

СЕКЦИЯ 17

**ПРОБЛЕМЫ
ФИЗИКИ И
ФИЗИКО-
ТЕХНИЧЕСКОГО
ОБРАЗОВАНИЯ**

СОДЕРЖАНИЕ

МЕТОДИКА СТАТИЧЕСКОГО СВЕТОРАССЕЯНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ В КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРАХ Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, доцент, Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	2768
ДЕНТАЛЬНАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ: МАТЕРИАЛЫ, МЕТОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доцент, Ахметова Л.П., Хансулян Д.М.....	2773
РАЗРАБОТКА ЭЛЕКТРОННОГО УЧЕБНОГО ПОСОБИЯ «БЕСПРОВОДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКЕ» Бакаев А.А., Слатенкова А.С., Шелопаева Е.А.....	2778
СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ ТЕХНИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКИ НА ТЕРРИТОРИИ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ Бакаев А.А., Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доцент.....	2781
ИСТОРИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ РАЗВИТИЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ДИСЦИПЛИНАМ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОГО ЦИКЛА Белокопытова О.Г., канд. пед. наук.....	2785
МИКРОБНЫЕ БИОПЛЕНКИ Гиндер М.В.	2789
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е.	2794
ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ЗАРЯДОВОГО ТРАНСПОРТА В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ Иванов И.О.	2798
НЕКОЛЛИНЕАРНЫЕ СПИНОВЫЕ И МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ СВЕРХТОНКИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ Каепкулова Э.И.....	2802
БРИЛЛЮЭНОВСКИЙ РЕФЛЕКТОМЕТР Кирин И.Г., д-р техн. наук, профессор.....	2806
QUADRUPOLE INDUCED OPTICAL TRANSVERSE ANTI-TRAPPING EFFECT IN GAUSSIAN BEAM Kislov D.A. ^{1,2} , Ph.D. Shalin A.S. ^{2,3} , Sc.D.	2813
СОВРЕМЕННОЕ МЕДИЦИНСКОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ НЕЙРОЭНДОХИРУРГИИ Рачинских А.В., Колесникова О.В., Сивожелезова В.М.....	2819
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ВЫТЯНУТОГО ЗОЛОТОГО НАНОСФЕРОИДА В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор.....	2823

АКТУАЛЬНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ МЕДИЦИНСКИХ КАРТ Кузнецова Ю.С., Тургаева С.А., Тумашев А.К.	2831
КОНТЕКСТНЫЙ МЕТОД В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТА-ФИЗИКА ОСНОВАМ АСТРОНОМИИ Кучеренко М.А., канд. пед. наук	2837
МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ПЛАЗМОННЫХ И МАГНИТНЫХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ С МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОПУШКОЙ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент, Неясов П.П., Алимбеков И.Р.....	2841
РАДИАЦИОННЫЕ И БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ СФЕРОИДАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, Неясов П.П., Алимбеков И.Р.....	2849
КИНЕТИКА РЕЛАКСАЦИИ АКТИВИРОВАННОЙ ЛАЗЕРОМ СФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ С КОНВЕКТИВНЫМ ТЕПЛООБМЕНОМ НА ЕЕ ГРАНИЧНОЙ ПОВЕРХНОСТИ Кучеренко М. Г. ¹ , д-р физ.-мат. наук, профессор, Русинов А.П. ¹ , канд. физ.-мат. наук, доцент, Ибраев Н.Х. ² , д-р физ.-мат. наук, профессор, Селиверстова Е.В. ² , PhD.....	2857
МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ФОТОПРОЦЕССЫ НАД КВАЗИДВУМЕРНЫМИ РЕШЕТКАМИ ИЗ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ПОДЛОЖКАХ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Русинов А. П., канд. физ.-мат. наук, доцент, Коловертнов Г. С.	2866
СПЕКТРЫ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ СЛОИСТЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОКОМПОЗИТОВ В РЕЖИМЕ СПАЗЕРА С ВЫРОЖДЕННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ МЕТАЛЛА ОБОЛОЧКИ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Пискунов А.А.....	2875
МЕХАНИЗМ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗАПИСИ В ПЛЕНКАХ ПВС-ТИОНИН Лантух Ю.Д., канд физ.-мат. наук, доцент, Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	2883
К ВОПРОСУ О МЕТОДИКЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ОСНОВ СФЕРИЧЕСКОЙ АСТРОНОМИИ НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТОВ ВЫСОТЫ СОЛНЦА НАД ГОРИЗОНТОМ Макаров В.Н.	2887
ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЕРИВАТОГРАФА «THERMOSCAN-2» ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛАХ Макаров В.Н., Серёгин М.М.....	2893
ОБЗОР СОВРЕМЕННОГО МЕДИЦИНСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ Новохатская П.А., Жальбаева К.М., Баранова О.В., канд. биол. наук, доцент	2898

СОВРЕМЕННЫЕ СИСТЕМЫ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ КОСМОНАВТОВ. ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ СИСТЕМ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ КОСМОНАВТОВ	Новохатская П.А., Жальбаева К.М., Макаров В.Н.	2903
ФОРМИРОВАНИЕ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ СТУДЕНТОВ ИНЖЕНЕРНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ	Огерчук А.А., канд. пед. наук, Анисина И.Н., канд. техн. наук, доцент, Пискарева Т.И., канд. техн. наук.....	2910
МЕХАНИЗМ И КИНЕТИКА МИКРОВОЛНОВОГО НАГРЕВА ОКСИДА ТИТАНА	Сокабаева С.С., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Нургалиева К.К.....	2914
СЕНСИБИЛИЗИРОВАННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ КРАСИТЕЛЯ РОДАМИН 6G ПОД ВЛИЯНИЕМ НАНОСИСТЕМ ЛАНТАНОИДОВ С БЕТА-ДИКЕТОНАМИ	Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент	2918
БЛИЖНЕПОЛЬНАЯ ОПТИКА 2D-РЕШЕТОК ИЗ КОМПОЗИТНЫХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ И ЭФФЕКТЫ КОГЕРЕНТНОГО СПАЗИРОВАНИЯ	Степанов Д.А.....	2923
МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ЭКЗАМЕНУ ПО ФИЗИКЕ В ОГУ	Узенбаев Ф.Г., канд. техн. наук, доцент, Якупов Г.С.....	2930
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПЛАТФОРМЫ MOODLE ПРИ ДИСТАНЦИОННОМ ИЗУЧЕНИИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА» СТУДЕНТАМИ ОГУ	Цветкова Е.В.	2935
ТРАНСДУКЦИЯ МЕТОДОВ КРИСТАЛЛОХИМИИ В ФИЗИКУ МАТЕРИАЛОВ	Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Четверикова Д.К.....	2939
ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «КВАНТОВАЯ ТОЧКА – ОБОЛОЧЕЧНАЯ НАНОЧАСТИЦА»	Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Мушин Ф.Ю.....	2943
КАЧЕСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ КАК СПОСОБ БОРЬБЫ С "КЛИПОВЫМ МЫШЛЕНИЕМ" УЧАЩИХСЯ	Якупов Г. С.....	2952
ПОНЯТИЕ МИКРООБЪЕКТА В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ	Якупов Г. С.	2955
ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ	Якупов Г. С.	2958

МЕТОДИКА СТАТИЧЕСКОГО СВЕТОРАССЕЯНИЯ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ В КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРАХ

Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Раздобреев Д.А., канд. хим. наук

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

Препараты, содержащие наночастицы, активно используются в медицине, биологии, в индустрии катализаторов, при производстве электронных и оптических материалов. Соблюдение баланса между реакционной способностью и безопасностью использования частиц малых размеров в настоящее время является важной проблемой, решение которой в первую очередь обеспечивается надежными методами детектирования наночастиц и определением их характеристик. Относительно простым и эффективным методом изучения структурных и реологических свойств наночастиц является метод статического светорассеяния [1].

В настоящей работе описана апробация метода многоугольного статического светорассеяния на коллоидном водном растворе латексных глобул, реализованного с использованием стандартного лабораторного оборудования. Общий вид экспериментальной установки показан на рисунке 1.

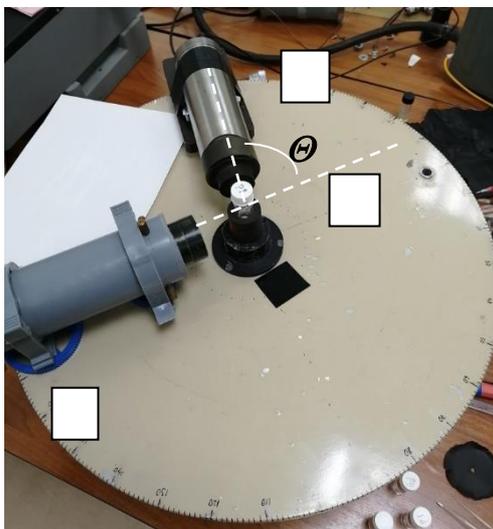


Рисунок 1 Общий вид установки для измерения угловой зависимости светорассеяния. 1- гелий-неоновый лазер, 2- ФЭУ 68 в защитном кожухе, 3- кюветное отделение с виалой, содержащей исследуемый коллоидный раствор. θ - угол рассеяния.

На вращающемся диске гониометра смонтирован гелий-неоновый лазер (1) и кюветное отделение с виалой (3). Вся конструкция свободно перемещалась относительно неподвижного фотодетектора (2) на угол θ . В качестве фотодетектора использовался фотоэлектронный умножитель ФЭУ-68 в комплекте с

интерференционным светофильтром на 632 нм. ФЭУ и светофильтр монтировались внутри металлического кожуха (2). Рассеянный исследуемым раствором свет попадал на вход ФЭУ через узкое (1 мм) коллиматорное отверстие в заглушке. Угол рассеяния варьировался в пределах от 130° до 40° с интервалом 10° . Полезный сигнал с выхода ФЭУ регистрировался с помощью электрометрического усилителя У5-9. При напряжении питания фотоумножителя 1200 В рассеянный свет от чистого растворителя формировал полезный токовый сигнал с ФЭУ на уровне 10^{-7} А.

Известно, что индикатриса угловой зависимости светорассеяния вертикально поляризованного излучения истинного раствора представляет собой окружность (с поправкой на изменения рассеивающего объема при изменении угла рассеяния). На рисунке 2 кривая 1 представляет индикатрису рассеяния дистиллированной воды. Кривая 1 симметрична, но ее вид отличается от окружности. Мы связываем это с паразитной засветкой от рассеяния на стенках вials при малых и больших углах рассеяния. Для компенсации этого эффекта нами вводился поправочный коэффициент. На этом же рисунке приведены индикатрисы рассеяния водного раствора латексных глобул с учетом поправочного коэффициента: кривая 2 - ($C=1.2 \cdot 10^{-3}$ г/мл), кривая 3 - ($C=0.9 \cdot 10^{-3}$ г/мл), кривая 4 - ($C=6.5 \cdot 10^{-4}$ г/мл), кривая 5 - ($C=5.2 \cdot 10^{-4}$ г/мл). Из представленного рисунка видно, что индикатрисы рассеяния латексных растворов ассиметрично вытянуты в сторону малых углов рассеяния, что соответствует рассеянию на частицах диаметром $d \approx \lambda$ и более [2].

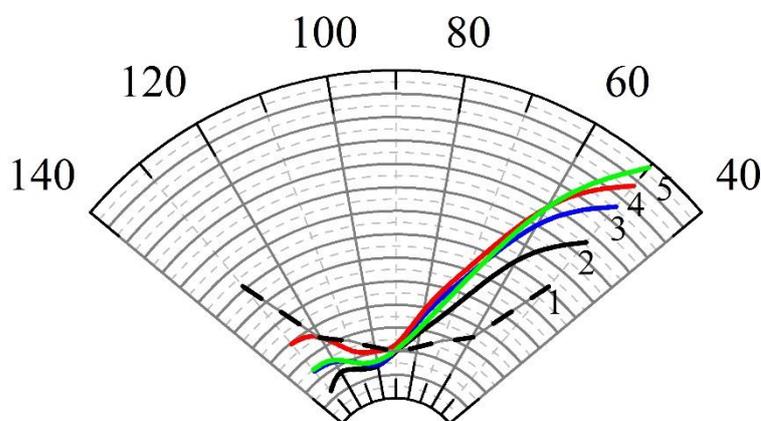


Рисунок 2 Индикатрисы угловой зависимости светорассеяния дистиллированной воды (1), водного раствора латексных глобул различной концентрации: кривая 2- ($C=1.2 \cdot 10^{-3}$ г/мл), кривая 3- ($C=0.9 \cdot 10^{-3}$ г/мл), кривая 4- ($C=6.5 \cdot 10^{-4}$ г/мл), кривая 5- ($C=5.2 \cdot 10^{-4}$ г/мл).

Исследуемые растворы латексных глобул готовились из монодисперсного концентрата латекса, состоящего из первичных глобул радиусом $R=30$ нм. Известно, что в растворителе с различной РН первичные глобулы могут формировать кластеры различной фрактальной размерности. Возможная структура такого кластера (изображение взято из [3]) приведена на рисунке 3.

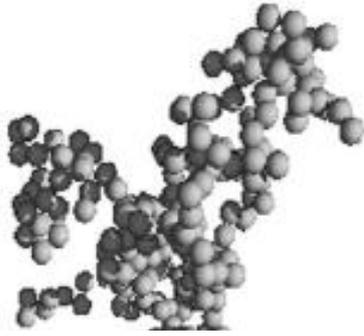


Рисунок 3 Модель кластера латексных глобул фрактальной размерности $d_F=1.78$ [3].

Масса кластера связана с его размером R , размером первичных глобул r_0 и его фрактальной размерностью d_F следующим выражением [3]:

$$M \propto (R/r_0)^{d_F}.$$

Для фрактальных кластеров, в случае когда волновой вектор рассеяния $q=4\pi/\lambda * \sin(\Theta/2)$ лежит в интервале: $r_0 \leq q^{-1} \leq R$, имеет место степенная зависимость интенсивности рассеяния от волнового вектора [4]:

$$I(q) \propto q^{-d_F}.$$

На рисунке 4 представлены графики зависимости логарифма интенсивности светорассеяния от волнового вектора для растворов латексных глобул различной концентрации. Экспериментальные данные удовлетворительно аппроксимируются линейной зависимостью с угловым коэффициентом, по которому проводилась оценка средней фрактальной размерности латексных кластеров $d_F=1.85$.

