупроводников. Последние, благодаря трехмерному конфинменту волновой функции электронов (дырок) в них, получили специальное название – «квантовые точки». В дальнейшем, внимание исследователей привлекли металлические наночастицы с высокой электрической проводимостью, обладающие, зависящим от размеров и формы наночастиц, плазмонным резонансом. На основе этих наночастиц были разработаны новые устройства [1-3]. Вместе с тем, количество исследований органических наночастиц, и в особенности наночастиц органических полупроводников на основе  $\pi$ -сопряженных полимеров, в последние годы растет [4-6]. Из-за большого разнообразия органических молекул, имеет место потенциальная возможность существенного увеличения работ, посвященных синтезу и исследованию различных свойств таких наночастиц. Кроме того, при сочетании неорганических полупроводников и металлов при синтезе органических наночастиц, появляется возможность получения гибридных наночастиц новыми свойствами [7, 8]. Еще одним направлением в синтезе является гибридизация наночастиц с ферромагнитными материалами [9]. Среди органических материалов для создания наночастиц, особый интерес представляют органические полупроводники с их электронными и оптическими свойствами, принципиально отличающимися от свойств неорганических полупроводников и металлов. В свою очередь наиболее исследуемыми материалами среди органических полупроводников являются  $\pi$ -сопряженные полимеры [10-13]. Вместе с тем, классическими представителями органических полупроводников являются молекулярные кристаллы, наночастицы которых все еще полностью не исследованы.

В данной работе получены гибридные наночастицы Антрацен/ПММА и исследованы их люминесцентные свойства. Наночастицы Антрацен/ПММА синтезировались методом пересадки, описанном ранее в работах [5, 6, 14]. В ходе синтеза были приготовлены по десять образцов коллоидных растворов и пленок наночастиц Антрацен/ПММА с различными отношениями концентраций. С целью получения различных отношений концентраций Антрацен/ПММА в наночастицах, были приготовлены иницирующие растворы ПММА 0,1% в ацетоне. Массовые доли компонентов в иницирующем растворе представлены в табл. 1:

Таблица 1 - Массовые доли компонентов в иницирующем растворе.

Образец №	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Антрацен, wt%	$10^{-5}$	$10^{-4}$	$10^{-3}$	0.004	0.008	0.023	0.07	0.2	0.6	0.9
ПММА, wt%	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

Размеры композитных наночастиц Антрацен/ПММА в коллоидных растворах исследовались методом динамического рассеяния света с помощью анализатора размеров частиц Photocor Compact-Z. Исследования образцов показало довольно узкое распределение по размерам. При малых отношениях количеств веществ Антрацен/ПММА в наночастицах максимум распределения приходится на отметку около 80 нм. При увеличении концентрации антрацена в исходном растворе, размер наночастиц, в среднем, остается около прежнего значения. При максимальных концентрациях антрацена в исходном растворе, появляется фракция микрочастиц. Вместе с тем, проведенные ранее исследования [14] показывают, что размеры наночастиц антрацена при схожей методике синтеза имеют фиксированное значение около 200 нм. Таким образом, мы предполагаем, что фракции микрометрового размера являются коагулированными агрегатами, состоящими из агломераций наночастиц. Типичный спектр распределения размеров наночастиц в коллоидных растворах в виде гистограммы показан на рисунке 1.

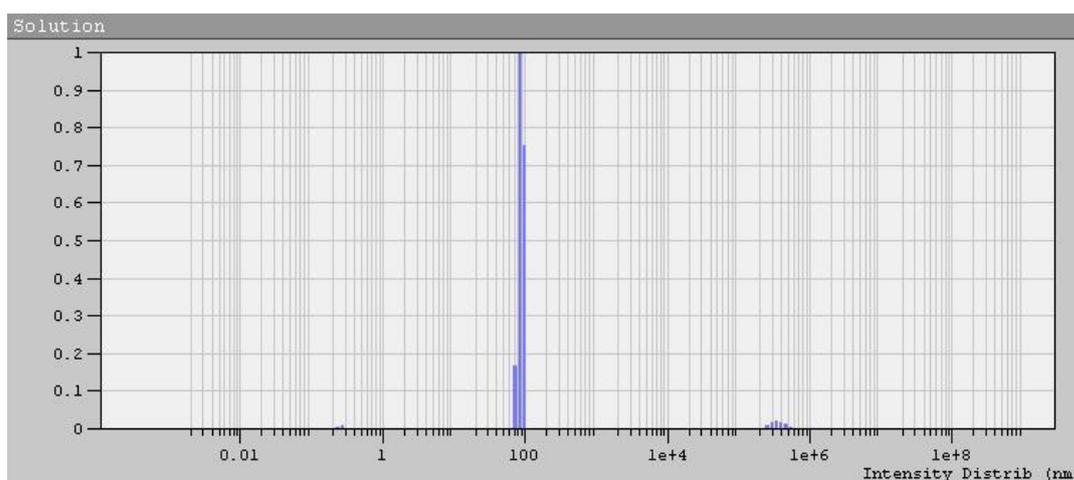
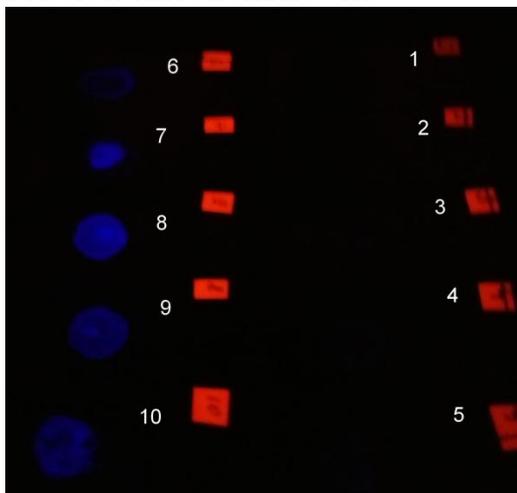


Рис. 1 Распределение размеров наночастиц Антрацен/ПММА.

В работе были исследованы спектры люминесценции образцов наночастиц Антрацен/ПММА в виде пленок на стеклянной подложке. Возбуждение образцов проводилось излучением ртутной лампы вкупе со светофильтром

УФС-2. В положениях полос люминесценции, характерных для антрацена, не было выявлено заметного изменения. Также как и для кристаллического антрацена, спектры люминесценции пленок Антрацен/ПММА оказались смещены в красную сторону спектра. Более интересные результаты показал амплитудный анализ спектров люминесценции. Данная зависимость имеет нелинейный характер по концентрации при облучении образцов широкополосным УФ излучением малой интенсивности.



**Рис. 2.** Образцы наночастиц Антрацен/ПММА на стеклянной подложке при облучении широко-полосным УФ излучением малой интенсивности.

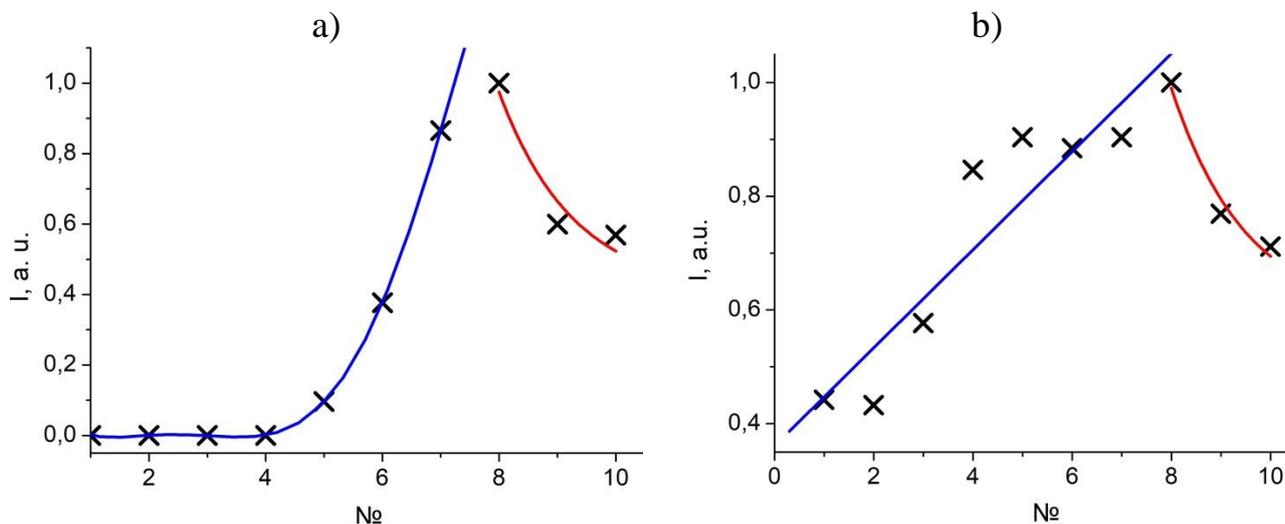
Известно, что в наиболее простом случае интенсивность люминесценции пропорциональна интенсивности возбуждающего света  $I_0$  и концентрации люминофора  $c$ :

$$I \sim I_0 \cdot c \quad (1)$$

Такая линейная зависимость будет сохраняться до критических (пороговых) значений концентраций, при которых начинает сказываться явление концентрационного тушения. Концентрационное тушение в наиболее простом виде описывается уравнением [15]:

$$I = I_0 \exp[-k(c - c_0)] \quad (2)$$

где  $I$  и  $I_0$  – интенсивности люминесценции при концентрациях  $c$  и  $c_0$  – соответственно.  $c_0$  – пороговая концентрация,  $k$  – коэффициент пропорциональности.



**Рис. 3.** Зависимости интенсивности фотолюминесценции наночастиц Антрацен/ПММА на стеклянной подложке от порядкового номера образцов а) при облучении широкополосным УФ излучением малой интенсивности, б) при облучении УФ СД с максимумом 370 нм. Синие кривые – аппроксимации допороговых зависимостей. Красные кривые – аппроксимации областей концентрационного тушения.

На рис. 3а и 3б приведены зависимости интенсивности фотолюминесценции наночастиц Антрацен/ПММА на стеклянной подложке от порядкового номера образцов рис. 2. Данные зависимости также являются концентрационными зависимостями. Из рис. 3а хорошо видно, что допороговая зависимость интенсивности фотолюминесценции (№1 - №7) имеет нелинейный характер. Данную зависимость удалось аппроксимировать степенной функцией вида  $f(c) \sim c^5$  (синяя кривая). Область зависимости №8 - №10 представляет собой область концентрационного тушения и хорошо описывается теоретической экспоненциальной зависимостью вида (2). При облучении ультрафиолетовым светодиодом с максимумом интенсивности 370 нм, допороговая зависимость (синяя кривая) описывается теоретически ожидаемой линейной зависимостью, а зависимость интенсивности в области №8 - №10 также хорошо аппроксимируется теоретической экспоненциальной зависимостью вида (2).

Таким образом, в данной работе были получены композитные наночастицы Антрацен/ПММА и определены их характерные размеры. Проведены исследования фотолюминесцентных свойств данных наночастиц. Обнаружен нелинейный характер допороговых концентрационных зависимостей интенсивности люминесценции при воздействии УФ излучением малой интенсивности. Определены пороговые концентрации самотушения фотолюминесценции.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.*

#### Список литературы

1. Екимов, А.И. Квантовый размерный эффект в трехмерных микрокристаллах полупроводников / Екимов А. И., Онущенко А. А. // Письма в ЖЭТФ. - 1981. - Т. 34. - С. 363-366.
2. Halperin, W.P. Quantum size effects in metal particles // Rev. Mod. Phys. 1986.V. 58, pp. 533-606.
3. Alivisatos, A.P. Semiconductor Clusters, Nanocrystals, and Quantum Dots // Science 1996, V. 271, 933. N 5251. pp. 933-937.
4. 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.

5. Penkov, S.A. Magnetic Field-Effect on Photoluminescence of Poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylenevinylene] (MEH-PPV) Nanoparticles in a Poly[vinyl butyral] Matrix // *J. Macromol. Sci. PartB: Phys.* 2020. V. 59, N 6. pp. 366-375.

6. 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.

7. Чмерева, Т.М. Безызлучательный перенос энергии экситонного возбуждения между монослоями j-агрегатов / Чмерева Т.М., Кучеренко М.Г. // *Известия высших учебных заведений. Физика.* 2018. Т. 61. № 2. С. 91-97.

8. Кучеренко, М.Г. Динамика энергообмена и релаксация возбуждений при сильном экситон-плазмонном взаимодействии в планарной наноструктуре из молекулярных j-агрегатов на металлической подложке / Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. // *Оптика и спектроскопия.* 2018. Т. 125. № 2. С. 165-175.

9. Неясов, П.П. Синтез и стабилизация магнитных наночастиц магнетита для нанореакторов на основе  $Al_2O_3$  и силохрома С-80 / Неясов П.П., Алимбеков И.Р. // *Материалы Всероссийской научно-методической конференции «Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры»*. Оренбургский государственный университет. 2018. С. 2585-2593.

10. Кареев, В.П. Фотофизика полупроводникового полимерного нанокompозита с фуллереном C[60] и эндодральным металлофуллереном  $HO@C[82]$  / И. Е. Кареев, В. П. Бубнов, Э. К. Алиджанов, С. Н. Пашкевич, Ю. Д. Лантух, С. Н. Летута, Д. А. Раздобреев // *Физика твердого тела*, 2019. - Т. 62, № 1. - С. 164-171.

11. Dyakonov, V. Evidence for triplet interchain polaron pairs and their transformations in polyphenylenevinylene / V. Dyakonov, G. Rösler, M. Schwoerer, and E. L. Frankevich // *Phys. Rev. B* 1997. V. 56. P. 3852.

12. Swanson, L.S. Optically detected magnetic resonance study of polaron and triplet-exciton dynamics in poly(3-hexylthiophene) and poly(3-dodecylthiophene) films and solutions / L.S. Swanson, J. Shinar, and K. Yoshino // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 65. P. 1140.

13. Partee, J. Delayed Fluorescence and Triplet-Triplet Annihilation in p-Conjugated Polymers / J. Partee, E.L. Frankevich, B. Uhlhorn, J. Shinar, Y. Ding, and T.J. Barton // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 82, N. 18, pp 3673- 3676.