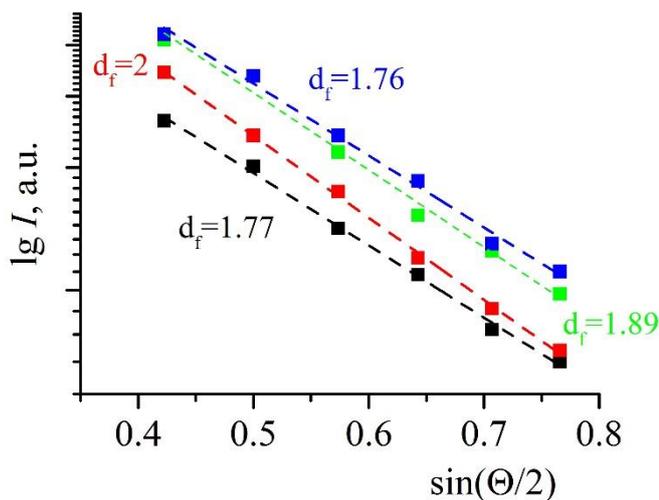


Рисунок 4 Графики зависимости логарифма интенсивности светорассеяния от волнового вектора рассеяния $q=4\pi/\lambda * \sin(\Theta/2)$ для растворов латексных глобул различной концентрации. ■ - $C=5.2 \cdot 10^{-4}$ г/мл, ■ - $C=6.5 \cdot 10^{-4}$ г/мл, ■ - $C=0.9 \cdot 10^{-3}$ г/мл, ■ - $C=1.2 \cdot 10^{-3}$ г/мл.

В методике статического светорассеяния измеряется усредненная (по времени) интенсивность рассеяния света раствором. Анализ угловых и концентрационных зависимостей позволяет получить информацию о размерах рассеивающих r_g центров, их молекулярной массе M_w и втором вириальном коэффициенте A_2 . Основой методики служит уравнение Дебая-Зимма [1]:

$$\frac{KC}{R_\Theta} = \frac{1}{M_w \left(1 - \frac{1}{3} r_g^2 q^2\right)} + 2A_2 C \quad (1),$$

где $K = \frac{4\pi^2 n_0^2}{\lambda_0^4 N_A} \left(\frac{\partial n}{\partial C}\right)^2$ - оптическая константа, R_Θ - нормированная интенсивность Релеевского рассеяния раствора.

В случае, когда характерные размеры рассеивающих центров соизмеримы со световой длиной волны, интенсивность рассеяния зависит как от концентрации раствора, так и от угла рассеяния. В 1948 году Зиммом (В. Н. Zimm) была предложена процедура линеаризации соотношения (1) относительно квадрата волнового вектора q^2 и концентрации раствора C , ставшая впоследствии стандартной.

Для серии растворов различной концентрации измерялась угловая зависимость интенсивности рассеяния. Результаты измерений, в виде зависимости KC/R_Θ от $\sin^2(\Theta/2) + B \cdot C$ представлены на рисунке 5. Здесь B – масштабная константа, выбираемая для удобства работы с графиком ($B \cdot C_{\max} \approx 1$).

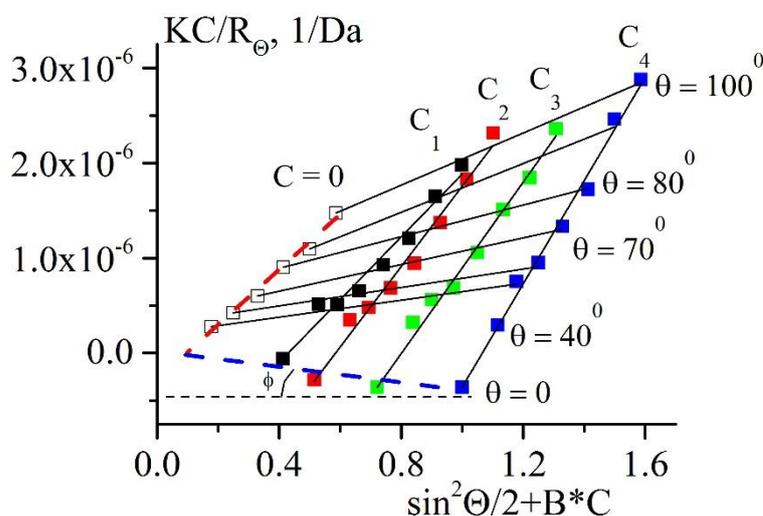


Рисунок 5 Диаграмма Зимма построенная на основе экспериментальных данных измерения угловой зависимости светорассеяния латексных растворов различной концентрации. Синяя пунктирная линия - экстраполяцией к нулевому углу, красный пунктир - экстраполяцией к нулевой концентрации.

Линию $C=0$ получали экстраполяцией к нулевой концентрации, а линию $\Theta=0$ – экстраполяцией к нулевому углу. Линия $\Theta=0$ отсекает на оси ординат отрезок равный обратной величине молекулярной массы $1/M_w$ рассеивающих

кластеров. Угловой коэффициент наклона прямой $\Theta=0$ - $tg \varphi$ несет информацию о радиусе инерции кластера:
$$\frac{tg \varphi}{1/M_w} = \frac{4\pi^2 n^2}{3\lambda^2} r_g^2.$$

Из диаграммы Зимма, представленной на рисунке 5, следует, что масса латексных кластеров равна $M_w=49800$ kDa, а величина их радиуса инерции составляет $r_g=600$ nm. Если допустить, что кластеры состоят из первичных глобул радиуса $r_0=30$ nm, то количество глобул n в кластере можно оценить как:

$$n=(r_g/r_0)^{1.85} \approx 609$$

В работе на основе стандартного лабораторного оборудования реализован метод многоугольного статического светорассеяния. На коллоидных водных растворах латексных глобул различной концентрации проведены измерения угловой зависимости светорассеяния. По полученным экспериментальным результатам проведена оценка фрактальной размерности коллоидных кластеров, их средней массы и радиуса инерции. Анализ полученных результатов и их сравнение с литературными данными свидетельствуют о работоспособности поставленной методики.

Список литературы

1. В. Н. Цветков, В. Е. Эскин, С. Я. Френкель. Структура макромолекул в растворах. М. Наука. 1964.
2. Рабек Я. Экспериментальные методы в химии полимеров. Я. Рабек; пер.с англ. под ред. В. В. Коршака. М. : Мир, 1983. Т. 1. 384 с.
3. Graeme Bushell and Rose Amal. Fractal Aggregates of Polydisperse Particles// Journal of Colloid and Interface Science, 1998, Vol. 205, p. 459–469.
4. Zukang Zhou and Benjamin Chu. Light-Scattering Study on the Fractal Aggregates of Polystyrene Spheres: Kinetic and Structural Approaches// Journal of Colloid and Interface Science, 1991, Vol. 143, No. 2, p. 356-365.

ДЕНТАЛЬНАЯ ИМПЛАНТАЦИЯ: МАТЕРИАЛЫ, МЕТОДЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ

Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доцент,
Ахметова Л.П., Хансулян Д.М.

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

Ситуация, развивающаяся в последние годы, отчетливо показывает нам актуальность доступной и качественной медицины. Всегда было важно наличие квалифицированных кадров, современной медицинской техники и новейших материалов и технологий. На сегодняшний день стоматология является одной из наиболее социально востребованных и развитых областей медицины. В последнее время пациентам становится важно не только качественное медицинское обслуживание, но и эстетически приятный результат, поэтому импланталогия стремительно набирает популярность.

При имплантации зубов врачу необходимо провести доскональную работу по подбору метода вживления имплантата и материала, из которого будет сделан новый зуб. Выбор материала во многом зависит от его биологической совместимости с организмом человека. Биосовместимые материалы — материалы, которые при вживлении в организм и пребывая в нем длительное время, не вызывают негативных реакций в нем. К имплантатам предъявляются следующие требования: они должны обладать механической прочностью, коррозионную устойчивость, биохимической инертностью по отношению к окружающим тканям, а также отсутствием аллергического и канцерогенного воздействия,

Из чего же обычно состоят имплантаты?

При изготовлении имплантационных конструкций используют материалы трех разных групп: металлы, керамика и полимеры. Каждая группа имеет ряд достоинств и недостатков. В процессе стоматологической имплантации в ткани организма вводится чужеродное тело. Организм реагирует не только на введенный имплантат, но и на материал, из которого он сделан, поэтому все материалы подразделяют на три группы: биотолерантные, биоинертные и биоактивные. От состава материала зависит степень его вживляемости, соединение имплантата с окружающей его костью.

Наибольшую популярность среди металлов приобрел сплав титана. Он проявляет антикоррозийные свойства, имеет хорошую совместимость с тканями организма, а также имплантаты из сплавов титана быстрее обрастают костью, что нельзя сказать про конструкции из сплавов хрома и кобальта. Именно этот материал в конце 60-х–начале 70-х годов стал приоритетным при изготовлении имплантационных конструкций. Большим преимуществом титана и его сплавов является оксидный слой, образующийся на поверхности зубного имплантата. Именно благодаря ему повышаются антикоррозийные свойства материала. Однако, среди всех достоинств сплавов титана имеется и недостаток – его низкое сопротивление сдвигу и износу.

Керамика отличается своей биосовместимостью, стойкостью к воздействию высоких температур, высокой твердостью, термо- и коррозиостокостью, отсутствием аллергических реакций. К недостаткам, ограничивающим применение керамики в медицине, можно отнести ее ломкость и хрупкость. Имплантаты из керамики набирают свою популярность. Помимо перечисленных достоинств, керамика очень эстетична, на вид трудноразличима от естественного зуба, именно этот материал врачи предпочитают применять в зоне улыбки, но, в сравнении с имплантатами из титана, стоимость керамики значительно дороже.

Полиэфирэфиркетон (ПЭЭК) – полукристаллический термопластик, за счет своей биосовместимости предоставляет возможность изготавливать имплантаты, поддерживающие мягкие ткани, усиливающие или полностью заменяющие костную ткань. ПЭЭК сочетает в себе жесткость, прочность, твердость, биосовместимость, износостойкость, а также возможность повторного использования после стерилизации. Биологическая и химическая инертность полимера выше, чем у титана, имплантат из данного материала не является препятствием при проведении лучевой терапии, он легкий и отличается небольшой толщиной. Прочность ПЭЭК можно адаптировать, в зависимости от требований, предъявляемых к имплантату, для ее увеличения необходимо добавить частицы или волокна углерода. Полимер обладает высокой химической стойкостью и не меняет свои свойства под влиянием высоких температур.

Стоматологическая имплантология включает в себя несколько видов, каждый из которых имеет свои особенности. Выбор того или иного вида имплантации зубов зависит от общего состояния здоровья пациента, ротовой полости, а также от его финансовых возможностей. Существуют следующие виды имплантации:

- эндооссальная (внутрикостная);
- базальная;
- эндодонто-эндооссальная;
- внутрислизистая.

Рассмотрим каждый из видов подробнее.

Эндооссальная имплантация.

Данный метод имплантации применяется чаще всего, так как является наиболее надежным. При данном виде устанавливают импланты в виде винта, однако если кость тонкая, они могут быть пластичными и даже комбинированными. Он может быть одноэтапным и двухэтапным. Одноэтапный метод также называют экспресс-имплантацией, так как все работы выполняются за один день. Особенность этого метода – цельная конструкция, поэтому он подходит не всем, а также требует некоторых усилий при замене импланта. При двухэтапной процедуре сначала вживляется имплантат, а через 6–16 недель устанавливается постоянная коронка. Данный тип более популярен, поскольку он позволяет специалистам контролировать процесс сращения имплантата с костной тканью и наблюдать реакцию организма, а в случае повреждения коронки ее можно будет довольно быстро заменить.

Базальная имплантация.

Если пациенту нужно восстановить большое количество подряд идущих зубов при недостаточном объеме костной ткани и невозможности проведения операции по ее наращиванию, практикуется **базальная имплантация**. Данный вид имплантации не такой надежный, как предыдущий, поэтому его используют крайне редко, как временное решение для пациентов солидного возраста. Основными минусами данной процедуры являются:

- высокий процент осложнений, которых не возникает в случае неприживления винтовых имплантов. Это происходит ввиду особенности T-образной конструкции;

- из-за большого размера импланта при установке травмируется много ткани, что приводит к сложному и дискомфортному заживлению;

- конструкция может стать подвижной и попросту выпасть;

- неразборность базальных имплантов – причина подпиливания и «подгона» его размера прямо во рту у пациента.

Эндодонто-эндооссальная имплантация.

Метод **эндодонто-эндооссальной имплантации** считается устаревшим. Его применяли для того, чтобы укрепить подвижные зубы (в случае периодонтита, зубных переломов и т. п.), рассчитывая сохранить корень зуба. В этом случае имплантаты вводили в костное основание через зубной канал, без разреза десны. Но полуразрушенный корень часто становился источником воспалительного процесса и создавал новые проблемы.

Внутрислизистая имплантация.

Если пациенту по тем или иным причинам противопоказана эндооссальная имплантация, приходится использовать съемные протезы.

Внутрислизистая имплантация позволяет улучшить их фиксацию, особенно при атрофии альвеолярного отростка верхней челюсти или дефектах нёба. Толщина слизистой не должна быть меньше, чем 2,2 мм.

Внутрислизистые импланты состоят из двух частей: одну из них крепят на съемном протезе, а вторую устанавливают в слизистую оболочку рта. Импланты закрепляют в лункообразных углублениях десны, которые формируют специальным бором. На них надевают зубной протез, который в случае необходимости можно легко снять.

Имплантация – это наиболее передовой и эффективный метод восстановления полностью отсутствующих зубов.

Каковы прогнозы относительно спроса пациентов на имплантаты?

Эксперты единодушны в том, что спрос возрастет. Будет больше случаев установки одиночных имплантатов и несъемных конструкций с опорой на имплантаты, которые замещают небольшой участок зубного ряда.

В то же время большинство экспертов ожидают снижения спроса на несъемные конструкции с опорой на имплантаты у пациентов с полной адентией (отсутствием зубов) (однако консенсус по этому вопросу не достигнут). Это один из спорных моментов опроса: если эксперт согласен с тем, что спрос на имплантаты будет увеличиваться, тогда какова причина такого роста? Это связано только с тем, что лечение на имплантатах получит больше людей, или ожидается

увеличение процентного соотношения пациентов с имплантатами? Однако в целом опрошенные эксперты ожидают увеличение количества пациентов с имплантатами и уменьшение частоты случаев имплантации с одновременной аугментацией (наращиванием) костной ткани.

Ожидается ли изменение частоты таких состояний, как периимплантит (воспаление тканей вокруг импланта)?

Да, эксперты согласны с тем, что распространенность периимплантита скорее всего будет возрастать — так как в будущем количество установленных имплантатов будет увеличиваться, а также потому, что для развития периимплантита требуется время. Однако эксперты прогнозируют, что совершенствование материалов, из которых изготовлены имплантаты, и улучшение диагностических параметров помогут снизить частоту возникновения периимплантита.

Все больше стоматологов общего профиля начинают заниматься имплантацией, поэтому есть понимание, что особое внимание следует уделять постоянной профилактике осложнений. Сейчас этот подход больше практикуется в пародонтологии, чем в имплантологии, и в значительной степени это связано с качеством обучения специалистов. Есть ряд исследований, которые показывают взаимосвязь между улучшением качества подготовки докторов и уменьшением количества осложнений.

А что насчет распространенности цифровых протоколов в стоматологической практике?