14. Пеньков, С.А. Экситонные и молекулярные спектры флуоресценции антрацена в пористых адсорбентах, коллоидных и гомогенных растворах / Пеньков С.А., Алимбеков И.Р., Неясов П.П., Кучеренко М.Г. // В сборнике: IX Международная конференция по фотонике и информационной оптике. Сборник научных трудов. 2020. С. 447-448.

15. Вавилов, С.И. Микроструктура света: (Исследования и очерки) // *АН СССР*. – М.: Изд-во АН СССР, 1950.

## РАСЧЕТ СИГНАЛОВ Z-СКАНИРОВАНИЯ В РЕЖИМЕ ЗАКРЫТОЙ АПЕРТУРЫ

Русинов А.П., канд. физ.-мат.наук, доцент;  
Олейник И.О.

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

Исследование нелинейно-оптических свойств различных систем в настоящее время представляется важной теоретической и практической задачей. Нелинейная оптика в фундаментальном плане позволяет описать процессы в сильных электромагнитных полях, в прикладном смысле вносит большой вклад в развитие лазерной техники, фотоники, и спектроскопии.

Среди непосредственных способов измерения нелинейно-оптических свойств веществ большое развитие получил метод Z-сканирования. Данный способ основан на измерении зависимости интенсивности возбуждающего лазерного пучка, прошедшего через образец в дальней зоне, от положения образца относительно фокальной плоскости линзы [1,2]. Метод Z-сканирования позволяет в режиме открытой апертуры (когда пучок накачки перед фотоприемником не ограничивается) измерять нелинейное поглощение, а в режиме закрытой апертуры (когда пучок накачки перед фотоприемником ограничен диафрагмой) – нелинейную рефракцию. То есть фактически этим методом можно прямо измерять действительную и мнимую часть диэлектрической проницаемости различных сред.

При этом теоретическое описание формирования сигнала Z-сканирования в режиме открытой апертуры можно свести к случаю однородного по радиусу пучка накачки [2], что существенно упрощает анализ задачи. В случае же режима закрытой апертуры, необходим обязательный учет как радиального профиля интенсивности пучка накачки, так и радиальной зависимости наведенной фазовой неоднородности в образце, что существенно усложняет задачу. В данной работе предложены способы расчета сигналов нелинейной рефракции с использованием формализма лучевых матриц и с помощью прямого расчета интеграла Френеля-Кирхгофа.

Примем, что радиальный профиль пучка накачки является гауссовым, основными его параметрами являются его ширина

$$w(z) = w_0 \left( 1 + \frac{z^2}{z_R^2} \right)^{1/2},$$

и радиус кривизны волнового фронта

$$R(z) = z \left( 1 + \frac{z_R^2}{z^2} \right),$$

где  $z_R = \pi w_0^2 / \lambda$  – рэлеевская длина каустики гауссового пучка,  $\lambda$  – длина волны,  $w_0$  – ширина перетяжки (каустика) в точке  $z=0$ .

Радиус пучка задает ширину распределения поля в его поперечном сечении, для случая гауссовых пучков вид распределения следующий:

$$I(z, r) = I_0(z) \text{Exp} \left( -\frac{r^2}{w(z)^2} \right).$$

В зависимости от положения образца относительно перетяжки интенсивность излучения в его центре меняется, в перетяжке она больше, вдали от неё меньше. Можно определить зависимость его средней интенсивности от осевой координаты как

$$I_0(z) = I_0 \left( 1 + \frac{z^2}{z_R^2} \right)^{-1},$$

и  $I_0$  – максимальная интенсивность поля в центре пучка отвечающая координате  $z=0$ . При этом общая мощность пучка  $P_0$  (в отсутствие поглощения) от  $z$  не зависит, следовательно  $I_0 = P_0 / \pi w_0^2$ .

Расчет сигнала Z-сканирования в режиме закрытой апертуры определяется тем, что при самофокусировке или дефокусировке пучка на наведенной в образце нелинейности перемещается и его перетяжка, поэтому начальную координату  $z=0$  с ней связывать нельзя, а можно, например, связать с входной линзой.

После прохождения фокусирующей линзы пучок накачки имеет отрицательный радиус кривизны  $R_1$  (пучок сходящийся) и некоторый радиус  $w_1$ .

Этим характеристикам пучка отвечает комплексный параметр [3-4]

$$\frac{1}{q_1} = \frac{1}{R_1} - i \frac{\lambda}{\pi w_1^2}.$$

При распространении гауссова пучка вдоль оси  $z$ , его комплексный параметр меняется как

$$q(z) = q_1 + z,$$

где  $z$  отсчитывается не от истинного положения перетяжки пучка накачки (центра диапазона сканирования), а от линзы (начальной точки этого диапазона).

Зная в данных координатах положение образца  $z$ , найдем в его области комплексный параметр  $q_2 = q(z)$ , и, используя обратно преобразование, найдем радиус кривизны пучка  $R_2^{-1} = \text{Re } q_2^{-1}$  и его ширину  $w_2^2 = \text{Im } -\pi q_2^{-1} / \lambda^{-1}$ . Тогда распределение интенсивности в плоскости образца:

$$I_2(r) = \frac{P_0}{\pi w_2^2} \text{Exp} \left( -\frac{r^2}{w_2^2} \right).$$

За счет зависимости показателя преломления среды от интенсивности пучка  $n(I) = n_0 + \Delta n(I)$  в образце будет инициироваться неоднородная пространственная структура, которую, в первом приближении, можно аппроксими-

мировать наведенной линзой с фокусным расстоянием  $F$ . В первом приближении ограничимся линейной зависимостью добавки к показателю преломления от интенсивности  $\Delta n(I) = \kappa I$ .

Положим, что в центре пучка накачки показатель преломления увеличивается, это ведет к искривлению волнового фронта и дальнейшей фокусировке пучка.

Тогда для радиуса кривизны пучка прошедшего линзу можно записать

$$F_2^2 - w_2^2 = (F_2 - \Delta l_2)^2,$$

$$\text{где } \Delta l_2 = l \Delta n(I_2(0)) = l \kappa \frac{P_0}{\pi w_2^2},$$

– добавочный оптический путь на оси пучка, а  $l$  – толщина образца.

Считая  $\Delta l_2$  достаточно малым,

можно записать

$$F_2 = \frac{w_2^2}{2\Delta l_2} = \frac{\pi w_2^4}{2l\kappa P_0} = \alpha w_2^4.$$

Учитывая, что линза преобразует лишь волновой фронт, оставляя неизменным поперечное распределение амплитуды, т.е. преобразует сферическую волну с радиусом фронта  $R_2$  в сферическую волну с радиусом фронта  $R_3$ , то

$$\frac{1}{R_3} = \frac{1}{R_2} - \frac{1}{F_2},$$

Следовательно комплексные параметры падающего и прошедшего пучков связаны соотношением

$$\frac{1}{q_3} = \frac{1}{q_2} - \frac{1}{F_2} = \frac{1}{q_2} - \frac{1}{\alpha w_2^4}.$$

Комплексный параметр пучка на фотоприемнике, отстоящем от образца на расстоянии  $(L-z)$  рассчитывается аналогичным образом  $q_4 = q_3 + (L-z)$ . где  $L$  – расстояние между линзой и фотоприёмником. Из данного параметра определяется радиус пучка накачки на фотоприемнике  $w_4^2 = \text{Im } \pi q_4^{-1} / \lambda^{-1}$ . Тогда, в случае малой апертуры пучка, наблюдаемый сигнал Z-сканирования можно считать пропорциональным интенсивности пучка в его центре

$$P_{Ph}(0|z) = \frac{P_0}{\pi w_4^2} = \frac{P_0}{\lambda} (q_4^{-1}(z)).$$

Далее представлены результаты моделирования сигналов Z-сканирования в режиме закрытой апертуры с положительным и отрицательным коэффициентом нелинейности показателя преломления. Из рисунков 2-3 видно, что при смене знака коэффициента нелинейности сигнал Z-сканирования инвертируется

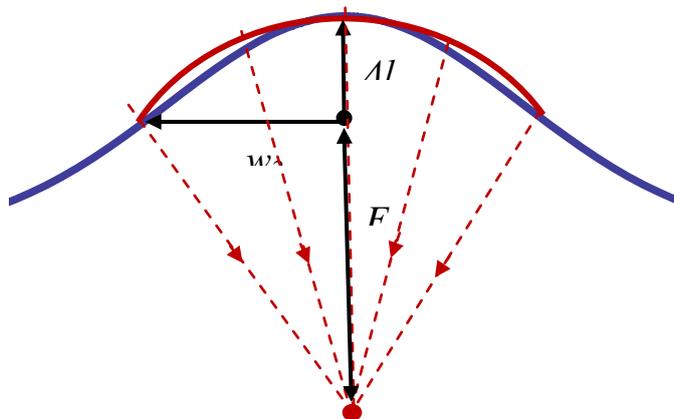


Рисунок – 1 Формирование тепловой линзы

и при больших значениях коэффициента увеличивается амплитуда сигнала. Важным результатом расчетов является несимметричность сигнала Z-сканирования относительно начального значения интенсивности пучка, а также смещение нулевой точки относительно перетяжки пучка накачки.

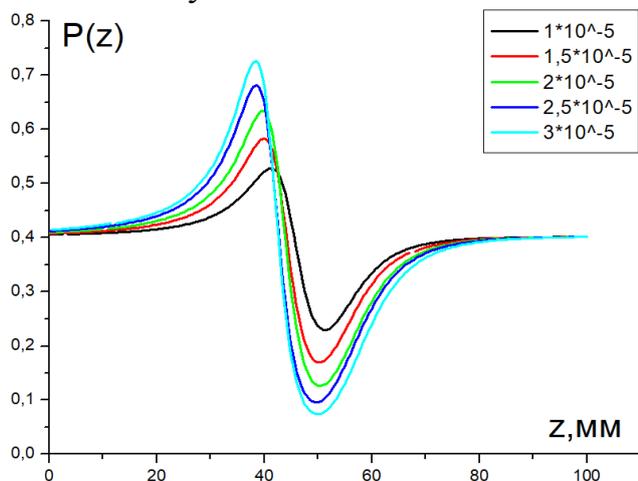


Рисунок 2 – Сигналы Z-сканирования в режиме закрытой апертуры с положительным коэффициентом нелинейного преломления

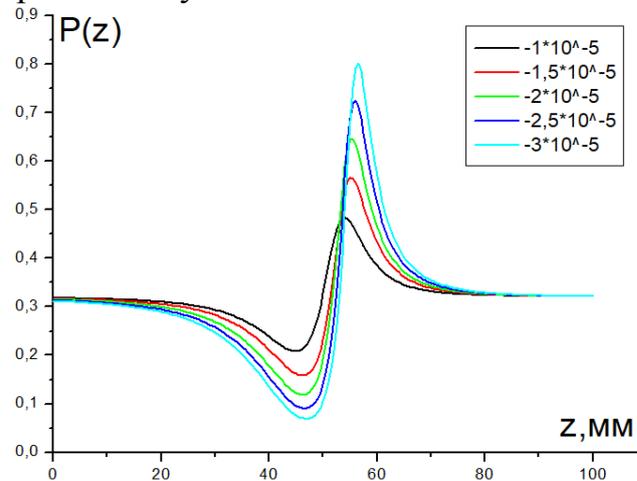


Рисунок 3 – Сигналы Z-сканирования в режиме закрытой апертуры с отрицательным коэффициентом нелинейного преломления

Далее, рисунок 4 показывает нелинейный характер наблюдаемого эффекта, с увеличением мощности пучка накачки увеличивается и амплитуда изменения сигнала Z-сканирования (разница между максимальным и минимальным его значением).

Рисунок 5 показывает, что при подборе модельных параметров теоретическая кривая достаточно хорошо согласуется с экспериментальной, это говорит об адекватности предложенной математической модели.

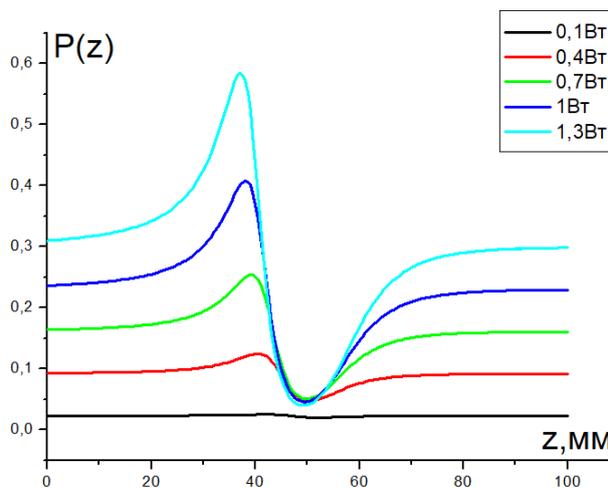


Рисунок – 4 Сигналы Z-сканирования в режиме закрытой апертуры при разной мощности пучка накачки

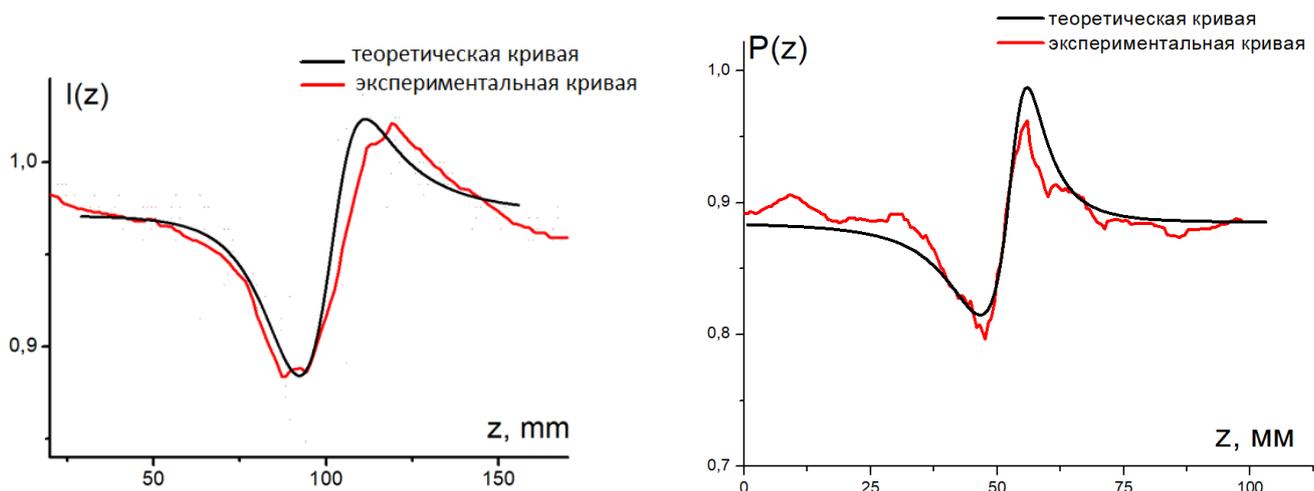


Рисунок 5 – Сравнение расчетных зависимостей при некоторых параметрах модели с экспериментальными результатами

При этом стоит отметить, что формализм лучевых матриц хорошо согласуется с экспериментом только в случае малых концентраций красителя (порядка и менее  $10^{-4}$  моль/л) и невысоких интенсивностей накачки (порядка  $10-100$  кВт/см<sup>2</sup>), когда выполняется требование линейности добавки к показателю преломления от интенсивности  $\Delta n(I) = \kappa I$  и радиальный профиль наведенной оптической неоднородности в среде близок к сферическому. В случае концентрированных растворов или интенсивных пучков, данные условия не выполняются, профиль наведенной линзы искажается и подход на основе метода лучевых матриц становится неприменимым. Так в работе [5] показано, что при больших интенсивностях накачки профиль наведенной структуры существенно отличается от гауссова профиля и, при повышении интенсивности, приобретает форму, все более близкую к прямоугольной. Альтернативным методом, в последнем случае, является прямой численный расчет дифракции пучка накачки на наведенной им нелинейной пространственной структуре.

Считая скорость Z-сканирования достаточно медленной, по сравнению с временами релаксационных процессов в образце, для описания нелинейной самофокусировки пучка можно использовать формализм волновой оптики Френеля-Кирхгофа[6]

$$U(r, \varphi) = \frac{k}{2\pi i} \cdot \int d\varphi' \int U'(r', \varphi') \cdot \frac{\exp(-ikR)}{R} r' dr',$$

где  $U(r, \varphi)$  – распределение напряженности поля пучка в плоскости наблюдения,  $U'(r', \varphi')$  – распределение напряженности поля пучка накачки в плоскости образца,  $k$  – волновое число,  $R$  – оптический путь участка волнового фронта пучка накачки. В случае наблюдения дифракции в дальней зоне  $R \approx l \gg r, r'$ , оптический путь можно представить в виде:

$$R \approx l + \frac{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi')}{2l},$$

где  $l$  – расстояние между плоскостью источника и плоскостью наблюдения. Тогда выражение для дифракции слаборасходящегося пучка в дальней зоне примет вид:

$$U(r, \varphi) = \frac{k \exp(-ikl)}{2\pi i l} \cdot \int d\varphi' \int U'(r', \varphi') \cdot \exp\left[-\frac{ik}{2l} (r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\varphi - \varphi'))\right] r' dr'$$

В случае осесимметричной задачи, когда профиль записанной тепловой структуры и профиль зондирующего луча не зависят от  $\varphi$  и  $\varphi'$ , можно избавиться от угловой зависимости в регистрируемой дифракционной картине, приняв  $\varphi=0$  и вычисляя внутренний интеграл по углу, получаем:

$$\int_0^{2\pi} \exp\left[\frac{ikrr' \cos(\varphi')}{l}\right] d\varphi' = 2\pi J_0\left[\frac{krr'}{l}\right],$$

где  $J_0$  – функция Бесселя действительного аргумента.

При прохождении пучка через образец, каждый его участок приобретает дополнительный набег фазы  $\Phi(r, z)$ , в общем случае являющийся функцией интенсивности пучка накачки в плоскости образца

$$U(r, z) = -\frac{ik \exp(-ikl)}{l} \cdot \int U'(r') \cdot \exp[-ik\Phi(r', z)] \exp\left[-\frac{ik}{2l} (r^2 + r'^2)\right] J_0\left[\frac{krr'}{l}\right] r' dr'.$$

Добавка дополнительного нелинейного набег фазы, приобретаемого в образце, приводит к тому, что дифракционная картина пучка накачки в плоскости фотодетектора становится зависимой от положения образца  $z$  относительно перетяжки пучка накачки.

Тогда наблюдаемый сигнал при малой апертуре фотодетектора пропорционален квадрату модуля амплитуды поля

$$P_{ph}(0|z) \sim U(0, z)U^*(0, z).$$

Несмотря на то, что последнее выражение предполагает только численный анализ, оно является более строгим физически, так как не ограничено условием радиальной сферической симметрии профиля наведенной нелинейной структуры в образце (соответствующей наведенной линзе с некоторым фокусным расстоянием) и позволяет рассчитывать сигнал  $Z$ -сканирования в режиме закрытой апертуры для систем с высокими показателями нелинейной рефракции, при больших интенсивностях пучка накачки и больших концентрациях фотоактивных молекул.

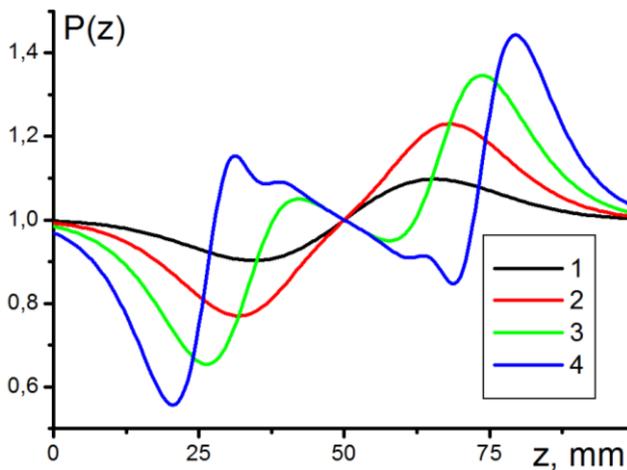


Рисунок 6 – Сигналы Z-сканирования в режиме закрытой апертуры полученный вычислением дифракционной картины при различных коэффициентах нелинейного преломления: 1– $10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 2– $2 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 3– $5 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 4– $10^{-3} \text{cm}^2/\text{W}$

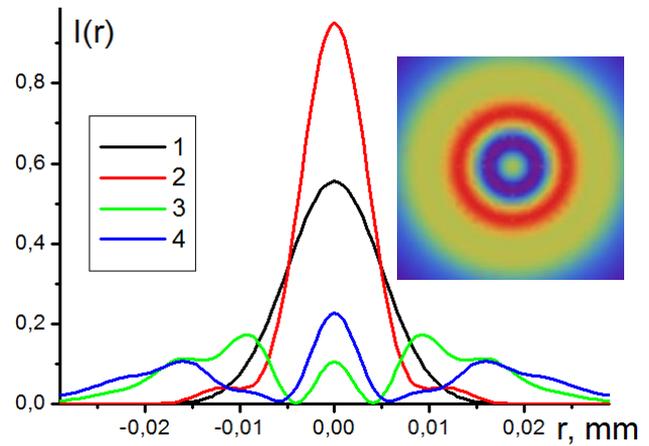


Рисунок 3 – Профиль пучка в области фотодетектора полученный вычислением дифракционной картины при различных коэффициентах нелинейного преломления: 1– $10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 2– $2 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 3– $5 \cdot 10^{-4} \text{cm}^2/\text{W}$ ; 4– $10^{-3} \text{cm}^2/\text{W}$  и картина дифракции для случая 4.

Как видно из рисунка 6 при малой нелинейности в образце сигналы полученные вычислением дифракционной картины аналогичны расчетам по методу лучевых матриц, но при увеличении показателя нелинейной рефракции поведение сигнала Z-сканирования в режиме закрытой апертуры усложняется и становится немонотонным. При этом профиль пучка накачки в плоскости приемника (рисунок 7) значительно отклоняется от начального гауссового профиля. Данные эффекты качественно согласуются с экспериментальными сигналами Z-сканирования полученными от концентрированных растворов метиленового голубого ( $C=10^{-3}$  моль/л) в режиме закрытой апертуры.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках научного проекта № FSGU-2020-0003.*

#### Список литературы

1. Stryland E.W., Sheik-Bahae M. Z-scan measurements of optical nonlinearities // *Charact. Tech. Tabul. Org. Nonlinear Mater.* 1998. № 3. P. 655-692.
2. Sheik-Bahae M., Said A.A., Wei T.-H., Hagan D.J., Stryland E.W. Sensitive measurement of optical nonlinearities using a single beam // *IEEE J. Quantum Electron.* 1990. V. 26, № 4. P. 760-769.
3. Звелто О. Принципы лазеров. М.: Мир, 1990.
4. Ананьев Ю.А. Оптические резонаторы и лазерные пучки, М.: Наука ФМ, 1990.

5. Кучеренко М.Г., Русинов А.П. Оптическая запись нестационарных пространственных структур в системе насыщаемых трехуровневых центров. // Квантовая электроника, 2004. – Т. 34.– №8. – С. 779-784.
6. Матвеев А.Н. Оптика. – М.: Высшая школа, 1985. – 351 с.

## ФЕРРОМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС МАГГЕМИТА $\text{Fe}_2\text{O}_3$

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

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

Как известно, оксиды железа широко используются при выплавке чугуна в доменном процессе, катализатор в производстве аммиака, компонент керамики, цветных цементов и минеральных красок, при термитной сварке стальных конструкций, как носитель аналоговой и цифровой информации (напр. звука и изображения) на магнитных лентах (ферримагнитный  $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), как полирующее средство (красный крокус) для стали и стекла. В пищевой промышленности используется в качестве пищевого красителя (E172). В ракетомоделировании применяется для получения катализированного карамельного топлива, которое имеет скорость горения на 80 % выше, чем обычное топливо. Является основным компонентом железного сурика (колькотара). В нефтехимической промышленности используется в качестве основного компонента катализатора дегидрирования при синтезе диеновых мономеров.

Содержание оксида железа в последних может варьироваться от 50 до 80 °С масс, поэтому эксплуатационные свойства таких каталитических систем в значительной степени определяются фазовым составом, текстурными характеристиками, морфологией исходного оксида железа. Заключительной стадией получения железокалиевых катализаторов является термическая обработка при 600-900 °С в атмосфере воздуха [1]. На этом этапе происходит формирование физикомеханических характеристик каталитических систем и активной фазы (ферриты калия), формирующейся в процессе твердофазного взаимодействия между оксидом железа и соединениями калия. Поэтому для производства высокоэффективных контактов необходимо найти оптимальный режим прокаливания, который будет определяться термическим поведением исходных компонентов.

Оксид железа  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  может существовать в нескольких формах, отличающихся кристаллической структурой, наличием дефектов и, как следствие, магнитными свойствами [2]. Например, гематит  $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$  – неколлинеарный антиферромагнетик, а маггемит – нормальный ферромагнетик. Различные внешние факторы способны индуцировать обратимые и необратимые переходы между известными формами оксида железа. Целью данной работы является изучение магниторезонансных свойств порошкообразного  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

В качестве образца оксида железа использовали красный пигмент с содержанием основного вещества более 98,8 % масс.

Химическая формула:  $\text{Fe}_2\text{O}_3$

Таблица – Паспортные данные Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

п/п	Содержание	Требования	Результаты анализа
1	Массовая доля основного вещества в высушенном при 120°С препарате, %, не менее	98,7	98,8
2	Нерастворимые в соляной кислоте вещества	0,02	0,02
3	Азот (N) общий из нитратов и нитритов	0,005	0,005
4	Кремний (Si)	0,05	0,05
5	Сульфаты (SO <sub>4</sub> )	0,12	0,12
6	Кальций и магний (Ca+Mg)	0,07	0,07
7	Медь (Cu), %, не более	0,005	0,005
8	Калий и натрий (K+Na)	0,02	0,02
9	Массовая доля растворимых в воде веществ, %, не более	0,1	0,1
10	Потери массы при высушивании, %, не более	0,3	0,22

При нагревании до температуры выше 600°С красно-бурый цвет исходного порошка превращался в черный. Кратковременный нагрев вызывал обратимые изменения цвета: спустя несколько минут после охлаждения порошок восстанавливал исходный цвет. При длительном нагреве восстановление цвета происходило очень медленно или не наблюдалось. Такое восстановление цвета свидетельствует о восстановлении исходной дефектной структуры маггемита.

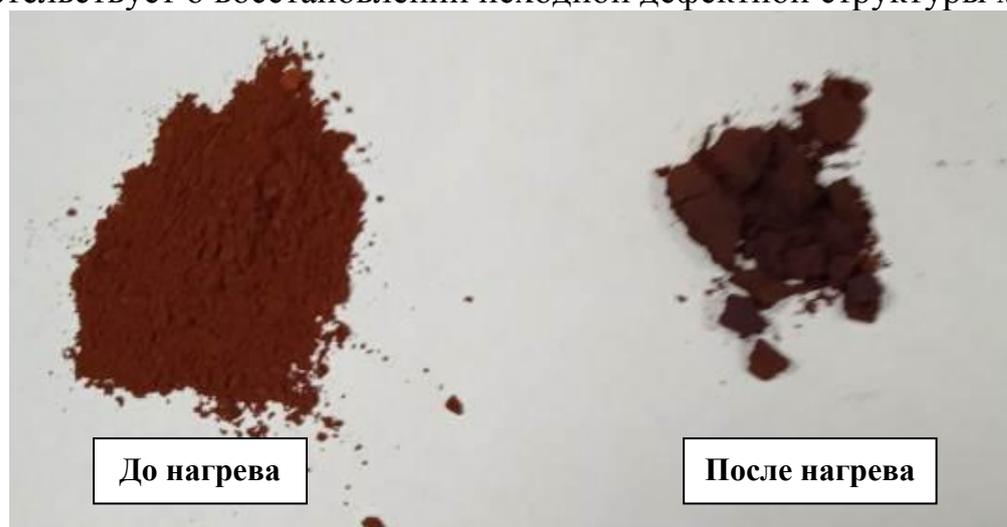


Рисунок 1 – Образцы окиси железа до нагрева выше 600° С и после охлаждения.