Эксперты прогнозируют увеличение важности компьютерной томографии на этапах предоперационной диагностики и планирования лечения. Также ожидается, что появление биомаркеров и новых методик зондирования позволит лучше контролировать состояние тканей вокруг имплантатов. В целом мы установили, что опрошенные эксперты ожидают появления инноваций в области цифровых протоколов и технологий, однако это будет происходить параллельно с развитием более традиционных методик, например, зондирования.

Также эксперты прогнозируют, что цифровые технологии будут играть большую роль в том, что мы назвали "ортопедически ориентированная диагностика". Достигнута высокая согласованность в том, что этот метод заменит стандартные протоколы диагностики.

Большинство опрошенных ожидают, что будущее за протоколами имплантации по шаблонам. При этом в более сложных случаях хирургические шаблоны будут использоваться на всех этапах установки имплантата.

Список литературы

1. Современные проблемы биологической совместимости медицинских имплантатов / О. Н. Каныгина, А. Д. Стрекаловская, А. А. Бакаев, Н. Р. Хайбулин // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всероссийской научно-методической конференции, Оренбург, 31 января – 02 2018 года / Министерство образования и науки РФ, ФГБОУ ВО "Оренбургский государственный университет". – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2018. – С. 2470-2474.

2. Плоская, М. В. Биоматериалы, применяемые в хирургической стоматологии / М. В. Плоская // Студенческая наука: современные реалии : Сборник материалов III Международной студенческой научно-практической конференции, Чебоксары, 29 ноября 2017 года / Редколлегия: О.Н. Широков [и др.]. – Чебоксары: Общество с ограниченной ответственностью "Центр научного сотрудничества "Интерактив плюс", 2017. – С. 34-36/

3. Ильин, С. В. Перспективы использования дентальной имплантации в ведомственных медицинских учреждениях / С. В. Ильин, Г. А. Гребнев, В. Ю. Тегза // Состояние и перспективы развития современной науки по направлению «Биотехнические системы и технологии» : Сборник статей III Всероссийской научно-технической конференции, Анапа, 27–28 мая 2021 года. – Анапа: Федеральное государственное автономное учреждение "Военный инновационный технополис "ЭРА", 2021. – С. 220-223.

4. Загорский, В. А. Стоматологическая имплантация - современные материалы и виды имплантатов : Учебно-методическое пособие / В. А. Загорский. – Москва : Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет), 2021. – 62 с.

5. Фролов, А. А. Проблемы дентальной имплантации / А. А. Фролов // Научный Лидер. – 2021. – № 14(16). – С. 52-62.

РАЗРАБОТКА ЭЛЕКТРОННОГО УЧЕБНОГО ПОСОБИЯ «БЕСПРОВОДНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКЕ»

Бакаев А.А., Слатенкова А.С., Шелопаева Е.А.

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

Концепция развития образования Российской Федерации до 2025 года одной из приоритетных ставит задачу обеспечения инновационного характера базового образования, в том числе внедрения новых подходов к обучению, обеспечивающих наряду с его фундаментальностью и соблюдением Государственных образовательных стандартов развитие потребности в самообразовании на основе многовариантности содержания и организации образовательного процесса. Решение данной задачи видится в обеспечении компьютеризации и информатизации учебного процесса, в частности в формировании образовательных сред на базе информационно-коммуникационных технологий.

Для будущих специалистов в различных областях, связанных с информационными технологиями, остро встаёт вопрос о возможности более удобного доступа и поиска информации, а тот факт, что беспроводные телекоммуникационные технологии переживают в наше время этап бурного развития, определяет требуемое направление этой информации. Динамика процесса распространения беспроводных технологий такова, что количество их будет только возрастать, а ценность данных, передаваемой по ним будет увеличиваться вместе с количеством информации и сетей [1]. Именно эти причины стали решающими в выборе темы беспроводных технологий, как основы для создания электронного учебного пособия, главная цель которого заключается в оказании научно-методической и практической поддержки студентам в процессе образования. Подобная форма предоставления информации формирует высокую степень мотивации, в том числе рост интереса к процессу обучения, за счет чего повышается интенсивность обучения, приобретая тем самым черты индивидуализации путём увеличения процента самостоятельной работы [3].

Реализация образовательного процесса на основе применения электронного обучения признается на государственном уровне. Закон «Об образовании в Российской Федерации» от 29 декабря 2012 г. дает определение электронному обучению как организации образовательной деятельности с применением информационных технологий, технических средств, информационно-телекоммуникационных сетей, обеспечивающих передачу информации, взаимодействие обучающихся и педагогических работников [4].

В процессе подготовки студентов Оренбургского государственного университета по направлению 12.03.04 «Биотехнические системы и технологии» особое место в освоении программы занимает дисциплина «Информационные технологии в медицинской технике», один из основных разделов которой посвящен вопросу беспроводных технологий. Именно поэтому разработанное

электронное учебное пособие приобретает большую значимость для студентов данной специальности.

В учебном процессе высшего учебного заведения электронные учебные пособия выполняют множества функций, среди которых особое место занимает обеспечение рационального сочетания различных видов представления информации (аудио, видео, текст, анимации). В разработанном учебном пособии также была рассмотрена возможность внедрения гипертекстовых технологий и мультимедиа, что определило специфику использования смешанной модели обучения с учётом особенностей выбранной темы пособия.

При построении интерфейса электронного учебного пособия необходимо учитывать значимые аспекты теории дизайна. Прежде всего, это касается таких основных принципов как пропорция, порядок, акцент, единство и равновесие [2]. Принцип пропорции отражает соотношение между размерами объектов и их размещением в пространстве. Организация данных на экране должна предусматривать логическую связь и группировку в отдельные категории. Функциональные зоны должны разделяться при помощи пробелов и других средств: ширина, уровень яркости, цвет, разные типы строк и геометрическая форма. Для сокращения времени поиска табличные данные должны разделяться на блоки. Все перечисленные средства упорядочения графической информации были использованы авторами при проектировании. Интерфейс и графическое оформление разработанного учебного пособия показаны на рисунке 1.

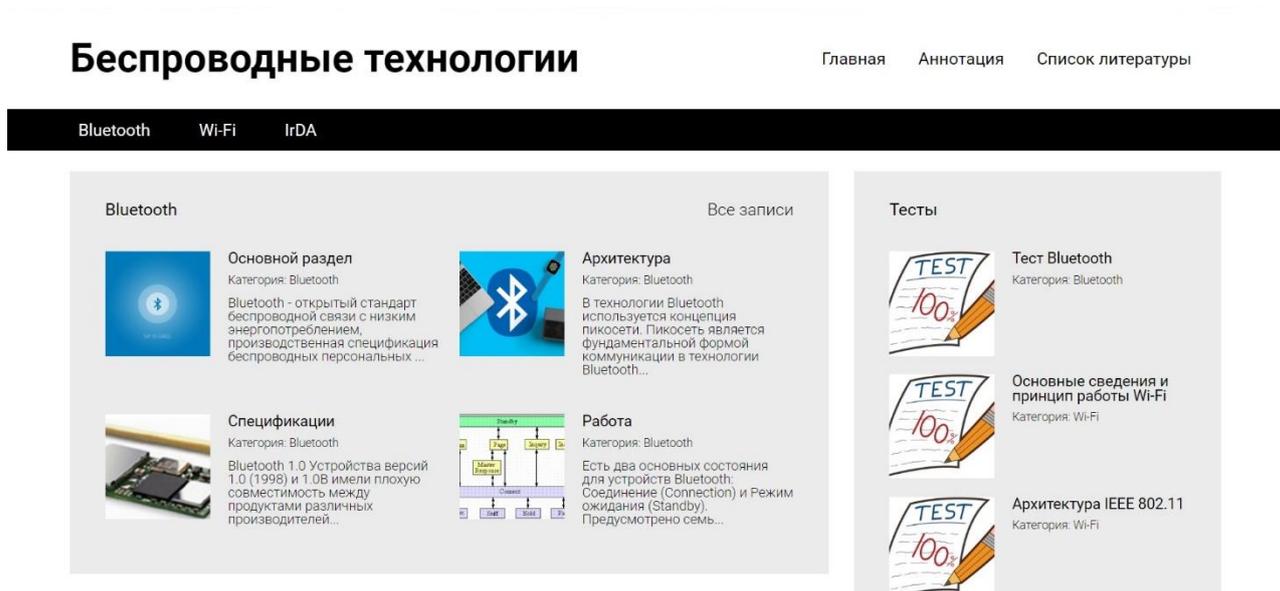


Рисунок 1 – Интерфейс электронного учебного пособия

При использовании электронного учебного пособия для самостоятельной работы необходимо особенное внимание уделить системе контроля знаний, в данном случае самоконтролю знаний. В разработанном электронном учебном пособии самоконтроль знаний был реализован посредством тестирования студентов.

Пример тестовых вопросов приведён на рисунке 2.

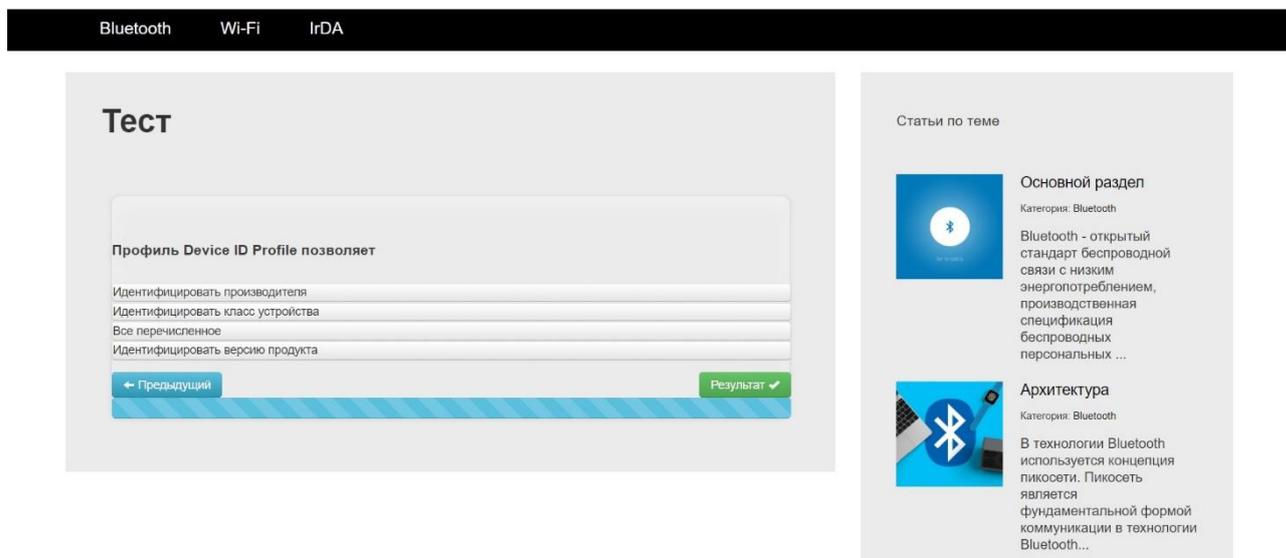


Рисунок 2 – Блок тестовых вопросов

Удобство подобного тестирования заключается в его размещении после каждого раздела теоретического материала, что способствует определению уровня и качества полученных знаний без затрат времени. После прохождения тестирования и определения результатов выявляются ошибки учащихся, которые он может устранить путем повторения, изучения и закрепления в ходе работы с теоретическим материалом учебного пособия.

Таким образом, разработанное электронное учебное пособие отвечает всем требованиям открытой информационной системы, имеющей средства как представления, так и поиска информации. Такими требованиями являются доступность, наглядность, систематичность и последовательность обучения, проверка усвоения знаний, обеспечение интерактивности, целостности, а также структурно-функциональной связанности.

Список литературы

1. Клименко, Ю. А. О применении беспроводных технологий в инженерных системах автоматизации / Ю. А. Клименко, А. П. Преображенский // Вестник Воронежского института высоких технологий. – 2020. – № 3(34). – С. 19-21.;
2. И.А. Розенсон. Основы теории дизайна: Учебник для вузов. Стандарт третьего поколения / И.А. Розенсон.. - СПб.: Питер, 2013. - 89 с..
3. М.Н. Крылова. Способы мотивации учебной деятельности студентов ВУЗа // Перспективы Науки и Образования № 3 - 2013 г. – 4 с.
4. Федеральный закон "Об образовании в Российской Федерации" от 29.12.2012 N 273-ФЗ.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ ТЕХНИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ МЕДИЦИНСКОЙ ТЕХНИКИ НА ТЕРРИТОРИИ ОРЕНБУРГСКОЙ ОБЛАСТИ

Бакаев А.А.,

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

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

Техническое обслуживание медицинской техники — мера, необходимая для поддержания рабочего состояния и эффективности работы оборудования при его регулярной эксплуатации. Эффективность медицинского оборудования является одной из важнейших составляющих, определяющих, наряду с профессионализмом медицинского персонала, качество медицинских услуг, оказываемых населению.

В настоящее время на территории Оренбургской области существует проблема, связанная с отсутствием общих требований к эксплуатации и техническому обслуживанию медицинского оборудования, что является недопустимым, поскольку от обеспечения единой технической политики в области здравоохранения напрямую зависит качество оказания медицинской помощи населению.

На данный момент регламент работ по техническому обслуживанию медицинской техники определяется следующими национальными стандартами:

- 1) ГОСТ 56606-2015 Контроль технического состояния и функционирования медицинских изделий [1];
- 2) ГОСТ 18322-2016 Система технического обслуживания и ремонта техники [2];
- 3) ГОСТ 57501-2017 Техническое обслуживание медицинских изделий. Требования для государственных закупок [3];
- 4) ГОСТ 58451—2019 Изделия медицинские. Обслуживание техническое. Основные положения [4].

Однако, в соответствии с действующим Федеральным законом «О техническом регулировании» [5], все ГОСТы носят лишь рекомендательный характер и лицензированные организации по техническому обслуживанию медицинской техники нередко пренебрегают данными стандартами, подвергая риску жизнь и здоровье людей. Даже самое новое оборудование, которое может эффективно работать еще несколько лет, выходит из строя из-за халатности и нарушений в порядке оказания технического обслуживания. Регион терпит колоссальные убытки, страдает как экономическая, так и социальная сфера жизни. Всего этого можно было бы избежать, действуя на территории нашей области положение о порядке технического обслуживания медицинской техники. Сотрудники кафедры медико-биологической техники считают необходимым разработку единого регламента работ по техническому обслуживанию медицинской техники.

Техническое обслуживание медицинской техники определяется как комплекс регламентированных нормативной и эксплуатационной документацией

мероприятий и операций по поддержанию и восстановлению исправности и работоспособности медицинской техники при ее использовании по назначению, а также при хранении и транспортировке.

Определены следующие виды технического обслуживания:

- 1) ввод в эксплуатацию;
- 2) контроль технического состояния;
- 3) периодическое и текущее техническое обслуживание;
- 4) текущий ремонт.