Магнитнорезонансные спектры образцов Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> получены с помощью стандартного спектрометра электронного парамагнитного резонанса ADAN-2489

ICMS8400 производства Республики Беларусь. Полученный спектр представлял собой интенсивную несколько асимметричную одиночную широкую линию, ширина линии 170 мТ. Для записи такой широкой линии пришлось использовать очень широкую развертку магнитного поля спектрометра, Интеграл этой кривой был близок к форме лоренцевской линии. Как известно, частота ферромагнитного резонанса сильно зависит от геометрической формы образцов, поэтому наблюдаемая асимметрия линии поглощения обусловлена различиями формы микрочастиц исходного образца.

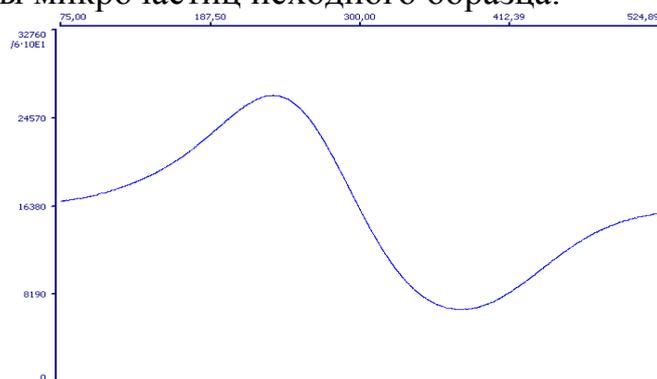


Рисунок 2 – Спектр магнитного резонанса исходного образца  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .

Полученные данные доказывают, что исходные образцы оксида железа представляют собой ферромагнитные частицы магнитного оксида железа = маггемита, способного при нагреве обратимо превращаться в гематит.

Наблюдаемая разница спектров магнитного резонанса гематита и маггемита обусловлена различием их магнитных состояний: исходный гематит являлся неколлинеарным антиферромагнетиком, а маггемит — ярко выраженным ферромагнетиком [3].

Показано, что спектрометр ЭПР ADANICMS8400 позволяет регистрировать спектры ферромагнитного резонанса с высокой чувствительностью [4,5].

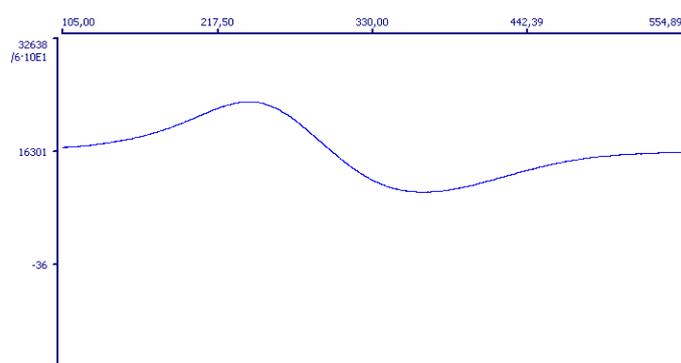


Рисунок 3– Спектр магнитного резонанса образца  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  после нагрева.

#### Список литературы

1. Ламберов, А.А. Трансформация структуры оксида железа (III) при термическом нагреве на воздухе // Дементьева Е.В., Кузьмина О.В., Хазеев Б.Р. Вестник Казанского технологического университета. 2013. Т. 16. № 1. С. 37-41.

2. Котельников Г.Р. [и др.] Катализаторы дегидрирования низших олефиновых, парафиновых и алкилароматических углеводородов // ЦНИИТ-Энефтехим, Москва, 1978. 81 с.
3. Каныгина, О. Н. Фазовые превращения в оксидах железа под действием микроволнового излучения / О. Н. Каныгина, В. Л. Бердинский, М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, В. Н. Макаров, М. В. Овечкин // Журнал технической физики, 2020. - Т. 90, № 8. - С. 1311-1317. . - 7 с.
4. ЭПР Спектрометр CMS 8400: [электронный ресурс]. – Режим доступа. <http://lab.adani.by/products/produktovaya-liniya/epr-spektrometr-cms-8400/>. 06.06.2018.
5. Блюменфельд, Л.А. Электронный парамагнитный резонанс / Л.А. Блюменфельд, А.Н. Тихонов. - Физика. 1997. - с. 185-187.

# ЭКВАТОРИАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ КЕРРА В ПЛАНАРНОЙ МАГНИТОПЛАЗМОННОЙ НАНОСТРУКТУРЕ

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент,  
Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,  
Лукашов Д.С.

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

Благодаря магнитооптическим эффектам в магнитоплазмонных наноструктурах появляется возможность управления характеристиками светового излучения с помощью магнитного поля, поскольку намагниченность структуры влияет на характеристики отраженного и прошедшего света. Это в свою очередь открывает широкие перспективы использования магнитоплазмонных наноструктур в современных магнитооптических устройствах. Исследования, выполненные в течение последних двадцати лет, показали, что присутствие плазмонных составляющих в композитных наноструктурах обеспечивает усиление магнитооптических эффектов [1]. Так, в работе [2] теоретически исследован полярный эффект Керра в магнитоплазмонных бислоях, состоящих из Co и Au. Показано, что усиление эффекта Керра носит резонансный характер и наблюдается при угле падения зондирующего света близком к углу, при котором в системе возникает поверхностный плазмонный резонанс. Наряду с линейными магнитооптическими эффектами Керра в последнее время активно изучаются эффекты Керра на второй гармонике, которые превышают по величине соответствующие линейные эффекты и, поэтому, служат перспективным инструментом для исследований магнитных поверхностей и границ раздела [3]. В работе [4] исследовалась генерация второй гармоники трехслойной магнитоплазмонной структурой Au/Co/Ag и было обнаружено значительное усиление магнитного контраста.

В данной работе теоретически изучен нелинейный магнитооптический экваториальный эффект Керра в планарной структуре «ферромагнетик – благородный металл», изображенной на рисунке 1. На границу оптически прозрачного диэлектрика с диэлектрической постоянной  $\epsilon_1$  и благородного металла падает плоская электромагнитная волна под углом  $\varphi_0$  к оси  $z$  декартовой системы

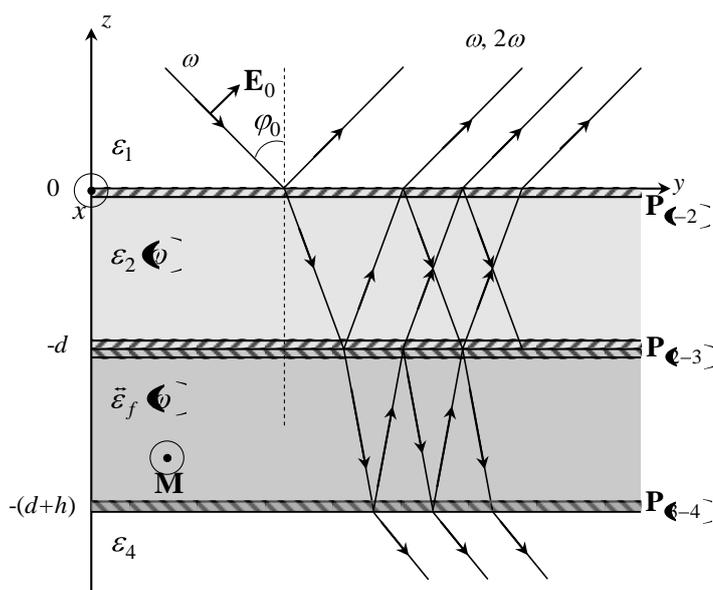


Рисунок 1 – Планарная магнитоплазмонная наноструктура

координат. В обобщенной модели Друде диэлектрическая проницаемость благородного металла описывается формулой  $\epsilon_2(\omega) = \epsilon_\infty - \omega_{plm}^2 / (\omega^2 + i\gamma_m\omega)$ , где  $\epsilon_\infty$  - высокочастотная диэлектрическая проницаемость,  $\omega_{plm}$  и  $\gamma_m$  - плазменная частота и коэффициент диссипации, определяющий тепловые потери в металле. За магнитооптические свойства ферромагнетиков отвечает тензор диэлектрической проницаемости, вид которого зависит от намагниченности ферромагнетика. В экваториальной геометрии вектор намагниченности  $\mathbf{M}$  перпендикулярен плоскости падения света, т. е. направлен вдоль оси  $x$ , и тензор диэлектрической проницаемости имеет вид [3]

$$\vec{\epsilon}_f = \epsilon_3 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -iQ \\ 0 & iQ & 1 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где  $\epsilon_3(\omega) = 1 - \omega_{plf}^2 / (\omega^2 + i\gamma_f\omega)$  - диэлектрическая функция ненамагниченного ферромагнетика, являющегося оптически изотропным;  $\omega_{plf}$  и  $\gamma_f$  - плазменная частота и коэффициент диссипации;  $Q$  - магнитооптический параметр Фохта, величина которого определяется из экспериментальных данных по магнитооптическим эффектам [5].

В рассматриваемой структуре под действием электромагнитного поля волны основной частоты на границах раздела сред возникает нелинейная поверхностная поляризация, т. е. формируются три источника электромагнитного поля удвоенной частоты. Граница благородного металла с диэлектриком является немагнитным источником второй гармоники, а две другие границы представляют собой сумму магнитного и немагнитного источников. Вектор поверхностной поляризации границы металла может быть представлен в виде [3]

$$\mathbf{P} = \chi_1 \mathbf{E} \mathbf{E} \mathbf{n} + \chi_2 E^2 \mathbf{n} + \chi_3 \mathbf{E} \mathbf{E} \mathbf{m} + \chi_4 E^2 \mathbf{m} + \chi_5 \mathbf{E} \mathbf{m} \mathbf{E} \mathbf{n} + \chi_6 \mathbf{E} \mathbf{n} \mathbf{E} \mathbf{m}$$

где  $\chi_1$  и  $\chi_2$  - нелинейные оптические параметры,  $\chi_3 - \chi_6$  нелинейные магнитооптические параметры  $\mathbf{n}$  - нормаль к поверхности,  $\mathbf{m}$  - единичный вектор, задающий направление намагниченности,  $\mathbf{E}$  - вектор напряженности поля вблизи поверхности металла. На верхней поверхности металлического слоя вектор нормали  $\mathbf{n}$  совпадает по направлению с ортом  $\mathbf{e}_z$  оси  $z$ , на нижней поверхности направлен противоположно.

При падении на поверхность планарной структуры плоской волны, поляризованной в плоскости падения (p-волны) получают следующие выражения для компонент вектора поверхностной поляризации:

$$\text{на поверхностях благородного металла } z=0 \text{ и } z=-d$$

$$P_{y \mathbf{e}_{-2} \mathbf{e}_{-3} \mathbf{m}} = \pm \chi_1 E_{y2} E_{z2} \Big|_{z=0}^{z=-d}, \quad P_z \mathbf{e}_{-2} \mathbf{e}_{-3} \mathbf{m} = \pm (\chi_1 + \chi_2) E_{z2}^2 \Big|_{z=0}^{z=-d} \pm \chi_2 E_{y2}^2 \Big|_{z=0}^{z=-d},$$

$$\text{на поверхностях ферромагнетика } z=-d \text{ и } z=-h$$

$$P_{y \mathbf{e}_{-3} \mathbf{e}_{-4}} = \pm \chi_1 E_{y3} E_{z3} \Big|_{z=-d}^{z=-h} \mp \chi_3 + \chi_4 E_{y3}^2 \Big|_{z=-d}^{z=-h} \mp \chi_4 - \chi_5 E_{z3}^2 \Big|_{z=-d}^{z=-h},$$

$$P_z \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) = \pm \left( \chi_1 \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) + \chi_2 \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) \right) E_{z3}^2 \Big|_{z=-d}^{z=-d+h} \pm \chi_2 \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) E_{y3}^2 \Big|_{z=-d}^{z=-d+h} \mp \left( \chi_3 + \chi_5 \right) E_{y3} E_{z3} \Big|_{z=-d}^{z=-d+h}.$$

Поляризация границы благородного металла и ферромагнетика определяется суммой

$$\begin{aligned} P_y \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) &= P_y \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right)_{\vec{m}} + P_y \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right)_{\vec{f}}, \\ P_z \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) &= P_z \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right)_{\vec{m}} + P_z \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right)_{\vec{f}}. \end{aligned}$$

Возникающие на границах раздела поверхностные поляризации  $P \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) e^{2i(\epsilon_3 y - \omega t)}$ ,  $P \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) e^{2i(\epsilon_4 y - \omega t)}$  и  $P \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) e^{2i(\epsilon_4 y - \omega t)}$  являются источниками плоских волн с частотой  $2\omega$ . Напряженности электрического и магнитного полей в этих волнах являются решениями уравнений Максвелла, в которых диэлектрические проницаемости благородного металла и ферромагнетика берутся на удвоенной частоте. Т. к. векторы поверхностной поляризации лежат в плоскости падения, порождаемая ими волна будет также поляризована в плоскости падения.

Тангенциальные компоненты векторов напряженностей электрического и магнитного полей в каждой из четырех сред записываются в виде:

в диэлектрике  $z > 0$

$$E_{y1} = A e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz1} z - \omega_s t)}, \quad (2.1)$$

$$H_{x1} = -\frac{\omega_s \epsilon_1}{c k_{sz1}} A e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz1} z - \omega_s t)},$$

в благородном металле  $-d \leq z \leq 0$

$$E_{y2} = B e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz2} z - \omega_s t)} + C e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz2} z - \omega_s t)}, \quad (2.2)$$

$$H_{x2} = \frac{\omega_s \epsilon_2}{c k_{sz2}} \left( B e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz2} z - \omega_s t)} - C e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz2} z - \omega_s t)} \right);$$

в ферромагнетике  $-d+h \leq z \leq -d$

$$E_{y3} = D e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz3} z - \omega_s t)} + F e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz3} z - \omega_s t)},$$

$$\begin{aligned} H_{x3} &= \frac{\omega_s}{c k_{sz3}} \left( \epsilon_3 \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) \left[ \epsilon_{yz} \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) \frac{k_{sy}}{k_{sz3}} \right] D e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz3} z - \omega_s t)} + \right. \\ &+ \left. \frac{\omega_s}{c k_{sz3}} \left( -\epsilon_3 \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) \left[ \epsilon_{yz} \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) \frac{k_{sy}}{k_{sz3}} \right] F e^{i(\epsilon_3 y + k_{sz3} z - \omega_s t)} \right), \end{aligned} \quad (2.3)$$

в диэлектрике  $z \leq -d+h$

$$E_{y4} = G e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz4} z - \omega_s t)}, \quad (2.4)$$

$$H_{x4} = \frac{\omega_s \epsilon_4}{c k_{sz4}} G e^{i(\epsilon_3 y - k_{sz4} z - \omega_s t)};$$

где введены следующие обозначения:  $\omega_s = 2\omega$ ,  $k_{sy} = \left( \begin{matrix} \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \end{matrix} \right) / c \sqrt{\epsilon_1} \sin \varphi_0$ ,

$$k_{sz1} = \sqrt{\epsilon_1 - k_{sy}^2}, \quad k_{sz2} = \sqrt{\epsilon_2 - k_{sy}^2}, \quad k_{sz3} = \sqrt{\epsilon_3 - k_{sy}^2},$$

$$k_{sz4} = \sqrt{\epsilon_4 - k_{sy}^2}.$$

Амплитуды напряженностей полей можно определить из граничных условий, приведенных в работах [3, 6] для границы раздела изотропной и анизотропной сред. Для рассматриваемой системы граничные условия примут вид

$$H_{x1}|_{z=0} - H_{x2}|_{z=0} = -4\pi \frac{i\omega_s}{c} P_y \langle -2 \rangle,$$

$$E_{y1}|_{z=0} - E_{y2}|_{z=0} = -\frac{4\pi}{\epsilon_2} \frac{P_z \langle -2 \rangle}{\partial y},$$

$$H_{x2}|_{z=-d} - H_{x3}|_{z=-d} = -4\pi \frac{i\omega_s}{c} P_y \langle -3 \rangle + 4\pi \frac{i\omega_s}{c} \frac{\epsilon_{yz}^{eff} \langle -3 \rangle}{\epsilon_{zz}^{eff} \langle -3 \rangle} P_z \langle -3 \rangle, \quad (3)$$

$$E_{y2}|_{z=-d} - E_{y3}|_{z=-d} = -\frac{4\pi}{\epsilon_{zz}^{eff} \langle -3 \rangle} \frac{\partial P_z \langle -3 \rangle}{\partial y},$$

$$H_{x3}|_{z=-d+h} - H_{x4}|_{z=-d+h} = -4\pi \frac{i\omega_s}{c} P_y \langle -4 \rangle + 4\pi \frac{i\omega_s}{c} \frac{\epsilon_{yz} \langle -4 \rangle}{\epsilon_3 \langle -4 \rangle} P_z \langle -4 \rangle,$$

$$E_{y3}|_{z=-d+h} - E_{y4}|_{z=-d+h} = -\frac{4\pi}{\epsilon_3 \langle -4 \rangle} \frac{\partial P_z \langle -4 \rangle}{\partial y}.$$

При записи граничных условий (3) при  $z = -d$  предполагается, что нелинейная поляризация  $\mathbf{P}_{\langle -3 \rangle}$  возникает в тонком слое эффективной среды, характеризуемой тензором диэлектрической проницаемости  $\tilde{\epsilon}^{eff} \langle - \rangle$ . Для нахождения элементов этого тензора можно воспользоваться методом определения эффективной диэлектрической проницаемости слоистой гетеросистемы [7]. Т. к. диэлектрическая проницаемость ферромагнетика есть тензор, то и диэлектрическая проницаемость эффективной среды будет тензором со структурой, подобной (1).

На границе раздела касательные составляющие вектора напряженности электрического поля непрерывны  $E_{x2} = E_{x3} = E_x$ ,  $E_{y2} = E_{y3} = E_y$  и непрерывны нормальные компоненты вектора электрической индукции  $D_{z2} = D_{z3} = D_z$ . Из материальных уравнений следуют выражения для касательных составляющих вектора электрической индукции и нормальных составляющих вектора напряженности электрического поля

$$D_{x2} = \epsilon_2 \langle - \rangle E_x, \quad D_{x3} = \epsilon_3 \langle - \rangle E_x,$$

$$D_{y2} = \epsilon_2 \langle - \rangle E_y, \quad D_{y3} = \epsilon_3 \langle - \rangle E_y + \epsilon_{yz} \langle - \rangle E_{z3},$$

$$E_{z2} = D_z / \epsilon_2 \langle - \rangle, \quad E_{z3} = D_z / \epsilon_3 \langle - \rangle - \epsilon_{zy} \langle - \rangle E_y / \epsilon_3 \langle - \rangle,$$

где  $\epsilon_{yz} \langle - \rangle = -\epsilon_{zy} \langle - \rangle = -i\epsilon_3 \langle - \rangle Q$ .

Средняя величина  $z$ -составляющей вектора напряженности электрического поля равна

$$\begin{aligned} \langle E_z \rangle &= \frac{1}{V} \int_{V_2} \frac{D_z}{\varepsilon_2} dV_2 + \frac{1}{V} \int_{V_3} \frac{D_z - \varepsilon_{zy} E_y}{\varepsilon_3} dV_3 = \\ &= \left( \frac{f_2}{\varepsilon_2} + \frac{f_3}{\varepsilon_3} \right) D_z - \frac{f_3 \varepsilon_{zy}}{\varepsilon_3} E_y, \end{aligned}$$

где  $f_2 = V_2/V = f_3 = V_3/V = 1/2$ , если предположить, что объемные доли благородного металла и ферромагнетика в приграничном слое одинаковы.

Вводя тензор диэлектрической проницаемости эффективной среды, для средней величины  $z$ -составляющей вектора напряженности электрического поля можно записать

$$\langle E_z \rangle = D_z / \varepsilon_{zz}^{eff} - \varepsilon_{zy}^{eff} E_y / \varepsilon_{zz}^{eff}.$$

Из сравнения двух выражений для  $\langle E_z \rangle$  следует, что

$$\varepsilon_{zz}^{eff} = \frac{2\varepsilon_2 \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3}, \quad \varepsilon_{zy}^{eff} = \frac{\varepsilon_2 \varepsilon_{zy}}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3}.$$

Аналогичным образом, вычисляя средние значения касательных составляющих вектора электрической индукции и сравнивая их со средними значениями этих составляющих, записанными для эффективной среды, можно получить

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^{eff} &= \frac{1}{2} (\varepsilon_2 + \varepsilon_3), \\ \varepsilon_{yy}^{eff} &= \frac{1}{2} \left( \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \frac{\varepsilon_{yz} \varepsilon_{zy}}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} \right), \quad \varepsilon_{yz}^{eff} = \frac{\varepsilon_2 \varepsilon_{yz}}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3}. \end{aligned}$$

Подстановка в граничные условия (3) выражений для компонент напряженностей электрического и магнитного полей (2.1-2.4) приводит к системе алгебраических уравнений для коэффициентов  $A, B, C, D, F, G$ . Интенсивность отраженной волны удвоенной частоты определяется как

$$I_{2\omega} \sim |A_{2\omega}|^2, \quad \text{где } A_{2\omega} = \omega_s \sqrt{\varepsilon_1} A / \sqrt{k_{sz1}}.$$

Характеристика нелинейного экваториального эффекта Керра вводится как отношение [3]

$$\delta_{2\omega} = I_{2\omega} \langle \mathbf{m} \rangle \langle \mathbf{m} \rangle / I_{2\omega} \langle \mathbf{m} \rangle \langle \mathbf{m} \rangle, \quad (4)$$

где  $I_{2\omega} \langle \mathbf{m} \rangle$  - интенсивность отраженной второй гармоники при нулевой намагниченности ферромагнетика. Магнитный контраст дается формулой [4]

$$\rho_{2\omega} = I_{2\omega} \langle \mathbf{m} \rangle \langle \mathbf{m} \rangle / I_{2\omega} \langle \mathbf{m} \rangle \langle \mathbf{m} \rangle. \quad (5)$$

При проведении расчетов характеристики благородного металла выбирались соответствующими серебру:  $\hbar\omega_{plm} = 9,0$  эВ,  $\hbar\gamma_m = 0,016$  эВ,  $\varepsilon_\infty = 4,45$  [8].

Характеристики ферромагнетика отвечали кобальту:  $\hbar\omega_{plf} = 9,74 \text{ эВ}$ ,  $\hbar\gamma_f = 0,632 \text{ эВ}$  [2]. Магнитооптический параметр Фохта  $Q$  кобальта предполагался не зависящим от частоты. Его значение  $Q = (-32+i20) \cdot 10^{-3}$  для длины волны 800 нм было взято из работы [9]. Значения нелинейных оптических параметров также предполагались независимыми от частоты и брались одинаковыми для благородного металла и ферромагнетика  $\chi_1 = 0,3 \cdot 10^{13} \text{ см}^2/\text{стВ}$  [10],  $\chi_2 = 0,1\chi_1$ ,  $\chi_3 - \chi_6 = 0,01i\chi_1$  [3]. Диэлектрические постоянные верхнего и нижнего диэлектриков составляли  $\epsilon_1 = 2,25$  и  $\epsilon_4 = 1$ . Напряженность поля падающей волны с длиной 800 нм принималась равной  $E_0 = 10^4 \text{ стВ/см}$ . Толщина слоя кобальта составляла 10 нм, толщина слоя серебра варьировалась от 20 до 40 нм.

На рисунке 2а представлены результаты расчетов отношения интенсивности  $I_\omega$  отраженной от благородного металла волны основной частоты к интенсивности  $I_0$  падающей волны в случае нулевой намагниченности кобальта. Резкое уменьшение интенсивности отраженной волны при угле падения  $\sim 43^\circ$  соответствует возбуждению поверхностного плазмона на границе кобальта с нижним диэлектриком. Увеличение толщины серебряного слоя повышает отражение света в области плазмонного резонанса. Магнитный контраст отраженной волны основной частоты составляет несколько процентов в районе минимума интенсивности отражения, как видно из рисунка 2б.

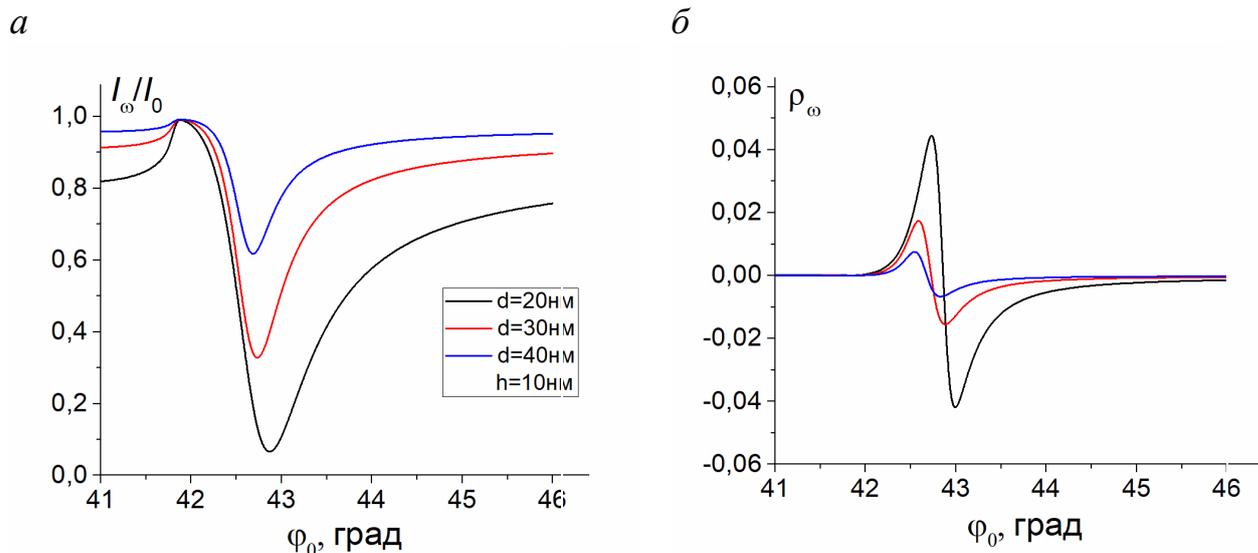


Рисунок 2 – Угловые зависимости относительной интенсивности отраженного света (а) и магнитного контраста (б) на основной частоте в наноструктуре «серебро-кобальт»

На рисунке 3а изображены угловые зависимости интенсивности  $I_{2\omega}$  отраженной волны удвоенной частоты, которая является результатом интерференции волн от трех нелинейных источников поляризации границ раздела сред. Как видно из рисунка, в области плазмонного резонанса наблюдается пик отражения, уменьшающийся с ростом серебряного слоя. Магнитный контраст в этом случае достигает нескольких десятков процентов в области, где интенсив-

ность второй гармоники минимальна, что согласуется с результатами других авторов [3,4].