Ввод в эксплуатацию медицинского оборудования проводят по окончании монтажных и пусконаладочных работ и включает в себя следующие мероприятия:

- 1) контрольные технические испытания для оценки работоспособности изделия;
- 2) сравнение полученных результатов с требованиями, установленными в эксплуатационной документации;
- 3) оформление протокола;
- 4) обучение медицинского персонала правилам технической эксплуатации изделия с оформлением соответствующей записи в акте выполненных работ;
- 5) оформление акта выполненных работ в соответствии с порядком, предусмотренным для данного вида медицинской техники.

Контроль технического состояния (КТС) медицинской техники проводится медицинским персоналом, либо лицензированными на данный вид работ организациями перед использованием оборудования для проверки соответствия значений параметров и характеристик изделий медицинской техники заявленным в документации. КТС включает в себя:

- 1) внешний осмотр рабочего места и изделия;
- 2) проверку соблюдения мер безопасности при подготовке изделия к работе (целостность сетевых шнуров и приборных вилок, соединительных проводов аппаратов, наличие экранов, ограждений, защитных устройств);
- 3) проверку заправки изделия расходными материалами;
- 4) проверку готовности изделия к использованию (своевременность проверки средств измерений, проверка исходных положений органов управления);
- 5) включение и проверку работоспособности изделия, его составных частей и устройств, органов сигнализации и блокировок.

Техническое обслуживание производится при рабочем состоянии медицинской техники и позволяет увеличить сроки эксплуатации, использовать оборудования с максимальной эффективностью, снизить вероятность отказа. Техническое обслуживание медицинской техники включает в себя действия по поддержанию и восстановлению исправности и работоспособности медицинской техники для ее использования по назначению. В таблице 1 приведен пример временного регламента некоторых работ по техническому обслуживанию сосудов, работающих под давлением.

Таблица 1 – Временной регламент работ по техническому обслуживанию сосудов, работающих под давлением

	Мероприятия
Ежедневно	- проверка комплектности и целостности оборудования; - проверка обеспечения постоянной круглосуточной подачи медицинских газов; - проверка технического состояния контура защиты; - контроль герметичности систем, концентрации кислорода в рабочей зоне.
Еженедельно	- уборка складов кислородных баллонов и подъездных путей к ним; - проверка наличия и состояния противопожарных средств, светильников, комплекта инструментов и принадлежностей ЗИП.
Ежемесячно	- проверка состояния предохранительных клапанов.
Один раз в 6 месяцев	- проверка контрольно-измерительных приборов образцовым прибором.
Один раз в 12 месяцев	- замер омического сопротивления контура заземления. - поверка контрольно-измерительных приборов; - проведение испытаний на герметичность коммуникации системы снабжения медицинскими газами.
Один раз в 8 лет	- проведение испытаний на плотность и прочность системы высокого давления коммуникаций.
Один раз в 10 лет	- полная ревизия запорно-регулирующей арматуры, предохранительных и обратных клапанов.

Таким образом, разработка единого положения о техническом обслуживании медицинской техники будет затрагивать все аспекты деятельности по поддержанию исправного и работоспособного состояния медицинского оборудования.

Список литературы

1. ГОСТ Р 56606-2015 Национальный стандарт Российской Федерации. Контроль технического состояния и функционирования медицинских изделий. Основные положения;

2. ГОСТР 18322-2016 Национальный стандарт Российской Федерации. Система технического обслуживания и ремонта техники;

3. ГОСТР 57501-2017 Национальный стандарт Российской Федерации. Техническое обслуживание медицинских изделий. Требования для государственных закупок;

4. ГОСТР58451-2019 Национальный стандарт Российской Федерации. Изделия медицинские. Обслуживание техническое. Основные положения;

5. Федеральный закон «О техническом регулировании» от 27.12.2002 № 181-ФЗ.

ИСТОРИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ РАЗВИТИЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ДИСЦИПЛИНАМ ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОГО ЦИКЛА

Белокопытова О.Г., канд. пед. наук

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

На всех этапах истории человечество создавало обобщающие взгляды на мир и человека, на свою жизнедеятельность, выдвигало идеалы, формировало представления о будущем, служившие ориентирами в его жизни.

В современной науке ведущее место принадлежит физике, химии, биологии поскольку они являются основой технического прогресса. Ядерная энергетика, ракетная и полупроводниковая техника, квантовые генераторы света, открытие генетического кода – результат достижений науки. От успешного развития отдельных направлений науки зависит развитие многих взаимосвязанных отраслей.

Исторически сформировались различные подходы к процессу исследовательской деятельности в образовательных учреждениях. Рассмотрим некоторые из них.

Научно-исследовательская деятельность обучающихся – выполняемые под руководством преподавателя исследования в различных областях. Результаты этих исследований предоставляются в виде докладов на научных конференциях (Аннушкин Ю.В.).

Исследовательская деятельность учащихся — это эффективная образовательная технология, отвечающая задачам развития творческих способностей, социализации, профессионализации, развития социальной мобильности молодого поколения (Обухов А.С.).

Исследовательская деятельность есть деятельность, характеризующаяся направленностью на получение нового знания. Она служит способом активного поиска, построения знаний, формирования нового опыта (Поддъяков А.Н.).

Учебно-исследовательская деятельность – инструмент повышения качества образования (Савенков А.И.).

Учебно-исследовательская деятельность — это процесс решения поставленной проблемы на основе самостоятельного поиска теоретических знаний; предвиденье и прогнозирование как результатов решения, так и способов и процессов деятельности (Далингер В.А.).

Таким образом, одно из отличий учебно-исследовательской деятельности от научно-исследовательской заключается в составе субъектов деятельности. В науке субъектом выступает ученый, индивид, а в образовании — учащийся под руководством педагога.

Исследовательская деятельность в наибольшей мере востребует субъектность абитуриента или студента в образовательном процессе, гарантирует непрерывность образования, профессионального и личностного саморазвития.

О привлечении к научно-исследовательской работе своих учеников и студентов говорил русский физик П.Н. Лебедев. Он лелеял мечту о большой научной школе русских физиков, об организации коллективного исследования. В одном из своих публичных выступлений Лебедев писал:

«Что может собственных Платонов
И быстрых разумом Ньютонов
Российская земля рожать».

Создать отечественную школу, в которой можно было бы воспитывать высококвалифицированных специалистов в различных областях физики – к этому страстно стремился П.Н. Лебедев [3, С. 71-72].

Мы, педагоги, должны постоянно совершенствоваться в своей профессиональной деятельности и в этом смысле, обязательно нужно обращаться к опыту прошлого... Так, например, всем известны достижения С.И. Вавилова в различных областях физической оптики. Он также обладал ярким талантом ученого-организатора. Глубокие разносторонние знания, любовь и преданность науке, чуткое, доброжелательное отношение к людям и личное обаяние неизменно влекли к нему молодежь. И где бы он ни начинал работать, вскоре вокруг него сколачивался дружный молодой коллектив, который с увлечением трудился над разрешением проблем.

Своим ученикам Вавилов предоставлял большую самостоятельность. На первых стадиях исследования он часто подвергал критике их замыслы. Однако если видел, что молодой человек убежден в своей правоте, он никогда не давил на него своим авторитетом и давал возможность проверить свои соображения на опыте. Более того, Сергей Иванович бывал очень не доволен, если его ученик не проявляет собственной инициативы, а слепо следует его советам.

Несмотря на свою огромную занятость он никогда не торопился, по долгу, очень внимательно и обстоятельно беседовал с учениками и сотрудниками, щедро делился своим богатейшим опытом, идеями, охотно давал советы [5, С. 95-97].

С.И.Вавилов был убежден в том, что молодые сотрудники все исследования и подготовку к ним должны проводить своими руками, без лаборантской помощи. Он считал, что каждый должен очень многому научиться сам, прежде чем начинать руководить работой других [5, С. 98].

Вообще, нужно сказать, что какими бы не были формы и методы работы с учениками, успех образовательного процесса зависит от взаимопонимания преподавателя и его студентов. В этом смысле нельзя не вспомнить педагогическую и научно-исследовательскую деятельность великого физика – Мари Кюри. «Ее безграничная преданность науке, простота ее взаимоотношений с учениками и сотрудниками, дружеские дискуссии, неожиданно вспыхивавшие то тут, то там во всех уголках Института и продолжавшиеся подчас довольно долго благодаря участию Мари Кюри, которая усаживалась во время спора где-нибудь на ступеньке лестницы, создавали в лабораториях Института редкую по качеству атмосферу - одновременно возвышенную и дружески-семейную. Это была та атмосфера, которая благоприятствует научным открытиям» - об этом неоднократно напоминал ее последователь, ученик, зять Фредерик Жолио [4, С. 81].

А вот, что пишет профессор математической физики в Сорбонне Тоннла, которая слушала лекции Мари Кюри: «Нет сомнений, Мари Кюри многому научила меня... И сейчас у меня, у всех нас осталось от этого курса главное – воспоминание о педагоге, научившем нас всех понимать истинные ценности, педагоге, который останавливался только на данных, действительно игравших существенную роль, и давал точные, неприкрашенные ответы... Мари Кюри учила нас простоте, искренности» [4, С. 83].

Повышение статуса вузовской науки, особенностью которой следует считать широкое и эффективное участие студентов в научном творчестве, является непременным условием обеспечения высокого качества подготовки специалистов и непрерывного обновления содержания профессионального образования. Необходима организация целостного научно-образовательного процесса в университете путем использования современных педагогических технологий, где основным требованием должен быть принцип: «Обучать исследуя, исследовать обучая!».

Грамотное использование исследовательской деятельности студентов в образовательном процессе помогает самоопределению студентов в профессии, установлению их взаимопонимания с коллегами по работе, нахождению своего профессионального стиля, повышает интерес к теории и осознанность в профессиональной подготовке [1, С. 100].

Академик Г.С. Ландсберг указывал, что «преподавание не может быть, конечно, исчерпывающим, однако его необходимо строить таким образом, чтобы в дальнейшем учащийся мог и должен был бы доучиваться, но никогда не был бы вынужден переучиваться» [6, С. 16].

Таким образом, учебно-исследовательская деятельность — это активный сознательный и творческий процесс получения учащимся нового для него знания об окружающем мире путем применения научного метода под руководством педагога, в результате которого происходит формирование личностных структур, в том числе, научного мышления, научного мировоззрения и опыта исследовательской деятельности [2, С. 16].

Список литературы

1. Борытко, Н.М. Система профессионального воспитания в вузе: учеб.-метод. пособие / Н.М. Борытко ; под ред. Н.К. Сергеева. – М. : АПКИППРО, 2005. – 120 с.
2. Галишева, М.С. Стратегия образования / М.С.Галишева, П.В.Зуев // Педагогическое образование в России. – 2019. - №6. – С. 6-18.
3. Дуков, В.М. П.Н.Лебедев / В.М. Дуков. – издание второе – М. : УЧПЕДГИЗ., 1956. – 120 с.
4. Коттон, Э. Семья Кюри и радиоактивность / Э. Коттон ; пер. с франц. Н.Е. Горфинкель и А.Н. Соколова. – М. : АТОМИЗДАТ, 1964. – 176 с.

5. Левшин, Л.В. Сергей Иванович Вавилов / Л.В. Левшин. - М. : «Промсвещение», 1970. – 158 с.

6. Элементарный учебник физики / Под ред. акад. Г.С. Ландсберга. - В 3-х т. Т.3. - М. : Наука, 1971. – 639 с.

МИКРОБНЫЕ БИОПЛЕНКИ

Гиндер М.В.

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

Биопленки были впервые описаны Antoni van Leeuwenhoek, теория, описывающая процесс образования биопленки, не была разработана до 1978 года. В настоящее время есть понимание, что биопленки универсальны, встречаются в водных и промышленных системах, а также в большом количестве сред и медицинских устройств. Используя такие инструменты, как сканирующий электронный микроскоп и, в последнее время, конфокальный лазерный сканирующий микроскоп, исследователи понимают, что биопленки представляют собой не бесструктурные однородные отложения клеток и скопившейся слизи, а сложные сообщества связанных с поверхностью клеток, заключенных в полимерную матрицу. Современные исследования показали, что фенотип биопленки может быть описан с точки зрения генов, экспрессируемых клетками, ассоциированными с биопленкой. Отслоение клеток или клеточных агрегатов, продукция эндотоксина, повышенная резистентность к иммунной системе хозяина и обеспечение ниши для образования резистентных организмов - все это биопленочные процессы, которые могут инициировать патологический процесс. Эффективные стратегии предотвращения или контроля биопленок на медицинских устройствах должны учитывать уникальный и стойкий характер биопленок. Биопленки представляют собой бактериальные сообщества, заключенные во внеклеточный матрикс полисахаридов, продуцируемых бактериями, которые прилипают к живой или инертной макроповерхности. В природе биопленки представляют собой защищенный способ роста, позволяющий бактериям выживать в агрессивной среде. Исследования изолятов из окружающей среды выявили высокоупорядоченную трехмерную организацию внеклеточного матрикса, что имеет важное значение для физиологии биопленок.

Длительно микроорганизмы рассматривались как одноклеточные формы жизни, но с развитием методов микроскопии и молекулярно-генетических методов стало возможным выявление огромного разнообразия микробных обитателей природных ниш, подтвердившее, что большинство бактериальных микроорганизмов существуют в этих условиях не в планктонном состоянии, а в виде – биологических пленок. Биопленки – это естественный способ защиты микробных сообществ от воздействия внешних физикохимических факторов: антибиотиков, ультрафиолетового облучения, механического воздействия [1]. Биопленки – конгломерат микроорганизмов, расположенных на какой-либо поверхности, клетки которых прикреплены друг к другу. Обычно клетки погружены в выделяемое ими внеклеточное полимерное вещество (внеклеточный матрикс) – слизь. Развитие биоплёнки, а иногда и саму биоплёнку также называют биообращением. В современной науке признано, что в естественной среде более чем 98 % всех бактерий существуют в виде биопленок. Вероятнее всего, это связано

с тем, что прикрепленные к поверхности бактерии находятся в более благоприятной среде с позиции защиты от внешних факторов среды. Известно, что бактерии в биопленках до тысячи раз более устойчивы к антибактериальным препаратам и факторам иммунной защиты хозяина по сравнению с планктонными клетками. В настоящее время биологические пленки могут быть определены как сообщества бактерий, которые необратимо прикреплены к поверхностям и заключены в межклеточный полимерный матрикс, который включает в себя полисахариды, белки, нуклеиновые кислоты и другие соединения. Биопленки представляют собой структурированные группы различных видов бактерий, ответственных за большинство хронических и рецидивирующих инфекций.