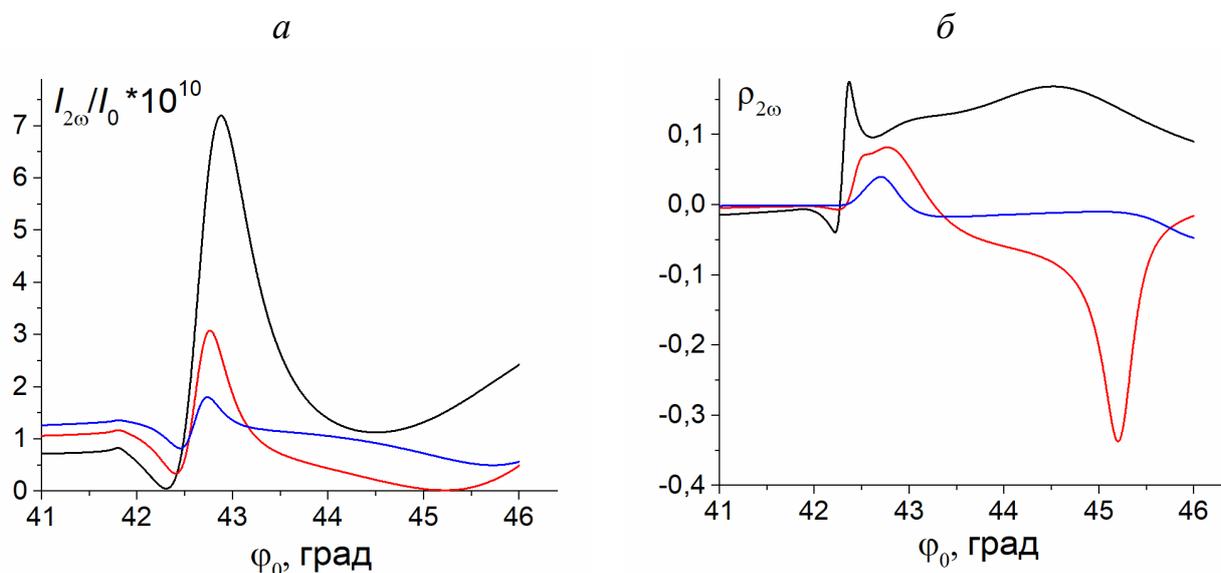


Рисунок 3 – Угловые зависимости относительной интенсивности отраженного света (а) и магнитного контраста (б) на удвоенной частоте в наноструктуре «серебро-кобальт»

На рисунках 4 и 5 представлены результаты аналогичных расчетов для случая, когда серебряный и кобальтовый слои меняются местами, т. е. отражение происходит от поверхности кобальта, а поверхностный плазмонный резонанс возникает на границе серебра с нижним диэлектриком. В этом случае с увеличением толщины слоя серебра плазмонный резонанс становится более узким, и на угловой зависимости магнитного контраста также возникают узкие пики.

Таким образом, в работе показано, что толщина и расположение серебряного слоя существенно влияют на интенсивность отраженного света удвоенной частоты и на величину, характеризующую экваториальный эффект Керра, что может оказаться важным с прикладной точки зрения.

*a*

*б*

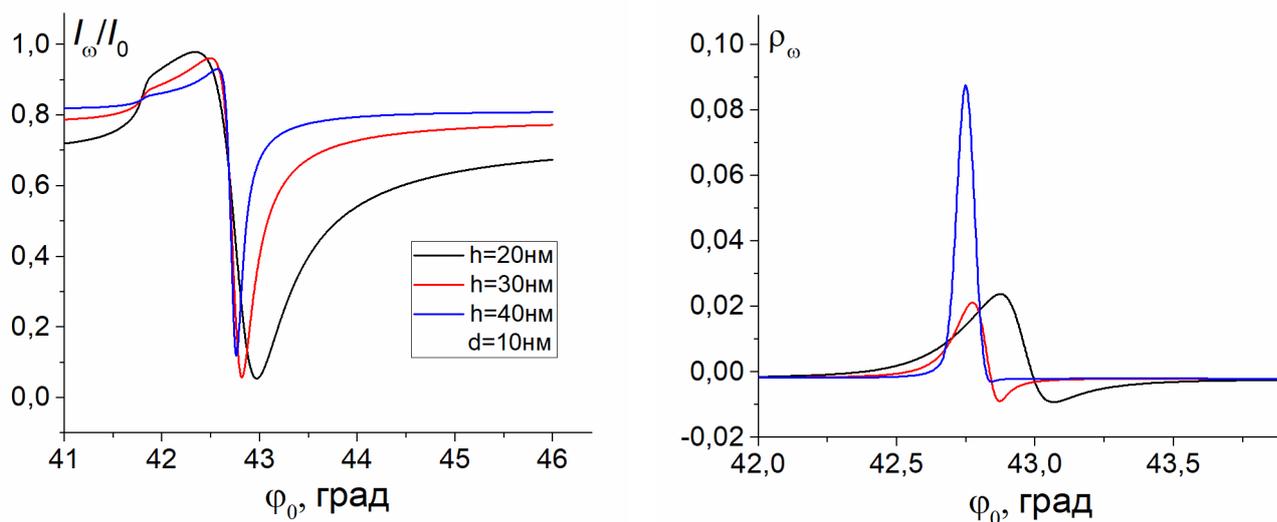


Рисунок 4 – Угловые зависимости относительной интенсивности отраженного света (а) и магнитного контраста (б) на основной частоте в наноструктуре «кобальт-серебро»

а

б

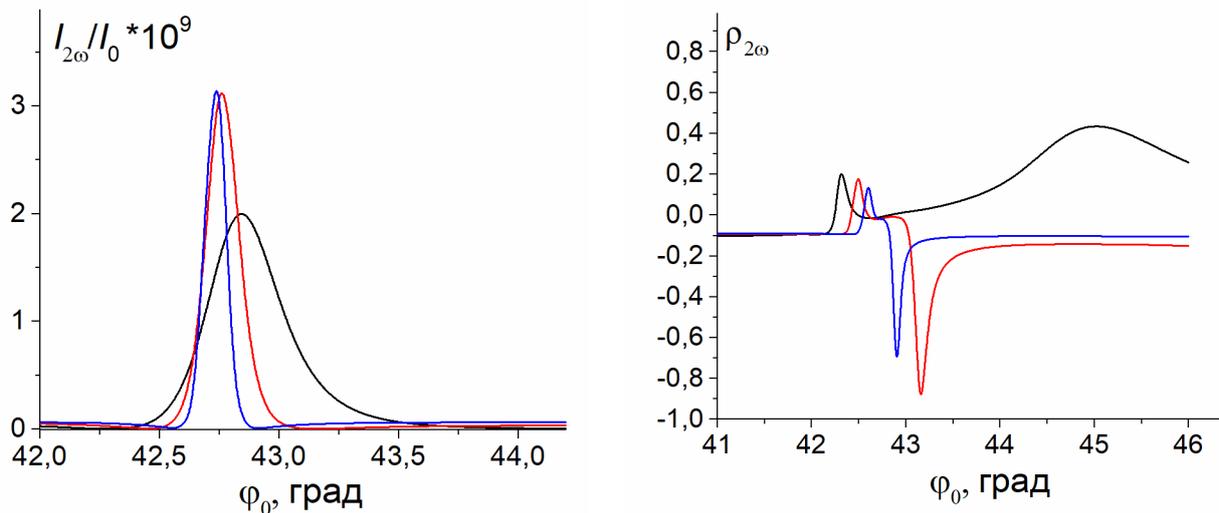


Рисунок 5 – Угловые зависимости относительной интенсивности отраженного света (а) и магнитного контраста (б) на удвоенной частоте в наноструктуре «кобальт-серебро»

#### Список литературы

1. Armelles, G. Magnetoplasmonics: Combining Magnetic and Plasmonic Functionalities / G.Armelles, A.Cebollada, A.García-Martín, and M.U. González // Adv. Opt. Mater. – 2013. – V. – P. 10–35.
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. Звездин, А.К. Нелинейные магнитооптические эффекты Керра / А.К. Звездин, Н. Ф. Кубраков // ЖЭТФ. – 1999. – Т. 116. - вып. 1(7). - С. 141-156.

4. Temnov, V.V. Towards the nonlinear acousto-magnetoplasmonics / V.V. Temnov, I. Razdolski, T. Pezeril, D. Makarov, D. Seletskiy, A. Melnikov and K.A. Nelson // *J. Opt.* -2016.- V.18.- P. 093002 (1-19).
5. Zvezdin, A.K. Modern Magneto-optics and Magneto-optical Materials / A.K. Zvezdin, V.A. Kotov. – Bristol and Philadelphia: IOP Publishing, 1997. – 363 p.
6. Jerome, B. Anchoring of nematic liquid crystals on mica in the presence of volatile molecules / B. Jerome and Y. R. Shen // *Phys. Rev. E.* – 1993. – V. 48. – N. 6. – P. 4556-4574.
7. Ефимова, А.И. Инфракрасная спектроскопия систем пониженной размерности: Учебное пособие / А.И. Ефимова, Л.А. Головань, П.К. Кашкаров П.К., В.М. Сенявин В.М., В.Ю. Тимошенко. – Санкт-Петербург: «Лань», – 2016. - 246с.
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
10. Krause, D. Optical surface second harmonic measurements of isotropic thin-film metals: Gold, silver, copper, aluminum, and tantalum / D. Krause, C.W. Teplin, and C.T. Rogers // *J. of App. Phys.* – 2004. – V. 96. – N. 7. – P. 3626-3634.

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНАЛОГИИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ФИЗИКИ**

**Якупов Г. С.**

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

Использование метода аналогии для изучения курса физики является очень эффективным средством, поскольку аналогия является одним из методов научного познания, который можно использовать при изучении дисциплин естественнонаучного цикла. Основой аналогии является сравнение. Если у двух или несколько объектов имеются общие (или похожие) характеристики, можно сделать вывод о том, что сходства могут иметь также и другие их характеристики. Естественно, что окончательные выводы о сходстве делаются уже после экспериментальной проверки.

Большое значение аналогия приобретает в связи с повышением научно-теоретического уровня изложения материала в курсе физики вуза. Кроме того, аналогии удобно использовать в учебном процессе для устранения у учащихся возникших трудностей при изучении нового материала.

Применение метода аналогии при изучении материала может осуществляться двумя способами:

- 1) непосредственное использование этого метода;
- 2) поиск физической системы, аналогичной изучаемой.

Уже было много сказано различными авторами [1, 3] про аналогии между, например, между механическими и электромагнитными колебаниями, о применении аналогии при изучении динамики вращательного движения твердого тела, поэтому в данной статье эти аналогии рассматриваться не будут. При изучении такого раздела физики как "Электрические и магнитные явления" а также при изучении дисциплины "Физические основы ЭВМ" студенты знакомятся (именно знакомятся, так как в курсе физики средней школы это не изучается) с таким устройством как полупроводниковый транзистор. В настоящее время полупроводниковые транзисторы являются основой электронно-вычислительных устройств и находят широкое применение во всех сферах деятельности человека. И поскольку, как уже было сказано выше, в школьном курсе физики полупроводниковые устройства подробно не рассматриваются (или не рассматриваются вообще), у многих студентов возникают определенные трудности при изучении устройства и физических принципов работы данного прибора. Поэтому использование аналогии при изучении транзистора, является очень эффективным методом. Но необходимо помнить, что любая модель или аналогия имеет свои границы применимости. Тем не менее реальный прибор и модель похожи, а именно, одинаковое включение их схем и тождественность работы основных элементов (частей), а также то что ток коллектора равен нулю если равен нулю ток базы.

После того, как студенты познакомятся с основными элементами транзистора: эмиттером, коллектором и базой (в качестве примера рассматривается транзистор р-п-р-типа, хотя это не принципиально) можно предложить им проследить принцип работы этого устройства на модели (рис. 1)

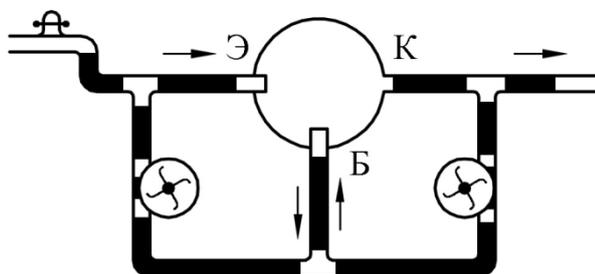


Рисунок 1 – Водоструйный насос в качестве аналога транзистора

Для этой цели демонстрируется схема, являющаяся гидромеханической аналогией транзистора, состоящая из двух центробежных водяных насосов с электродвигателями, стеклянных переходников, которые соединены между собой резиновыми трубками. Аналогом транзистора в данном случае является водоструйный насос.

Аналогом переменного "напряжения" в цепи транзистора в данной модели служит давление (напор) воды, который можно менять с помощью крана. Роль источников тока выполняют насосы, а стеклянные переходники резиновые соединительные шланги являются аналогами соединительных проводов [2].

Для ознакомления студентов с принципом работы транзистора вначале дается объяснение роли токов в обоих р-п-переходах (правом и левом) и того, как они влияют на работу данного устройства. Затем переходят к гидромеханической аналогии в которой после открытия крана создается постоянный напор жидкости в системе "эмиттер – база". Вода через вход выполняющий роль "эмиттера" попадает в полость аналога транзистора и попадает в "базу". При этом насос (источник напряжения) левого перехода работает так, что поток жидкости из "базы" попадал в "эмиттер" и возникал прямой ток, определяющиеся только параметрами источника напряжения. Напор воды можно менять, используя кран, а также меняя число оборотов двигателя, при этом часть жидкости будет поступать в коллектор, что является своего рода иллюстрацией диффузии нерекombинированных в базе дырок в коллектор.

Для выяснения роли базы в транзисторе в модели приводят в действие оба насоса таким образом, чтобы вода текла по часовой стрелке. В этом случае по аналогу базы потоки воды будут течь навстречу друг другу. Если теперь перейти от аналогии к самому транзистору, это будет означать, что токи в цепях эмиттера, коллектора и базы связаны следующим соотношением:  $I_6 = I_3 - I_к$ .

Так как скорости движения воды в эмиттере" и "коллекторе" приблизительно равны друг другу, то можно сделать вывод о том, что ток в "базе" отсутствует, следовательно  $I_6=0$ .

Вследствие того, что концентрация дырок, инжектируемых из эмиттера значительно больше их концентрации на границе с базой (за счёт её очень малой ширины), дырки будут в большом числе диффундировать к коллектору. При этом обратный ток коллекторного перехода значительно меньше тока, обусловленного дырками эмиттера. Оба эти фактора приводят к тому, что сила тока в цепи коллектора приблизительно равна силе тока в цепи эмиттера ( $I_K \approx I_3$ ). Усиливающее действие транзистора построено именно на этом принципе.

Для объяснения применения транзистора в качестве усилителя мощности рассматривают два возможных включения транзистора в цепь: по общей схеме с базой и общим эмиттером. Оба возможных способа подключения изображены на рисунке 2. Дают объяснение как распределяется токи между эмиттером, коллектором и базой.

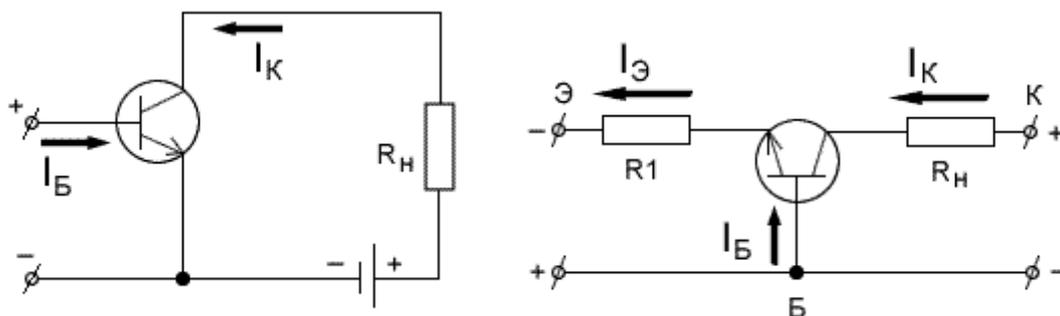


Рисунок 2 – Подключение транзистора по схеме с общей базой (а) и общим эмиттером (б).

Реализовать усиление мощности можно двумя различными способами: 1) оставляя постоянным напряжение увеличивать силу тока; 2) увеличивать напряжение при постоянстве силы тока.

Можно начать рассмотрения вопроса с усиления мощности транзистора при увеличении силы тока (рис. 2а). Усиливающее действие в этом случае основано на равенстве токов коллектора и эмиттера ( $I_K=I_3$ ). Далее рассматривается усиление при увеличении напряжения при постоянном токе (схема с общим эмиттером), рис 2б. В этом случае ток коллектора равен сумме токов эмиттера и базы ( $I_K=I_3+I_6$ ). В данном случае причиной усиления является рекомбинация дырок в базе под действием напряжения, поданного на выходы эмиттера и базы транзистора. Потом следует возврат к гидромеханической аналогии транзистора: насос "эмиттерного" перехода переключают, чтобы он двигал воду в направлении против часовой стрелки. В этом случае часть жидкости из крана попадет через канал "эмиттера" в полость "транзистора", а другая её часть начнет перемещаться в область "базы". Затем приводят в действие насос "коллекторного" перехода, вода при этом начинает перемещаться по часовой стрелке таким образом, чтобы поток воды в "базе"

действовал на воду, вытекающую из "эмиттера", заставляя её двигаться к "коллекторному" переходу.

Для объяснения усиление мощности по напряжению, можно опять же вернуться к гидравлической модели транзистора. Это усиление основано на различных сопротивлениях р-п-переходов эмиттера и коллектора, которые включены в противоположных направлениях. На эмиттерный переход, имеющий малое сопротивление, подается прямое напряжение и падение напряжения на нем невелико. На р-п-переход коллектора, который имеет большое сопротивление, подается обратное напряжение, следовательно, в эту цепь можно подключать нагрузку с большим сопротивлением, значительно превышающим сопротивление эмиттерного перехода. Из-за того, что токи коллектора эмиттера  $I_k$  и  $I_э$  одинаковы по величине, следовательно, падение напряжения на нагрузке, подключенной к коллектору окажется значительно больше падения напряжения на переходе эмиттера.

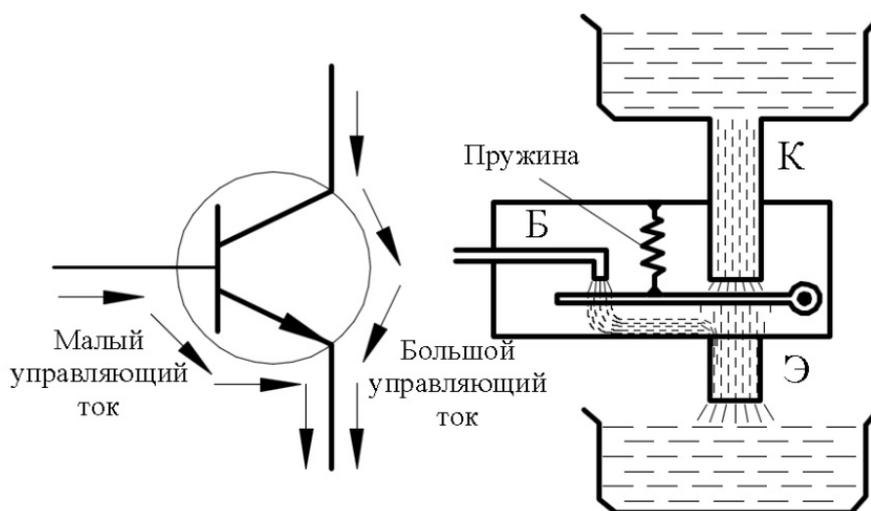


Рисунок 3 – Упрощенная гидравлическая аналогия транзистора.

Для студентов тех специальностей, у которых число часов отводимых на изучение физике сравнительно невелико, можно воспользоваться более простой гидравлической аналогией транзистора для понимания принципа его работы. Данная модель представлена на рисунке 3. В этой аналогии тонкая струя воды в трубе "базы" управляет толстой струёй воды с помощью труб "эмиттера" и "базы". При этом поток струи "эмиттера" складывается из потоков струй "базы" и "коллектора". В технике транзистор чаще всего применяется в роли ключа. Он может находиться в двух дискретных состояниях: заперт (сопротивление коллектор-эмиттер велико) или открыт (сопротивление коллектор-эмиттер небольшое). Сами эти состояния переключаются между собой с помощью за счет тока базы, то есть сравнительно небольшим током базы можно управлять большим коллекторным током.

#### Список литературы

1. Ерохин Р. Я. "Выбор модели в процессе решения физических задач" Преподавание физики в высшей школе Научно-методический журнал № 23.- М. 2002
2. Карнильцев И. Н. "Значение моделирования при постановке демонстрационного эксперимента по физике" Преподавание физики в высшей школе Научно-методический журнал № 23.- М. 2002
3. Мякишев Г. Я., Буховцев Б. Б. Физика 11: учебник для 11 класса средней школы. М. " Просвещение ", 1991 г.

## ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ КАК СРЕДСТВО РАЗВИТИЯ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ УМЕНИЙ УЧАЩИХСЯ

Якупов Г. С.

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

Одной из важнейших задач школы становится ориентация процесса обучения на формирование навыков, связанных с умением самостоятельно формулировать учебную задачу без помощи учителя, а также составления алгоритмов возможного решения этой задачи, поиска информации и её анализа, построения наиболее эффективной траектории решения. При этом все эти действия учащийся в основном должен выполнять самостоятельно, начиная с этапа выдвижения гипотезы, заканчивая решением поставленной задачи.

Формирование познавательных универсальных учебных действий требует применения различных методик, использование которых предполагает проведение разнообразных форм учебных мероприятий. Следовательно, перед школьным учителем физики возникает проблема недостатка методических рекомендаций для выполнения требований ФГОС с одной стороны и для развития познавательных универсальных учебных действий (в дальнейшем УУД) с другой стороны. В роли связующего звена, позволяющего выполнить все требования стандартов образования, могут выступить проблемные задачи по физике, решение которых будет способствовать формированию познавательных УУД. При решении этих задач учащимся необходимо прорабатывать достаточно большой объём текстовой информации, что позволяет учащимся сформировать умение без особых сложностей воспринимать новую информацию, а также устно и письменно строить речевые конструкции.

В подавляющем большинстве современные школьники испытывают сложности с заданиями, в которых требуется провести анализ и сравнение результаты исследования, обосновать определенную точку зрения с применением научной аргументации. Есть трудности с заданиями, содержащими графическую информацию: таблицы, диаграммы, графики, а также заданиями, ответ на которые требуется дать в свободной форме. Зачастую хорошо справляясь с заданиями шаблонного характера, учащиеся не всегда справляются с заданиями, требующими нестандартного подхода к выполнению.

Из этого можно сделать вывод, что большая часть учащихся не могут применять знания, полученные в школьном курсе в различных жизненных ситуациях. Наиболее эффективным способом решения этой проблемы является применение исследовательских задач в курсе физике (и вообще предметов естественнонаучного цикла) средней школы [1].

В качестве примеров таких задач можно привести задания, взятые из различных источников. Такие задачи, как правило, имеют, несколько альтернативных способов решения и сами решения могут быть совершенно различные в зависимости от того, какой подход или какие представления используются реша-

ющими эту задачу. Все эти задания как нельзя лучше подходят для развития познавательных умений.

В качестве примера можно привести такую задачу.

Оцените время соударения футбольного мяча со стенкой [2].

Как видно из условия задачи, никакие либо числовые данные в ней отсутствуют, тем не менее учащимся придется в итоге для вычисления выбрать наиболее характерные значения величин, необходимых для расчёта. Большинство задач исследовательских (или ситуационных) задач имеют такую особенность. Решающие её самостоятельно должен определиться с выбором значений, что возлагает на него дополнительную ответственность за принятие решений. В будущем очень полезный навык, если учащийся выберет инженерную специальность в вузе.

Решений как уже было сказано может быть несколько, в статье будет приведен лишь один из возможных способов решения данной задачи.

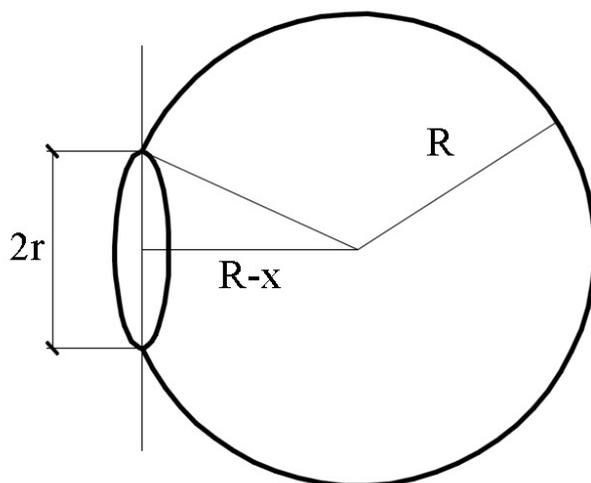


Рисунок 1 – К задаче о времени взаимодействия футбольного мяча со стенкой

Положим, что радиус области контакта мяча со стенкой можно найти как:

$$r = \sqrt{R^2 - (R - x)^2} \quad (1)$$

где  $R$  – радиус мяча,

$r$  – радиус области контакта,

$x$  – величина, на которую изменился радиус мяча в месте его контакта со стенкой, тогда после некоторых преобразований

$$r = \sqrt{2Rx - x^2} \approx \sqrt{2Rx} \quad (2)$$

полагая, что  $x \ll R$ .

Объём мяча при этом практически не изменяется, следовательно, практически не изменяется и давление внутри мяча. Сила, действующая на стенки мяча:

$$F \approx (p - p_0)S = (p - p_0)\pi x^2 = 2\pi R(p - p_0)x \quad (3)$$

где  $p$  – давление внутри мяча,  
 $p_0$  – атмосферное давление,  
 $S$  – площадь контакта со стенкой.

Несложно заметить, что сила прямо пропорциональна величине деформации. Следовательно, закон Гука можно считать выполнимым и коэффициент жесткости в данном случае:

$$k = 2\pi R(p - p_0) \quad (4)$$

Можно сделать вывод, что за время соударения мяч деформируется и оттолкнется от стенки за время  $t$  равное половине периода колебаний  $T$ :

$$t = \frac{T}{2} = \pi \sqrt{\frac{m}{k}} \approx \pi \sqrt{\frac{m}{2\pi R(p - p_0)}} \quad (5)$$

Считая, что давление  $p = 10^5$  Па, масса  $m = 0,4$  кг,  $R = 0,15$  м, получаем время взаимодействия мяча со стенкой  $t = 6,4$  мс.

Рассмотрим пример еще одной очень известной задачи об удаленности горизонта для человека среднего роста.

Задача. Оцените удаленность горизонта для человека среднего роста [3].

В данной задаче также нет никаких числовых данных в условии, но радиус Земли можно считать известным и взять его значение приближенным, так как в силу того, что по сравнению с ростом среднестатистического человека он очень большой, это не сильно скажется на полученном в процессе решения задачи результате.

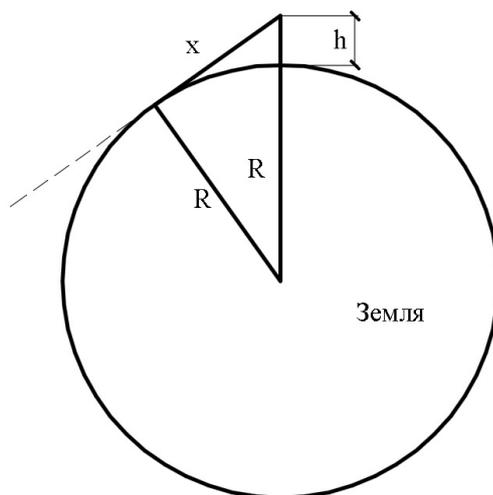


Рисунок 2 – К задаче об удаленности горизонта

При решении этой задачи в классе сразу необходимо сделать уточнение, что масштаб на чертеже, конечно же, не соблюдается. Пользуясь теоремой Пифагора, можно определить, что

$$x^2 = R^2 - (R - h)^2 \quad (6)$$

$R$  – радиус Земли,

$h$  – рост человека,

$x$  – удалённость горизонта.

Как уже было сказано радиус Земли много больше роста человека ( $R \gg h$ ), поэтому предыдущее выражение можно записать в виде:

$$x = \sqrt{R^2 - (R - h)^2} = \sqrt{2Rh - h^2} \approx \sqrt{2Rh} \quad (7)$$

Подставив соответствующие значения  $h = 1,7$  м,  $R = 6400$  км, получаем удалённость горизонта  $x = 4,5$  км.

Как видно из приведенных примеров, содержание задач не выходит за рамки школьной программы по физике.

При решении подобных заданий наиболее удачной формой работы учащихся является работа в группах. Это позволяет, в том числе сократить время на решение задачи и оптимизировать процесс её решения. При взаимодействии между членами группы происходит нахождения решения проблемы. Участие учителя при проведении урока в такой форме предполагается опосредованное: учащиеся сами находят проблему и анализируют её. Подобная форма работы имеет ещё одно важное преимущество – активизацию слабых учеников. Решение каждой подобной задачи подталкивает учащихся к поиску дополнительной информации.