Образование биопленки представляет собой защищенный способ роста, который делает бактериальные клетки менее восприимчивыми к противомикробным препаратам и к гибели с помощью иммунных эффекторных механизмов хозяина и, таким образом, позволяет патогенам выживать во враждебной среде, а также рассеивать и колонизировать новые ниши. Экспрессия генов в клетках биопленок отличается от экспрессии на планктонной стадии, и эти дифференциально экспрессируемые гены регулируют образование и развитие биопленок. Рост биопленки связан с повышенным уровнем мутаций, а также с механизмами, регулируемым определением кворума. Обычные механизмы резистентности, такие как хромосомная бета-лактамаза, усиленные насосы оттока и мутации молекул-мишеней антибиотиков в бактериях, также способствуют выживанию биопленок. Формирование биопленки определяется не только характером поверхности прикрепления, но и особенностями бактериальной клетки и факторами окружающей среды. Первоначально бактериальные клетки приближаются к поверхности настолько близко, что их подвижность снижается, и возникают кратковременные контакты с поверхностью. В этот период первичная адгезия микроорганизмов в значительной степени определяется физико-химическими свойствами поверхностей как бактериальных клеток, так и атакуемого материала. Главные действующие силы на этом этапе Ван-дер-Ваальса, уровень гидрофобности клеточной поверхности, заряд сорбирующихся клеток, гидрофобность, химический состав и шероховатость поверхности атакуемого материала. По завершению этапа первичной адгезии к поверхности материала в иммобилизованных бактериях активируются процессы деления с формированием микроколоний, создающих многослойные клеточные кластеры. В этом процессе принимают участие межклеточные адгезины и синтезируемые внеклеточные полимерные матричные молекулы. С увеличением бактериальной популяции клетки начинают продуцировать химические сигналы, с помощью которых, через системы «quorum sensing» контактируют с другими бактериальными клетками. Непрерывный рост прикрепленных микроорганизмов приводит к образованию бактериальных агрегатов, погруженных в экзополимерный матрикс, характерный для зрелых биопленок. Под воздействием сильных гидродинамических и механических усилий, а так же регуляции по механизму «quorum sensing» зрелые биопленки могут вступать в процесс диссеминации с высвобождением в окружающее пространство отдельных клеток. Отделившиеся фрагменты могут

колонизировать другой район субстрата с образованием новых микроколоний или диссеминировать в пространстве и формировать очаги образования биопленок на отдаленных от локализации первоначальной пленки субстратах.

Исходя из современных данных, зрелые биопленки представляют собой высокогетерогенное организованное сообщество, структура которого представляет микроколонии бактериальных клеток, заключенные в разделенный водными каналами внеклеточный полимерный матрикс. В зависимости от свойств поверхности, доступности питательных веществ, состава и уровня гетерогенности микробного сообщества и гидродинамики структура биопленок может колебаться от модели плотной биопленки до рыхлой мозаичной модели, структура которой представляет собой сложную организацию, включающую грибоподобные агрегаты, разделенные водными пространствами. Принято считать, что вода является главным компонентом матрикса биопленки, на долю которого приходится до 97%. Тогда как содержание бактерий составляет 10–50% от общего объема биопленки. Количество внеклеточных полимерных веществ колеблется в пределах 50–90% от общего количества органического углерода в биопленках. Водные каналы, которые отделяют погруженные в матрикс микроколонии, необходимы для поддержания жизнеспособности биопленки, так как они, представляя собой по сути сосуды, доставляют питательные вещества глубоко внутрь сложных сообществ, позволяя обмениваться продуктами метаболизма в слоях жидкостей. В биопленках клетки обмениваются информацией с помощью сигналов, так называемой системы «quorum sensing», которые являются молекулами особых соединений, способными регулировать экспрессию генов, чувствительных к плотности клеток. Сигнальные молекулы «quorum sensing» грамположительных бактерий чаще всего являются пептидами, сравнимыми с феромонами и гормонами, которые управляют клеточным делением, и, кроме того, уровнем плотности популяции биопленки, а так же продукцией экзополимерного матрикса. Недавние генетические и молекулярные подходы, используемые для изучения бактериальных и грибковых биопленок, выявили гены и регуляторные цепи, важные для начальных взаимодействий клетки с поверхностью, созревания биопленки и возвращения микроорганизмов биопленки к планктонному способу роста. На сегодняшний день исследования показывают, что переход планктона в биопленку является сложным и строго регулируемым процессом.

Бактериальная адгезия к поверхности медицинских приборов рассматривается как основной механизм возникновения внутрибольничных инфекций. Микроорганизмы в составе биопленок обладают более высокой устойчивостью к лекарственным препаратам. В связи с этим поиск способов управления формированием и разрушением биопленок является актуальной междисциплинарной научной проблемой [3]. Повышение устойчивости бактерий в биопленках к внешним факторам является результатом высокой фильтрующей способностью биопленок, а также увеличения числа фенотипических изменений, которые обеспечивают резистентность бактериальных клеток в среде биопленки, и индукции инактивирующих антибактериальные препараты ферментов. По литературным данным выявлено, что в течение последних 15-20 лет у 8–15 % пациентов,

помещенных в стационарные отделения, развиваются внутрибольничные инфекции. В целом, 60-70 % всех нозокомиальных инфекций являются следствием развития биопленок. Одним из перспективных новых методов противомикробных стратегий 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 [2]. В статье [3] рассматривается действие слабого постоянного магнитного поля 2-10 мТл в стимуляции биоплёнокообразования, что связано с участием магнитных ядер во внутриклеточных ферментативных процессах. При увеличении магнитного поля до 80 мТл способность формировать биоплёнки снижается. Биопленки можно предотвратить ранней агрессивной антибиотикопрофилактикой или терапией, а лечить их можно длительной супрессивной терапией. Многообещающей стратегией может быть использование ферментов, способных растворять матрикс биопленки (например, ДНКазы и альгинатлиазы), а также ингибиторов чувства кворума, повышающих восприимчивость биопленки к антибиотикам.

Резюмируя, можно выделить несколько стадий образования биопленок. Первоначально происходит первичная адгезия микроорганизмов к поверхности из окружающей среды, эта стадия обратима. Далее происходит фиксация, при которой микроорганизмы выделяют внеклеточные полимеры, обеспечивающие прочную адгезию. После наступает стадия созревания, при которой, клетки, прикрепившиеся к поверхности, облегчают прикрепление последующих клеток, внеклеточный матрикс удерживает вместе всю колонию, накапливаются питательные вещества, клетки начинают делиться. Следующий этап образования биопленки – рост. Образована зрелая биопленка, и теперь она изменяет свой размер и форму. Внеклеточный матрикс служит защитой клеток от внешних угроз. Заключительная стадия – дисперсия. В результате деления периодически от биопленки отрываются отдельные клетки, способные через некоторое время прикрепиться к поверхности и образовать новую колонию.

Формирование биопленки - это совместное групповое поведение, в котором участвуют популяции бактерий, живущие в самопродуцируемом внеклеточном матриксе. В формировании и функционировании всей микробиоты нашей планеты, определяет возрастающий интерес исследователей к процессам образования, персистенции и распространения бактериальных биопленок. Характерной особенностью возбудителей этого вида патологических состояний является их высокая устойчивость к широко используемым в практике химическим и антибактериальным препаратам. Поскольку использование обычных противомикробных соединений во многих случаях не может уничтожить биопленки, существует острая необходимость в разработке альтернативных мер для борьбы с биопленочными инфекциями. Понимание развития биопленок может помочь в разработке новых стратегий борьбы с биопленками, особенно в контроле и лечении биопленок, связанных с хроническими заболеваниями. Таким образом, биопленки представляют собой микробные сидячие сообщества,

характеризующиеся клетками, которые прикреплены к субстрату или поверхности раздела или друг к другу, встроены в самопродуцируемый матрикс внеклеточных полимерных веществ и демонстрируют измененный фенотип по сравнению с планктонными клетками.

Список литературы

1. Bandaraa H.M., Magnetic fields suppress *Pseudomonas aeruginosa* biofilms and enhance ciprofloxacin activity / H.M. Bandaraa, H.N., Nguyena D., Mogaralaa S., Osińskib M., H.D.C. Smyth // *Biofouling*, 2015, no. 31(5), pp. 443– 457.
2. 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.
3. Тихонова, Т. А. Влияние магнитного поля на образование биоплёнок бактериями *E. coli* / Т. А. Тихонова, У. Г. Летута, В. Л. Бердинский // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : Материалы Всероссийской научно-методической конференции (с международным участием), Оренбург, 23–25 января 2020 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2020. – С. 2316-2318.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ

Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Дорофеев Д.В., Цюрко Д.Е.

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

Информация о процессах с участием высоких электронно-возбужденных состояний (ЭВС) молекул востребована в оптоэлектронике, при разработке люминесцентных датчиков и сенсоров, в оптической записи информации, проектировании лазеров на органических соединениях, в современных биомедицинских технологиях. В [1-2] показано, что энергообмен в ходе релаксации высоких ЭВС молекул-сенситизаторов в бактериальных средах может инициировать инактивацию микроорганизмов. При этом степень повреждения бактерий зависит от конкретного канала дезактивации возбужденных состояний. Поэтому актуальна задача оценки эффективности конкурирующих релаксационных процессов с участием высоких ЭВС молекул. В настоящей работе представлена экспериментальная установка для исследования релаксации высоких триплетных ЭВС молекул красителей в различных средах, и результаты исследования обратных интеркомбинационных переходов из высоких триплетных T_m состояний.

Основу установки составляют два твердотельных моноимпульсных лазера на $YAG:Nd^{3+}$ и жидкостный лазер на красителях. Твердотельный лазер на $YAG:Nd^{3+}$ марки LQ-129, работающий в режиме модулированной добротности, с удвоением основной частоты генерации, использовался для возбуждения исследуемых молекул в длинноволновой $S_0 \rightarrow S_1$ полосе поглощения. Параметры возбуждающего импульса: длительность $\tau_{имп} = 15$ нс, энергия на длине волны генерации $\lambda_2 = 532$ нм до 50 мДж.

Излучение удвоенной частоты $\lambda_2 = 532$ нм второго неодимового лазера (LQ-215-20, $\tau_{имп} = 10$ нс), с регулируемой задержкой (обычно 3-5 мкс) после окончания импульса первого лазера, использовалось для накачки жидкостного лазера на красителях. Использовался спектральный диапазон генерации лазера на красителях 580-610 нм с шагом перестройки 2 нм. Это излучение обеспечивало заселение высоких триплетных уровней молекул в результате $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения. Перед попаданием на исследуемый образец излучение обоих лазеров фокусировалась в пятно диаметром 1,2 - 2 мм.

Для синхронизации включения лазеров, регулирования временной задержки между импульсами, запуска системы регистрации и обработки исследуемых сигналов, разработан многоканальный программируемый генератор импульсов. Для создания генератора был выбран микроконтроллер STM32F427 (ST Microelectronics), работающий на частоте 168 МГц, обеспечивающий синхронизацию временных интервалов и требуемую точность воспроизведения импульсов относительно друг друга. Дискретность отсчетов импульсов всех каналов

составляет 1 мкс, кроме канала ФЭУ, на котором введена дополнительная подстройка задержки с разрешением ~ 10 нс. Генератор формирует импульсы по приходу синхросигнала от крейта КАМАК, который, в свою очередь, управляется программой-формирователем. Устройство содержит в своем составе 10 выходных каналов и один канал внешнего запуска. Канал внешнего запуска используется для начала отсчета времени генерации импульсов на остальных каналах. Четыре канала используются для управления двумя лазерными установками, один канал для запираания ФЭУ и один канал для запуска АЦП. Еще два канала резервные.

Объектами исследования служили молекулы органических красителей, имеющие большой квантовый выход в триплетное состояние (ксантеновые красители), используемые в качестве сенсбилизаторов в фотодинамических процессах. Сведения о релаксации высоковозбужденных состояний молекул получали, исследуя особенности кинетики длительной люминесценции и наведенного поглощения молекул при двухквантовом ступенчатом возбуждении. Детально экспериментальная установка для регистрации кинетики люминесценции и наведенного поглощения описана в [1-2].

Релаксация триплетных T_m состояний молекул происходит по одному из следующих каналов:

- безызлучательная внутренняя конверсия или излучение (флуоресценция $T_m \rightarrow T_1$);
- обратная интеркомбинационная триплет-синглетная конверсия;
- фотохимическая реакция;
- перенос энергии на молекулы окружения.

Если все переведенные в T_m состояния молекулы возвращаются на исходный T_1 уровень путем $T_m \rightarrow T_1$ конверсии, то по окончании импульса лазера на красителях никаких изменений в кинетике затухания длительной люминесценции или наведенного поглощения не произойдет. Если же имеют место обратная $T_m \rightarrow S_1$ интеркомбинационная конверсия (ИКК), фотохимические реакции или перенос энергии на окружение, то по окончании импульса лазера на красителях концентрация молекул в T_1 состоянии уменьшается и в кинетической кривой наведенного поглощения (или длительной люминесценции) следует ожидать скачкообразное уменьшение интенсивности сигнала.

На рис. 1 представлена кинетическая кривая наведенного $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения эритрозина в воде. Для удаления кислорода раствор предварительно продувался газообразным азотом в течение 10 мин. После окончания импульса первого лазера (на шкале времени 4 мкс) наблюдается резкое уменьшение (нижняя кривая) пропускания раствором зондирующего луча гелий-неонового лазера (632 нм). Это происходит потому, что после $S_0 \rightarrow S_1$ возбуждения и последующей $S_1 \rightarrow T_1$ ИКК образуются триплетные состояния молекул эритрозина, которые поглощают излучение длины волны 632 нм. По мере уменьшения концентрации T_1 молекул интенсивность наведенного поглощения уменьшается, плавно приближаясь к «нулевой» линии. Время жизни T_1 состояний эритрозина в отсутствие кислорода составляет около 700 мкс.

Если на раствор подействовать только излучением лазера на красителях (592 нм), то никаких изменений пропускания зондирующего излучения не наблюдается (верхняя кривая на рис. 1). Узкий пик на кривой (на шкале времени 7 мкс) указывает положение импульса лазера на красителях. Излучение длины волны 592 нм не попадает в полосу поглощения $S_0 \rightarrow S_1$ поэтому триплетные T_1 состояния молекул не образуются.

При последовательном возбуждении образца двумя квантами, в плавной кинетической кривой затухания наведенного поглощения, после окончания импульса лазера на красителях (задержка между импульсами 3 мкс), появляется характерная ступень (средняя кривая на рис. 1). Оптическая плотность $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения уменьшается на величину ΔD . Анализ экспериментальных данных о возможном вкладе триплет-триплетного переноса энергии с высоких T_m уровней молекул и необратимых фотохимических реакций в возникновение ΔD показал, что перечисленные процессы несущественны.

Отсутствие необратимых фотохимических превращений и безызлучательного переноса энергии в данном растворе, позволило связать уменьшение концентрации молекул красителей в триплетном состоянии с эффективной $T_m \rightarrow S_1$ ИКК.

Выражение для ΔD имеет вид:

$$\Delta D = \sigma_T I_2 (1 - \varphi_{T_m T_1}) \frac{1}{K_{S_1 T_1}} D_1,$$

где $k_{T_1 T_m} = \sigma_T I_2$ – скорость $T_1 \rightarrow T_m$ переходов, σ_T – сечение $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения, I_2 – интенсивность излучения лазера на красителях, $\varphi_{T_m T_1}$ – эффективность внутренней конверсии, $K_{S_1 T_1}$ – скорость $S_1 \rightarrow T_1$ ИКК, D_1 – оптическая плотность поглощения до включения лазера на красителях.