Конечно же решение исследовательских задач на уроке предполагает больших затрат времени. Есть несколько путей решения данной проблемы. Либо полностью посвятить урок решению исследовательских задач, поскольку с их помощью можно раскрыть тему занятия в полном объёме. Или же организовать дополнительное занятие, которое не имеет временного ограничения по сравнению обычным уроком.

#### Список литературы

1. Исследовательские задачи по физике в школьном курсе физики. Якупов Г. С. Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры [Электронный ресурс] : материалы Всероссийской научно-методической конференции ; Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург : ОГУ, 2020.
2. Капица П.Л. Физические задачи. М.: Знание, 1966. 16 с
3. Кузнецов А.П., Кузнецов С.П., Мельников Л.А., Савин А.В. Неформальная физика. – Саратов: изд-во «Научная книга», 2006, 104 с.

## МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ ФИЗИКИ С БИОЛОГИЕЙ И ИНФОРМАТИКОЙ

Якупов Г. С.

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

Термодинамика – это наука, занимающаяся описанием тепловых явлений. В её основе лежат законы (начала, как их ещё принято называть), которые были сформулированы путём обобщения большого количества экспериментальных данных. Одним из ключевых понятий термодинамики является понятие термодинамической системы, то есть системы, состоящей из большого числа частиц. При этом не учитывается строение самих частиц. Элементы термодинамической системы могут обмениваться энергией и веществом. В курсе физики, изучаемом техническими специальностями вуза, рассматривается модель идеального газа, очень упрощенная модель реальной термодинамической системы, называемая идеальным газом.

В данной статье рассматриваются связи между термодинамикой, как разделом физики с другими дисциплинами, также преподаваемыми в вузе: химией, биологией и информатикой, поскольку законы и понятия термодинамики применимы не только в термодинамике, но и в вышеупомянутых дисциплинах. Так, например, химия также является наукой, изучающей строение вещества, и в физической химии имеется раздел, называемый химическая термодинамика, который используется, в частности, для расчёта теплового выхода химических реакций. Закон сохранения энергии для тепловых процессов, был в свое время получен Р. Майером из анализа процессов происходящих в организме человека, а на первое начало термодинамики опираются при изучении теплообмена организмов человека и животных при с окружающей средой.

В вузе в курсах физики и химии студенты знакомятся с новым для них понятием – энтропией [1,2]. Этот термин не встречается в школьной программе, и в отличие от большинства понятий, так или иначе знакомых студентам по школьному курсу, является для них новым. Изучив термин энтропия, можно предложить студентам оценить энтропию организма человека, при условии, что его состояние можно рассматривать как стационарное для промежутка времени, много меньшим по сравнению с его временем жизни. В этом случае его энтропию можно считать неизменной, то есть  $\Delta S = 0$ . Изменение энтропии может происходить из-за необратимых процессов протекающих в организме  $\Delta S_i$ , а также за счёт взаимодействия организма с окружающей средой  $\Delta S_{\text{среды}}$ :  
$$\Delta S = \Delta S_i + \Delta S_{\text{среды}}.$$

Для стационарного состояния  $\Delta S_i > 0$  и  $\Delta S_{\text{среды}} > 0$ . Считая систему «организм – окружающая среда» изолированной, можно применять второе начало термодинамики. Если процессы протекающие в системе являются необратимыми, то энтропия системы будет расти, но энтропия организма останется посто-

янной. Это обусловлено за счёт уменьшения энтропии окружающей среды. Условие изменения энтропии для данной системы можно записать так:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{dS_i}{dt} + \frac{dS_{\text{среды}}}{dt} \quad (1)$$

в случае стационарного состояния

$$\frac{dS}{dt} = 0, \quad (2)$$

следовательно,

$$\frac{dS_i}{dt} = - \frac{dS_{\text{среды}}}{dt} \quad (3)$$

Скорость изменения энтропии за счёт процессов в организме равна по абсолютной величине и противоположна по знаку скорости изменения энтропии из-за процессов, связанных с обменом энергией с окружающей средой.

Согласно принципу, сформулированному И. Пригожиным в неравновесной термодинамике, в стационарном состоянии скорость изменения энтропии за счёт необратимых процессов, при известных внешних условиях, которые препятствуют достижению системой состояния равновесия должна быть минимальна. Следовательно, посредством внутренних необратимых процессов система не может выйти из стационарного состояния.

Минимизация скорости изменения энтропии окружающей среды тесно связана с сохранением стационарного состояния системы. Следовательно, живые организмы, независимо от их уровня сложности, будут стремиться поддерживать свое стационарное состояние с целью сохранения собственной энтропии. К её уменьшению (и к увеличению) могут приводить случайные процессы.

В своё время понятие энтропии появилось в термодинамике для решения частной задачи, но затем перешагнуло рамки физики и вышло за её пределы. Помимо трактовки энтропии Клаузиусом появилась статистическая формулировка энтропии, предложенное Больцманом, а в последствии и так называемая информационная энтропия, а также энтропия математическая и другие. Понятие энтропии стало базовым для такой науки как теория информации в качестве меры неопределенности. В некотором роде информационная энтропия подобна понятию дисперсии, с тем отличием, что дисперсия служит мерой неопределенности только для специальных распределений (например, для распределения Гаусса), а энтропия от вида распределения не зависит.

В информатике понятие энтропии сформулированное К. Шенноном очень схоже с больцмановской статистической трактовкой понятия энтропии. В данном случае, этот термин был использован для обозначения количества информации, содержащемся в некотором сообщении. Шеннон полагал, что информа-

ция является снятой неопределенностью. Неопределенность всегда имеет место в случае выбора. В случае уменьшения количества рассматриваемых вариантов (микросостояний в термодинамике) в конечном счёте остаётся лишь одно возможное состояние (вариант). Уменьшение неопределенности позволяет принимать решения, в этом и заключается основная роль информации. Следовательно, информационная энтропия есть мера внутренней неупорядоченности системы. Если вероятность какого-либо события мала, то появление информации о нём снимает большую неопределённость. Понятия информации и энтропии имеют глубокую связь друг с другом, несмотря на то, что статистическая термодинамика и теория информации появились независимо друг от друга и их появление разделено очень большим промежутком времени. К. Шеннон впервые связал в 1948 году понятия информации и энтропии. Именно он предложил рассматривать энтропию как меру полезной информации при её передаче и хранении. Им также было предложено понимать под информацией полезные для потребителя сигналы, а бесполезные сигналы рассматривать как шум (или помехи) [3].

При помощи информационной энтропии можно определить пропускную способность канала, которая обеспечит наиболее надежную передачу информации. Более того, имеется возможность предсказывать возможный ход эксперимента или событий, разделив их на составляющие и вычислять значение энтропии каждого из них в отдельности (поскольку энтропия обладает свойством аддитивности). Этот метод статистической термодинамики даёт возможность определить вероятность того или иного события. Пользуясь им можно расшифровать закодированный текст, исследуя вероятность появления символов и их энтропию.

Можно в качестве примеров, приводимых студентам, привести использования термина энтропия в областях, казалось бы даже не имеющих ничего общего ни с физикой ни с естественнонаучными дисциплинами вообще, например, в социологии. Там информационная энтропия служит характеристикой отклонения социума или его элементов от принятого за эталонное состояние, что проявляется в снижении эффективности развития и функционирования его как системы, снижения уровня самоорганизации.

Если объединить все упомянутое выше, то даже на примере всего одного понятия можно установить огромное число межпредметных связей физики с другими дисциплинами. Приведенные в статье примеры иллюстрирует общность естественных наук и саму универсальность подхода, предлагаемого термодинамикой. Использование межпредметных связей также весьма эффективно при изучении такой дисциплины как "Концепции современного естествознания", позволяя использовать общие подходы в науке.

#### Список литературы

1. Мякишев, Г. Я. Физика: Молекулярная физика. Термодинамика. Углубленный уровень: 10 кл.: Учеб. / Г. Я. Мякишев. – М.: Дрофа, 2018.

2. Хомченко, Г. П. Пособие по химии для поступающих в вузы / Г. П. Хомченко. – М.: Нов. волна, 2002.

3. Ремизов, А. Н. Медицинская и биологическая физика / А. Н. Ремизов. – М.: ГЕОТАР-Медиа, 2013.

## САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КУРСА ФИЗИКИ

Якупов Г. С.

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

В последние годы в обществе наблюдается увеличение количества новых технологий, что предполагает непрерывное самообразование уже получивших высшее образование специалистов. Только при сформированных социально-личностных компетенциях, которые направлены на развитие умений и навыков саморазвития возможна продуктивная деятельность в сфере получения новых профессиональных знаний.

Следовательно вуз должен обеспечить своего потенциального выпускника не только знаниями и навыками в определенной профессиональной области, а также сформировать основу для осуществления обучения на протяжении всей жизни, что способствует также повышению его конкурентоспособности на рынке труда, а также формирует предпосылки для увеличения интеллектуального капитала страны, внося вклад в развитие её экономики.

Исходя из опыта педагогической деятельности для большинства студентов свойственна некоторая несформированность навыков самостоятельной работы.

Это обстоятельство вызвало необходимость использования на кафедре физики и методики преподавания физики ОГУ новых методов реализации учебной деятельности, основанных на созданной в вузе балльно-рейтинговой системы, обеспечивающей мотивацию к участию студентов в самостоятельной работе, а также выполняющей роль своеобразного базиса, позволяющего использовать различные виды самостоятельной работы студентов (в дальнейшем СРС) в учебном процессе.

Для дисциплины "Физика" в качестве самостоятельной работы можно рассматривать:

- изучение теоретических разделов, не включенных в аудиторное рассмотрение;
- решение расчетно-графических заданий, предусмотренных рабочей программой дисциплины;
- выполнение виртуальных лабораторных работ и сдача отчета по ним (этот пункт активно использовался в период дистанционного обучения студентов);
- самостоятельная работа студентов во время практических занятий.

Последующие действия вытекают из поставленных целей и задач, а также из самой сущности балльно-рейтинговой системы, а именно, определение способов и формы контроля выполнения СРС и способы её оценивания.

Характер и форма отчетности по СРС доводится до студентов в начале семестра, кроме того, студентов информируют о сроках сдачи отчетов по заданиям и проведения контрольных мероприятий, оговаривают количество начисляемых за каждый вид отчётности баллов. Всё это делается с учётом того, что студенты могут представлять выполненные задания раньше установленного срока.

Во время семестра на модульных неделях можно подвести промежуточные итоги работы студентов. Все полученные студентами баллы суммируются при аттестации:

- лабораторный практикум (качественное выполнение эксперимента и обработку данных эксперимента)
- количество выполненных и сданных студентом лабораторных работ;
- решение задач из расчётно-графического задания;
- коллоквиумы по теоретическому материалу, рассмотренному на лекционных занятиях и самостоятельно;
- активность в процессе СРС.

Сделаем попытку проследить организацию СРС с учётом того, что её эффективность зависит в большой степени от дидактической составляющей.

Во-первых, перевод некоторых теоретических вопросов на самостоятельное рассмотрение студентами обязательно должен сопровождаться созданием учебного пособия, содержащего подробное изложение тех тем, которые студентам предложено изучить самостоятельно. Кроме того, для того, чтобы изложение материала сохранило некоторую логическую целостность, разделы, рассмотренные на лекциях, должны быть сопровождаемы кратким конспектом [1, 2]. В пособии также должен содержаться материал, необходимый студентам для выполнения и защиты лабораторных работ и подготовки к коллоквиумам.

Практические занятия по дисциплине "физика" позволяют студентам усвоить её основные положения на высоком уровне, поэтому на них должны быть сформированы условия для реализации творческой составляющей обучения. Этот вид самостоятельной работы обязательно должен контролироваться преподавателем.. Для этого можно разделить занятие на две части, каждая из которых имеет свою задачу. Первая часть посвящается рассмотрению теоретических основ и способов решения заданий по заданной теме, а на второй части студентам предоставляется возможность самостоятельной работы.

Та часть учебного пособия, в которой рассматриваются примеры и способы решения типичных заданий, должна быть большей по объёму и по значимости [3].

Большую роль при подготовке пособия играет подбор задач для самостоятельной работы студентов в аудитории, в процессе которой они имеют возможность консультироваться с преподавателем и аккумулируют опыт решения типовых заданий. Большое значение в этом случае имеют задания разного уровня сложности, так как это позволяет преподавателю выдавать студентам задания таким образом, чтобы каждый участник процесса мог работать на доступ-

ном для него уровне, в том ритме к которому он привык и достиг нужного результата.

Комплектование индивидуальных заданий для студентов должно проводиться с учётом того, что для их выполнения необходимо будет изучить все разделы дисциплины, а располагаться задания должны в соответствии с последовательностью их изучения в лекционном курсе. Типовые задания можно выносить на экзамен или зачёт (дифференцированный зачёт) в качестве дополнительного стимулирования СРС.

Правильная организация самостоятельной работы позволяет сократить время, затрачиваемое на выполнения большого количества зачастую громоздких вычислений при выполнении лабораторной работы. Затраты времени можно снизить используя для обработки и представления результатов электронных таблиц Excel (или любого другого подобного программного продукта), которые содержат встроенные математические функции, позволяющие студентам обойтись без затрат времени на вычисления.

Кроме всего прочего этот подход выполняет ещё одну дополнительную роль: учить студентов, как будущих специалистов, рационализировать свою деятельность, работать более продуктивно.

Данный подход к реализации самостоятельно работе позволяет студентам на практике использовать полученные теоретические знания, а также направлен на формирование у них умений выделять физическую составляющую в прикладных задачах и умение решать их теми методами, которые используются в физике.

#### Список литературы

1. Исследовательские задачи по физике в школьном курсе физики. Якупов Г. С. Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры [Электронный ресурс] : материалы Всероссийской научно-методической конференции ; Оренбург. гос. ун-т. – Электрон. дан. – Оренбург : ОГУ, 2020.

2. Использование комбинированных видеуроков по физике при дистанционном обучении. Якупов Г.С., Якупов С.С. В сборнике: Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. Материалы Всероссийской научно-методической конференции. 2019. С. 4519-4521.

3. Использование биофизического материала на уроках физики. Якупов Г.С., Гладышева Ю.А. Вестник Оренбургского государственного университета. 2018. №5(217). С. 79-87.