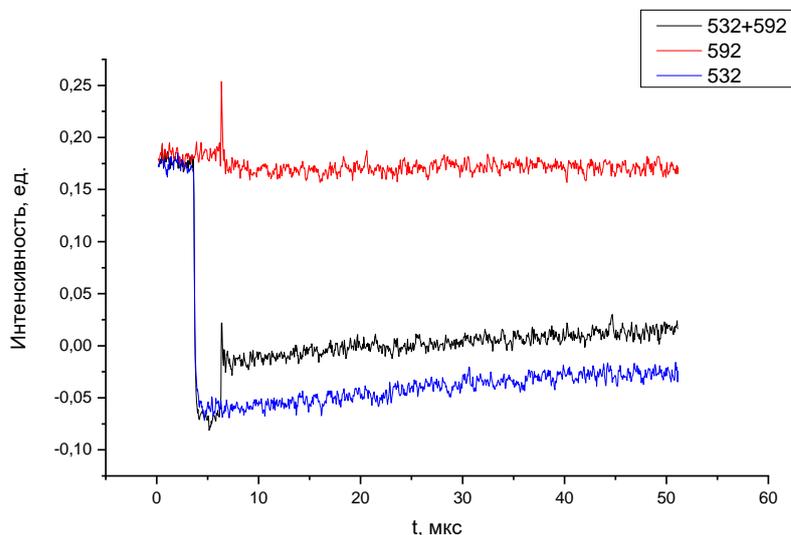


Рисунок 1 – Кинетические кривые затухания наведенного поглощения эритрозина в воде при одно- и двухквантовом возбуждении

Представленная установка даёт возможность дискретно управлять моментами времени генерации лазеров в любой последовательности. Учитывая, что

лазер LQ-129 наряду с основной частотой (1064 нм) снабжен генераторами 2-ой (532 нм), 3-ей (354 нм) и 4-ой (266 нм) гармоник, а лазер на красителях перекрывает спектральный диапазон 540-650 нм, представляется возможным ступенчатое двухквантовое возбуждение молекул различных органических соединений и исследование свойств их высоковозбужденных состояний.

Список литературы

1. Летута С.Н., Пашкевич С.Н., Ишемгулов А.Т., Никиян А.Н. Фототермическая инактивация микроорганизмов при релаксации высоковозбужденных состояний сенсбилизаторов // 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.

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ЗАРЯДОВОГО ТРАНСПОРТА В ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Иванов И.О.

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

Изучение органических полупроводниковых материалов, используемых в молекулярной электронике, является актуальной областью исследований. На их основе изготавливают множество приборов: фотовольтаические ячейки, светодиоды, плоские широкоформатные дисплеи, сенсоры, однако их быстродействие и надежность оставляют желать лучшего [1].

Для создания органических полупроводниковых систем с высокими эксплуатационными характеристиками требуется детально исследовать особенности зарядового транспорта в различных органических донорно-акцепторных системах с целью определения путей целенаправленного формирования надежных и эффективных органических компонент объемного гетероперехода.

В настоящей работе проведено исследование характеристик зарядового транспорта в мультислойных системах, сформированных на основе пленок МЕН-PPV, допированных простыми и эндоэдральными фуллеренами C_{60} , $Y@C_{82}$.

Плёночные образцы и мультислойные системы МЕН-PPV, МЕН-PPV/ C_{60} формировали на стеклянных подложках.

Измерения температурной зависимости темновой проводимости осуществлялась в планарной геометрии. Для этого на стеклянную подложку методом магнетронного напыления наносились контакты с зазором 1 мм. После чего в зазор между контактами наносилась капля раствора ($C = 2$ мг/мл) полимера (полимера, допированного фуллеренами) и система выдерживалась до полного исключения растворителя (рис.1 а).

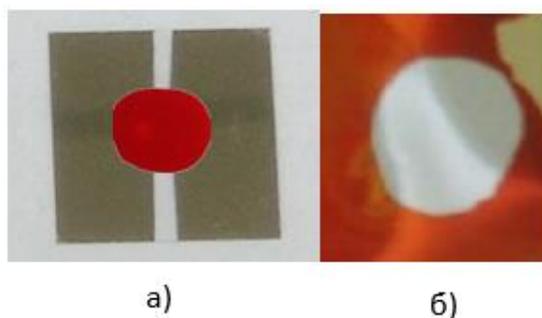


Рисунок 1 - Образец полимерной плёнки с контактами, сформированный в планарной геометрии (а), образец полимерной плёнки в мультислойной геометрии (б).

Измерения кинетических зависимостей вентиляльной фото-ЭДС при импульсном лазерном облучении проводились в мультислойной геометрии фотovoltaических ячеек. Для формирования мультислойных систем на стеклянной подложке предварительно формировалась методом магнетронного напыления полупрозрачная (80%) плёнка Au. Затем на поверхности плёнки методом полива раствором с последующим исключением растворителя формировался слой полимера (полимера, допированного фуллеренами). На поверхность полимерной плёнки через маску методом термического вакуумного напыления наносился слой Al толщиной 1-2 мкм (рис. 1 б). К покрытиям Au и Al серебряной пастой прикреплялись токоподводящие электроды.

Для измерения температурной зависимости темновой проводимости образцы помещались на подогреваемую подложку, выполненную в виде двух пластин слюды, между которыми монтировалась нихромовая спираль. Через спираль пропускали калиброванный ток от стабилизированного источника питания Б5-47. Контроль температуры производили с помощью калиброванной термопары. Измерение температурной зависимости проводимости полимерного образца производили с помощью тераомметра Е6-13А при разности потенциалов 100В.

Кинетические кривые вентиляльной фото-ЭДС при импульсном лазерном облучении ($\lambda = 400$ нм) регистрировали с помощью осциллографа Rigol DS1102С и переносили с помощью флеш-карты на компьютер. Визуализацию измерений осуществляли с помощью графического редактора Origin. Для определения постоянной времени кинетические кривые аппроксимировали экспоненциальными функциями.

Изучая температурную зависимость темновой проводимости органического полупроводника, можно получить информацию об основном механизме электропроводности полимерного композита и характере распределения плотности состояний.

В аморфных материалах статическая проводимость в широком температурном диапазоне имеет вид:

$$\sigma(T) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_a(T)}{k_B T}\right)^\beta \quad (1)$$

где σ_0 – предэкспоненциальный фактор, зависящий от базовых параметров системы, β – показатель степени, зависящий от структуры материала и температурного диапазона, в котором проводится измерения проводимости.

В органических неупорядоченных материалах значение β обычно близко к единице [2]. Полученные результаты измерений представлены на рисунке 2. Экспериментальные точки хорошо аппроксимируются прямой линией. По тангенсу угла наклона зависимости $\ln(\sigma)$ от $1/KT$ определяли энергию активации мелких ловушек: для МЕН-PPV $E_a = 0.65$ эВ, для МЕН-PPV/C₆₀ $E_a = 0.74$ эВ.

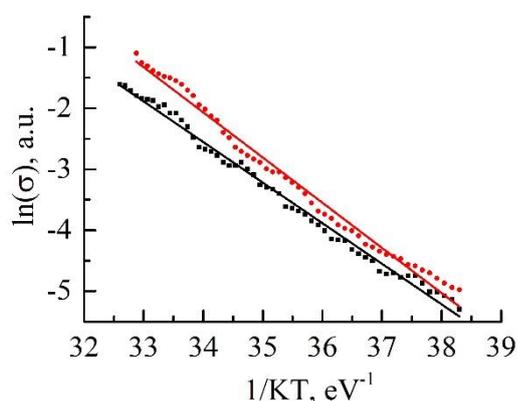


Рисунок 2 - Температурная зависимость темновой проводимости органических полупроводников ■ MEH-PPV и ■ MEH-PPV/C₆₀.

Метод исследования полимерных донорно-акцепторных систем, основанный на измерении нестационарной фото-ЭДС [3], позволяет получать информацию о различных характеристиках исследуемого полимерного материала. На рисунке 3 приведены кинетические кривые вентиляльной фото-ЭДС фотовольтаических ячеек Al/MEH-PPV/C₆₀/Au и Al/MEH-PPV/C₆₀/Y@C₈₂/Au, полученные при лазерном импульсном возбуждении ($\lambda = 400$ нм). Под действием света происходит генерация экситонов, которые мигрируют по полимеру и достигают донорно-акцепторного интерфейса, где диссоциируют на дырку и свободный электрон. После этого, дырка по донорной, а электрон по акцепторной компоненте дрейфуют до электродов и дают вклад в фототок. В случае органического полимерного композита вероятность электрон-дырочной рекомбинации мала [4], так как она возможна только на интерфейсе объемного гетероперехода. Время нарастания фототока определяется эффективной биполярной подвижностью μ свободных носителей.

В вентиляльном режиме напряженность электрического поля в слое полимерного гетероперехода определяется контактной разностью потенциалов между электродами ($\Delta U \approx 1$ В) и толщиной пленки ($D \approx 4$ мкм). Эффективную подвижность определяли как $\mu = \frac{D}{\tau E}$. Время выхода фото-ЭДС в насыщение (τ)

оценивали путем аппроксимации кинетических кривых экспоненциальными зависимостями. Полученные значения времени выхода в насыщение в исследуемых ячейках составляют $\tau_1=40$ мс и $\tau_2=9$ мс.

Из полученных результатов следует, что добавление в полимерный композит Y@C₈₂ увеличивает подвижность носителей заряда с $\mu_1=0,4 \cdot 10^{-5}$ см²/(Вс) до $\mu_2=1,77 \cdot 10^{-5}$ см²/(Вс).

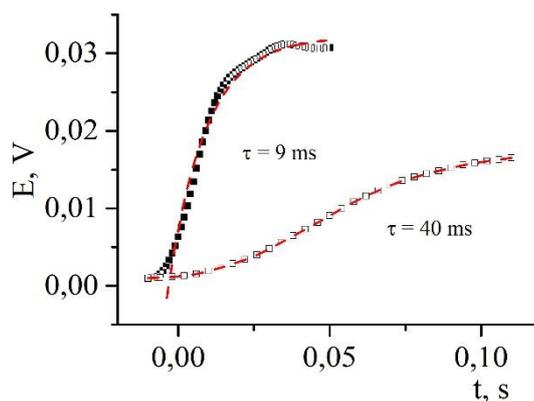


Рисунок 3 - Кинетика роста фото-ЭДС фотовольтаических ячеек □ Al/МЕН-PPV/C₆₀/Au и ■ Al/МЕН-PPV/C₆₀/Y@C₈₂Au при импульсном лазерном возбуждении. Красный пунктир - аппроксимация кинетических кривых экспоненциальными зависимостями.

Сформированы плёночные образцы и мультислойные системы МЕН-PPV, МЕН-PPV/C₆₀ и МЕН-PPV/C₆₀/Y@C₈₂. Измерены температурные зависимости их темновой проводимости. По полученным экспериментальным результатам для плёнок МЕН-PPV и МЕН-PPV/C₆₀ была определена энергия активации мелких ловушек. Проведено измерение кинетических зависимостей вентильной фото-ЭДС сформированных мультислойных систем. Показано, что кинетические зависимости роста фото-ЭДС сформированных фотовольтаических ячеек при лазерном импульсном возбуждении удовлетворительно аппроксимируются экспоненциальной функцией с постоянной времени $\tau \approx 10^{-3}$ s. Исходя из толщины плёнок полимерного композита и значения контактной разности потенциалов электродов, проведена оценка эффективной подвижности носителей заряда.

Список литературы

1. Brutting W. Physics of Organic Semiconductors. Wiley, N.Y., 2005, 555 p.
2. Bassler H. Charge Transport in Disordered Organic Photoconductors A Monte Carlo Simulation Study // Phys. Status Solidi. B., 1993, v. 175, № 1, p. 15-56.
3. Arkhipov V.I., Iovu M.S., Rudenko A.I., Shutov S.D. // Phys. Status Solidi A 54, 1979, №1, p. 67-77.
4. Jan Anton Koster L., Martijn Kemerink, Martijn M. Wienk, Klará Maturová, René A. J. Janssen Quantifying Bimolecular Recombination Losses in Organic Bulk Heterojunction Solar Cells // Adv. Mater., 2011, № 23, p. 1670–1674.

НЕКОЛЛИНЕАРНЫЕ СПИНОВЫЕ И МАГНИТНЫЕ СТРУКТУРЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ СВЕРХТОНКИМИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ

Каепкулова Э.И.

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

Введение. В работах [1,2] показано, что сверхтонкое взаимодействие (СТВ) с магнитным ядром ^{25}Mg способно смешивать синглетные S и триплетные T состояния двух неразличимых электронов фосфатных групп АДФ в активных центрах ферментов. Влияние ядерного спина и сверхтонкого взаимодействия на синглетные и триплетные конверсии электронной пары имеет важное значение не только для ферментативного катализа, но и для формирования неколлинеарных магнитных структур в органических и неорганических магнетиках. Смешивание синглетных S с триплетными T состояниями описывается суперпозицией состояний

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

Такое смешивание синглетных и триплетных состояний приводит к отклонению электронных спинов и их магнитных моментов от строго антипараллельной ориентации. Точно такое же отклонение электронных магнитных моментов приводит к образованию «слабого» ферромагнетизма в антиферромагнитных кристаллах типа $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (гематит). Это явление обычно объясняли существованием в таких кристаллах «антисимметричного обмена», обусловленного взаимодействием Дзялошинского-Мории (ДМ). Гамильтониан этого взаимодействия [3,4]

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

где \vec{D} - вектор Дзялошинского, который определяется симметрией кристалла и спин-орбитальными взаимодействиями, \vec{S}_i и \vec{S}_j являются операторами спиновых векторов взаимодействующих ионов. Оператор взаимодействия Дзялошинского-Мория не коммутирует с оператором обменного взаимодействия $\hat{H}_{ex} = J \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. Следовательно, триплетные и синглетные спиновые состояния не являются собственными векторами полного спинового гамильтониана

$$\hat{H} = J \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \vec{D}_{ij} \cdot [\vec{S}_i \times \vec{S}_j] + \vec{A}_i \cdot \vec{S}_i + \vec{A}_j \cdot \vec{S}_j$$

определяющего формирование магнитоупорядоченных структур. В этой формуле дополнительные слагаемые $\vec{A}_i \cdot \vec{S}_i + \vec{A}_j \cdot \vec{S}_j$ описывают влияние анизотропных магнитных взаимодействий.

Поскольку сверхтонкие взаимодействия способны смешивать синглетные и триплетные электронные спиновые состояния, то естественным образом возникает вопрос: способны ли сверхтонкие взаимодействия в неорганических и органических молекулярных магнетиках формировать неколлинеарные магнитные структуры? Возможно ли образование неколлинеарных магнитных структур в биядерных комплексах переходных металлов?

Цель работы: определить влияние и возможности сверхтонких взаимодействий на формирование неколлинеарных магнитоупорядоченных структур подобно асимметричному обменному взаимодействию Дзялошинского-Мория.

В соответствии с целью были поставлены следующие задачи.

1). Определить собственные состояния спинового гамильтониана, содержащего обменные и сверхтонкие взаимодействия эквивалентных электронных спинов в нулевом магнитном поле.

2). Показать неколлинеарность образующихся спиновых структур.

3). Определить углы между спиновыми векторами электронных спинов и их зависимость от констант обменных и сверхтонких взаимодействий.

Сверхтонкое спиновое взаимодействие является следствием контактного взаимодействия Ферми электронов с ядерными спинами [5]

$$\hat{H}_F = (8\pi/3)g_e\mu_B g_n\mu_n \left\{ \hat{S}_1 \hat{\delta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_A) + \hat{S}_2 \hat{\delta}(\vec{r}_2 - \vec{r}_A) \right\} \hat{I}$$

После ряда преобразований в спиновом гамильтониане это взаимодействие приводится к виду сверхтонкого взаимодействия электронных и ядерных спинов. Поэтому вместе с обменным взаимодействием спиновый гамильтониан приобретает вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= J \vec{S}_i \vec{S}_j + a_1 \vec{S}_1 \vec{I} + a_2 \vec{S}_2 \vec{I} = \\ &= J \vec{S}_i \vec{S}_j + \left(\frac{a_1 + a_2}{2} \right) (\vec{S}_1 + \vec{S}_2) \vec{I} + \left(\frac{a_1 - a_2}{2} \right) (\vec{S}_1 - \vec{S}_2) \vec{I} \end{aligned}$$

На рисунке 1 представлена схема магнитных взаимодействий, описываемая этим гамильтонианом.

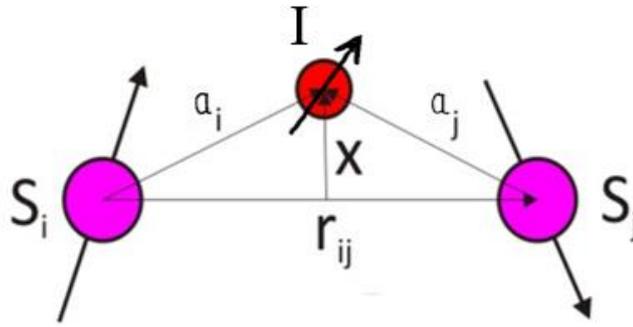


Рис.1. Схематическое изображение взаимодействия электронных спинов парамагнитных ионов \vec{S}_i и \vec{S}_j с ядерным спином \vec{I} .

В отсутствие сверхтонких взаимодействий собственными состояниями гамильтониана парных обменных взаимодействий $J \cdot \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ являются симметричные триплетные и антисимметричное синглетное состояние

$$\begin{aligned} |T_+\rangle &= |\alpha_1\alpha_2\rangle, & E_+ &= J/4 \\ |T_0\rangle &= 2^{-1/2}|\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2\rangle, & E_0 &= J/4 \\ |T_-\rangle &= |\beta_1\beta_2\rangle, & E_- &= J/4, \\ |S\rangle &= 2^{-1/2}|\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2\rangle, & E_S &= -3J/4. \end{aligned}$$

Антисимметричная часть спинового гамильтониана смешивает синглетные и триплетные состояния с коэффициентами

$$c_S^2 = \frac{1 + (1 + \alpha^2)^{-1.2}}{2}, \quad c_T^2 = \frac{1 - (1 + \alpha^2)^{-1.2}}{2},$$

где $\alpha = (a_1 - a_2) / J$. Угол Θ между электронными спинами определяется как квантовое среднее произведение спиновых операторов

$$\cos\Theta = \frac{\langle \Psi | \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 | \Psi \rangle}{|\vec{S}_1| \cdot |\vec{S}_2|}.$$

Для «искаженного» синглетного состояния

$$\cos\Theta = -\left(1 + \frac{2J}{\sqrt{J^2 + (a_1 - a_2)^2}}\right) / 3 < -1.$$

Это неравенство означает, что угол $\Theta < 180^\circ$. Таким образом, оба спина электронов отклоняются от строго антипараллельного состояния и образуют неколлинеарную структуру, как и в случае взаимодействия ДМ. Эффекты могут

быть достаточно сильными, если константы СТВ a_1 и a_2 сопоставимы с обменной константой J .

Результаты: 1) сверхтонкое взаимодействие способно смешивать синглетные и триплетные состояния и вызывать эффекты, подобные эффектам Дзялошинского-Мории; 2) сверхтонкие взаимодействия в молекулярном магнетике могут приводить к образованию неколлинеарных, спиральных и хиральных магнитных структур; 3) любые магнитные некоммутативные взаимодействия способны образовывать неколлинеарные магнитные структуры так же, как и взаимодействие Дзялошинского-Мории.

Список литературы

1. Каепкулова, Э.И. Влияние магнитного поля на ферментативный катализ –Выпускная квалификационная работа, –2020. –44 с.
2. Каепкулова, Э. И. Влияние магнитного изотопа ^{25}Mg на кинетику внутриклеточного синтеза аденозинтрифосфата // Шаг в науку. – 2021. – № 2. – 48–53 с.
3. Cristina Sáenz de Pipaón Soba, Contributions to molecular magnetism: chiral magnets and networked SMMs, –2013. –278 p.
4. Изюмов, Ю.А. Модулированные длинопериодические магнитные структуры кристаллов / УФН. –1984., Т. 144, –№ 3, –439-475 с.
5. Kerrington, A. Mc-Lachlan A.D. Introduction to magnetic resonance. – NY. Harper&Row Publishers, –1967. – 448 p.

БРИЛЛЮЭНОВСКИЙ РЕФЛЕКТОМЕТР

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

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

В различных измерительных устройствах, системах сбора информации, сигнализации все более широкое применение находят волоконно-оптические датчики (ВОД). Преимущества их использования описаны в [1]. Кроме того, с использованием волоконной оптики перспективным является создание мультиплексных волоконно-оптических информационных систем, объединяющих большое количество ВОД с различными физическими параметрами. В таких системах, как правило, используется один источник излучения и сигналы ВОД передаются по одному или нескольким оптическим волокнам к устройству обработки информации, которое разделяет принимаемые сигналы и преобразует их в форму, удобную для дальнейшего использования. При этом число волокон значительно меньше числа ВОД [1-7].

Одним из вариантов мультиплексных измерительных систем являются распределенные ВОД, в которых функции большого числа чувствительных элементов выполняет достаточно длинный отрезок оптического волокна. Принцип действия распределенных ВОД основан на оптической рефлектометрии, которая позволяет локализовать в волокнах различного рода оптические неоднородности, а также измерять уровень оптических потерь [2]. С помощью волоконно-оптических рефлектометров можно также регистрировать изменения физических свойств оптических волокон при различных внешних воздействиях. Например, в [3] предложен распределенный ВОД, в котором функции чувствительных элементов выполняет отрезок световода с жидкостной сердцевиной. Регистрация распределения интенсивности рэлеевского рассеяния по длине световода позволяет в таком датчике производить многоканальные измерения температуры или давления.

Число независимых измерительных каналов распределенного ВОД, или число дискретных ВОД, которые можно заменить отрезком измерительного световода, определяется пространственным разрешением рефлектометра и длиной измерительного оптического волокна [6].

В настоящее время разрешающая способность волоконно-оптических рефлектометров, использующих полупроводниковые источники и приемники излучения, может составлять 3 - 5 м [4], но при необходимости она может быть улучшена за счет увеличения времени накопления сигналов. Максимальная длина измерительного оптического волокна ограничена уровнем оптических потерь в нем и в настоящее время достигает километра и более. С точки зрения увеличения числа каналов распределенного ВОД, оптимально волокно с наименьшими оптическими потерями. Этому требованию удовлетворяют широко используемые в технике оптической связи волокна из кварцевого стекла. В качестве примера можно привести распределенный ВОД температуры,

использующий в качестве измерительного кварц-кварцевое оптическое волокно, описанный в [5]. Принцип действия датчика основан на измерении в каждом канале интенсивности антистоксовой компоненты комбинационного рассеяния, которая экспоненциально растет с увеличением температуры измерительного оптического волокна. Точность измерения температуры в диапазоне 223 - 373 К составила ± 1 К при длине измерительного световода 1 км, пространственном разрешении 7,5 м и времени накопления сигналов 25 с.

Помимо комбинационного рассеяния в оптических волокнах наблюдается также рассеяние Мандельштама-Бриллюэна [6], фотолюминесценция [7], ИК поглощение [8], использование которых способно существенно расширить возможности распределенных ВОД. А зависимость частотного сдвига рассеяния Мандельштама-Бриллюэна от продольной деформации оптического волокна и температуры, а также перспектива использования для создания распределенных датчиков физических параметров рассеяние Мандельштама-Бриллюэна оценены в работах [9,10].

В настоящей работе описан радиационно устойчивый рефрактометр, обеспечивающий измерения бриллюэновского сдвига частоты в зависимости от координат по длине волоконно-оптического чувствительного элемента и позволяет реализовать распределенный датчик температуры или механических деформаций с высокой чувствительностью [11]. Такого рода распределенные волоконные датчики имеют широкую область применения (контроль состояния протяженных объектов на ускорителях, ядерных реакторах, циклотронах).

Блок схема рефрактометра показана на рис.1.

Он содержит импульсный лазер 1, связанный с чувствительным элементом 3 в виде первого отрезка оптического волокна через первое средство для организации приема обратно рассеянного излучения 2. Второй отрезок оптического волокна связан с выходом первого средства 4. Второе средство выполнено с возможностью организации подачи излучения непрерывного лазера 6 во второй отрезок оптического волокна в направлении, противоположном направлению распространения рассеянного в чувствительном элементе излучения. Фотоприемник 8 входом соединен с выходом второго средства для организации приема обратно рассеянного излучения 5 и связан с блоком регистрации 9. Блок управления частотой лазеров 7 связан с блоком регистрации 9 и выполнен с возможностью стабилизации частоты одного из лазеров и изменения частоты другого лазера.

Работает Бриллюэновский рефлектметр следующим образом.

При отсутствии нагрева в области измерения или механических нагрузок на входе блока регистрации сигнал отсутствует.

Если в области расположения световода есть нагрев или механические деформации, то происходит следующее. Электронный блок 7 стабилизирует частоту одного из лазеров (1 или 6) и в то же время изменяет (сканирует) частоту другого лазера, например, по линейному закону. Импульсное излучение от лазера 1 через элемент 2 (например, циркулятор) поступает на вход чувствительного элемента 3 и распространяется в нем, генерируя

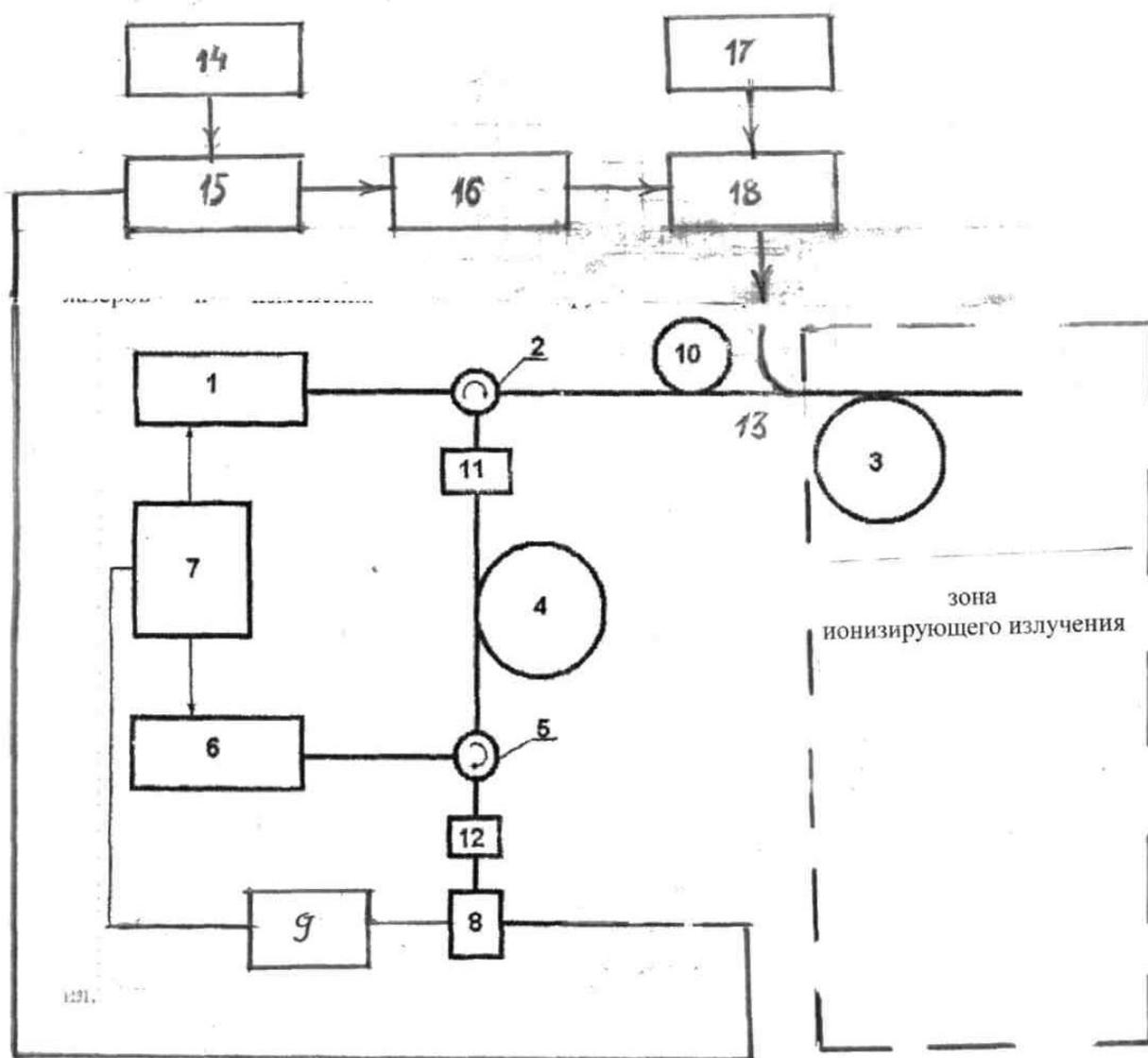


Рис.1. Блок схема радиационно устойчивого рефрактометра

1 -узкополосный (предпочтительно одночастотный) импульсный лазер, 2 - средство для организации приема обратного рассеяния (направленный ответвитель или оптический циркулятор), 3 - чувствительный элемент в виде оптического волокна значительной длины (до десятков км), 4 - отрезок второго оптического волокна значительной длины (сотни метров), 5 - второе средство для организации приема обратного рассеяния (направленный ответвитель или оптический циркулятор), 6 - непрерывный лазер с узким спектром (предпочтительно одночастотный), 7 - электронный блок управления частотой лазеров, 8 – фотоприемник, 9 - блок регистрации, 10 - отрезок оптического волокна, 11 - оптический усилитель, 12 - фильтр на основе брэгговской решетки, 13 - волоконно-оптический ветвитель, 14 - источника опорного напряжения, 15 - сумматор, 16 - таймер, 17 - мощный непрерывный лазер, 18 - затвор.

стоксовую и антистоксовую компоненты рассеяние Мандельштама-Бриллюэна. Рассеянное в обратном направлении излучение, содержащее рэлеевскую и две бриллюэновские компоненты, через элемент 2 поступает в отрезок оптического волокна 4, а затем через элемент 5 (например, циркулятор) - на фотоприемник 8. Сигнал с фотоприемника 8 поступает в блок 9 обработки информации, который определяет величину бриллюэновского сдвига частоты для каждого виртуального канала дальности после каждого цикла сканирования частоты. При сканировании оптической частоты одного из лазеров частота бриллюэновского усиления в волокне 4 в определенный момент совпадает с частотой бриллюэновской компоненты рассеянного в чувствительном элементе 3 излучения, в результате чего возникает пик сигнала, положение которого относительно момента начала сканирования определяет бриллюэновский сдвиг частоты.

Таким образом, выделение требуемого спектрального диапазона достигается применением активного перестраиваемого фильтра, работающего за счет бриллюэновского усиления. При этом одновременно достигается усиление сигнала бриллюэновского рассеяния и его эффективная узкополосная фильтрация. В результате удастся отказаться как от дорогостоящей техники СВЧ, так и чрезвычайно узкополосных оптических фильтров. Отсутствие гетеродинирования устраняет проблему нестабильности поляризации рассеянного излучения.

С целью организации опорного канала между чувствительным волокном 3 и ответвителем (циркулятором) 2 может быть помещен отрезок оптического волокна 10, в котором отсутствуют механические напряжения, и температура которого контролируется (термостабилизируется или измеряется).

Между ответвителем (циркулятором) 2 и отрезком оптического волокна 4 может быть помещен оптический усилитель 11, например, на основе оптического волокна, содержащего ионы эрбия. Для улучшения фильтрации оптического излучения (подавления сигнала рэлеевского рассеяния) на пути от ответвителя (циркулятора) 5 до фотоприемника 8 может быть помещен фильтр 12 на основе брэгговской решетки.

Если ионизирующее излучение отсутствует, то световод пропускает излучение полностью и рефрактометр фиксирует распределение температур или механические деформации.

При воздействии радиации в световоде 3 появляются F - центры (центры окраски), которые поглощают свет в определенной части спектра, в которой собственное поглощение материала отсутствует и, как следствие, появляется дополнительное затухание. Для защиты световода 3 используется необратимое обесцвечивание центров окраски излучением лазера [12]. Для этих целей через световод 3 пропускается мощное непрерывное лазерное излучение. При стационарном воздействии мощного непрерывного лазерного излучения последнее является существенным фактором, способствующим восстановлению первоначального затухания световода.

В этом случае через волоконно-оптический ветвитель 13 в световод 3 направляется излучение мощного непрерывного лазера 17 через затвор 18. Затвор 18 открывается с помощью таймера 16 настроенного на определенное

время. Время работы таймера может регулироваться по усмотрению оператора обслуживающего работу рефрактометра в зависимости от уровня радиационной нагрузки области, где работает рефрактометр. Работой таймера 16 управляет сумматор, на который одновременно поступают сигнал с фотоприемника 8 и источника опорного напряжения 14. Сумматор 15 вырабатывает сигнал управления для таймера только в том случае, когда уровень сигнала с фотоприемника опускается ниже установленного уровня. Критический, минимальный, уровень сигнала с фотоприемника 8 и величина опорного напряжения источника опорного напряжения 14 устанавливаются при калибровке рефрактометра, это его паспортные характеристики.

Таймер открывает затвор 18 только до тех пор, пока величина пропускания световода 3 не восстановится до первоначального значения.

В конкретном воплощении импульсный лазер может представлять собой узкополосный лазерный диод с брэгговской решеткой и оптический усилитель, либо совокупность непрерывного, например, полупроводникового лазера и модулятора, например, электрооптического или оптоакустического, а также оптического усилителя, например, волоконного, при этом упомянутый импульсный лазер выполнен с возможностью перестраивания частоты в небольших пределах (но не менее возможного изменения частоты бриллюэновского сдвига - 1...2 ГГц, типично 12 ГГц для длины волны излучения 1550 нм), например, за счет изменения температуры кристалла или селективного элемента-решетки, непрерывный лазер выполнен в виде совокупности одночастотного полупроводникового лазера и оптического усилителя с возможностью перестраивания по частоте в небольших пределах, например, за счет изменения температуры кристалла или селективного элемента-решетки, а фотоприемник выполнен в виде р-і-п или лавинного фотодиода с усилителем фототока.

Для необратимого обесцвечивания центров окраски наводимых ионизирующим излучением в оптическом волокне чувствительного элемента рефрактометра может быть использован непрерывный ИАГ:ND⁺³ лазер ЛГН -502 с длиной волны излучения $\lambda = 1,06$ мкм мощностью ~ 12 Вт.

Предлагаемый рефрактор обладает повышенной чувствительностью без процесса гетеродинамирования за счет узкополосного усиления сигнала бриллюэновского рассеяния в чувствительном элементе (отрезке оптического волокна) бриллюэновским волоконным усилителем.

Это результат достигается за счет того что для организации опорного канала между чувствительным элементом в виде первого отрезка оптического волокна и первым средством для организации приема обратно рассеянного излучения помещен отрезок оптического волокна, в котором отсутствуют механические напряжения и температура которого контролируется путем измерений или термостабилизации. Кроме того, между первым средством для организации приема обратно рассеянного излучения и вторым отрезком оптического волокна дополнительно введен волоконный оптический усилитель, например, с волокном, легированным ионами эрбия, а в промежутке между вторым средством для организации приема обратно рассеянного излучения и фотоприемником

установлен оптический фильтр на основе брэгговской решетки. Так же достижению этого результата способствует то обстоятельство, что первый отрезок оптического волокна выполнен одномодовым, каждое из средств для организации приема обратно рассеянного излучения выполнено в виде циркулятора или направленного оптического ответвителя, либо инного светоделителя, а импульсный лазер и непрерывный лазер выполнены с узким спектром, предпочтительно, одночастотным.

Возможность предлагаемому рефрактометру проводить измерения в зонах с ионизирующим излучением, например в ускорителях, реакторах циклотронах, обеспечивается за счет необратимого фотообесцвечивания стабильных и нестабильных полос поглощения наведенных радиацией непрерывным лазерным излучением [12]

Список литературы

1. В. И. Бусурин, А. С. Семенов, Н. П. Удалов. Квантовая электроника, 12, 901 (1985).
2. Исследование объектов с помощью пикосекундных импульсов/ Г.В. Глебович, А.В. Андриянов, В.В. Введенский и др.; Под ред. Г.В. Глебовича.— М.: Радио и связь, 1984. – 256 с.
3. Патент Великобритании № 2122337 (М. кл. 4 С01КП/00).
4. В. Т. Потапов, В. П. Соснин, И. И. , Д. П. Трегуб, Р. В. Шпилевский, Б. Б. Эленкриг, “Об использовании метода рефлектотрии для исследования условий на торце световода”, Квантовая электроника, том 8, N8, 1981, с.1820–1823..
5. A. N. Hartog, A. P. Leach, M. P., A high spatial resolution distributed optical fiber sensor for hi A high spatial resolution distributed optical fiber sensor for high-temperature measurements/ Gold. Electron. Letts, v.21, p.1061- 1085, 1985..
6. А. И. Ритус. Исследование мандельштам-бриллюэновского рассеяния света в кристаллах и стеклах применительно к задачам квантовой электроники и волоконной оптики. Труды ФИАН, 137, 3 (1982). С.3-37.
7. H. Koyama. Appl. Phys., Cathodoluminescence study of SiO₂ том. 51, номер 4 2228-2235. (1980).
8. Б. Г. Горшков, И. Е. Горбатов, Ю. К. Данилейко, А. В. Сидорин Люминесценция, рассеяние и поглощение света в кварцевых оптических волокнах и перспективы их использования в распределенных световодных датчиках / Квантовая электроника», том17, № 3, 1990 , С. 345 - 350.
9. Горшков Б. Г., Заирный Д. В., Заирный М. В. Бриллюэновский рефрактометр. Патент [2 444 001](#), опубликовано [27.02.2012](#), бюл. № 6.
10. Яковлев М.Я., Цуканов В.Н., Помелов А.В. Оптический Бриллюэновский рефрактометр. Патент 2214584, опубликовано 20.10.2003, бюл. № 29.
11. Кирин И.Г. Бриллюэновский рефлектотметр. Патент 2755773, опубликовано [21.09.2021](#), бюл. № [27](#)

12. Кирин И.Г. Специальные радиационно-устойчивые волоконно-оптические и оптоэлектронные датчики и системы / И.Г. Кирин –М.: Университетская книга, 2008 – 148 с.

QUADRUPOLE INDUCED OPTICAL TRANSVERSE ANTI-TRAPPING EFFECT IN GAUSSIAN BEAM

Kislov D.A.^{1,2}, Ph.D.

Shalin A.S.^{2,3}, Sc.D.

¹ITMO University, 49 Kronverksky Pr., St. Petersburg 197101, Russia

²Riga Technical University, Azenes street 12, Riga 1048, Latvia

³Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics of Russian Academy of Sciences (Ulyanovsk branch), Goncharova Str.48, Ulyanovsk, Russia, 432000

Abstract. Focused laser beams allow controlling mechanical motion of objects and can serve as a tool for assembling complex micro and nano structures in space. Introduction of additional degrees of freedom into optomechanical manipulation suggests approaching new capabilities. Here we analyze optical forces acting on a high refractive index silicon sphere in a focused Gaussian beam and reveal new regimes of particle's anti-trapping. Multipolar analysis allows separating an optical force into interception and recoil components, in particular, interplaying interception radial forces and multipolar resonances within a particle can lead to either trapping or anti-trapping scenarios and also introduce bending trajectories, depending on the overall system parameters. Multipolar engineering of optical forces paves a way to new possibilities in microfluidic applications, including sorting and micro assembly of nontrivial volumetric geometries.

1. Introduction

Optomechanical manipulation, firstly demonstrated by A. Ashkin at the middle of 1980s [1], opened numerous venues in fundamental and applied science, e.g. [2-4]. While this classical configuration has been widely explored and used nowadays, introducing new degrees of freedom in optomechanical manipulation is the subject of intensive research. Those investigations are partially inspired by new microfluidic applications [5,6], biological and biomedical investigations [7,8].

Enlarging a number of optomechanical degrees of freedom can be obtained with three fundamentally different approaches. The first method is based on shaping a laser beam. One of the main experimental techniques here is to use holographic masks [9] (spatial light modulators are typically employed in the latter case). Another approach to a flexible manipulation is to introduce auxiliary photonic structures, which assist configuring optical forces. For example, plasmonic substrate [10] and hyperbolic metamaterials [11-13]. The last method, to be mentioned in this context, is to shape a particle itself. Those are typically made of transparent low-index dielectric materials or plasmonic metals [14]. In both cases, however, particles' polarizability is linked to its dipolar response and governs the interaction. However, high-index dielectric particles supporting a variety of Mie resonances [15-19] introduce new interaction channels beyond simple dipolar polarizability terms [20,21]. For example, coherent interaction between electric and magnetic responses of silicon particles in linear or

elliptically polarized Gaussian beam was shown to provide either pulling or pushing forces, depending on system's parameters [20].

Careful tailoring of multipoles interference can provide superior capabilities to control optical forces. Intuitively, a proper combination of multipoles can lead to quite different far-field scattering patterns. As a result, recoil forces can be flexibly engineered, though electromagnetic interactions in their complete form should be addressed – this is the goal of this report.

2. Theoretical formalism

In this work, a spherical particle is situated at a waist of a linearly polarized Gaussian beam. The forces will be analyzed at the focal plane, transversely to the propagation direction.

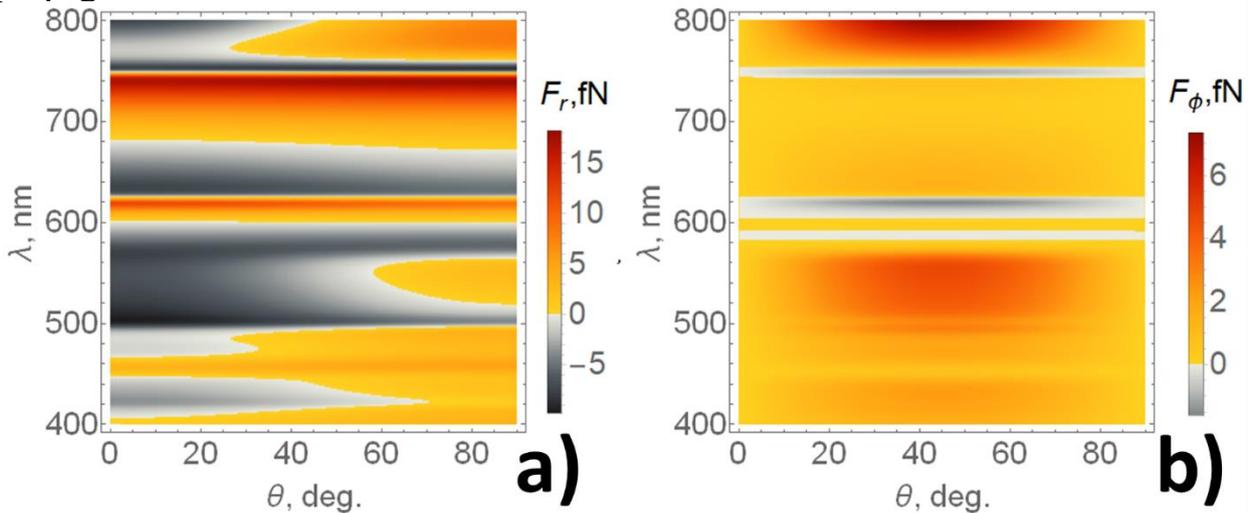


Figure 1. - Force components color surfaces. a) F_r and b) F_ϕ as a function of the illumination wavelength and angular position of the particle with respect to the beam polarization. For panel a) color regions correspond to the anti-trapping regime while grey-scale areas correspond to an attractive force. For panel b) color regions correspond to the azimuthal component of the force that deflects the particle trajectory towards the y-axis; grey-scale areas – towards the x-axis.

The following parameters are considered: the beam waist $w_0=5\mu\text{m}$ (loosely focused beam), electrical field amplitude (at the beam's center) $E_0=10^6$ V/m. The beam is linearly polarized along x-axis, the CW laser wavelength is the subject to the forthcoming parametric study. A 140 nm radius silicon nanoparticle is placed $r = w_0/2$, while azimuthal angle θ is a variable. The analytical model is based on the Mie theory and multipole decomposition of the optical force [23–26].

Linear polarization breaks the rotational symmetry of the problem and, hence, the optical force has an angular dependence. Fig. 1 summarizes this behavior, where the forces in the cylindrical coordinate system are presented. The surfaces have color gradients along θ and underline the non-uniform angular dependence. Overall, the optical force is not radial (typical conservative gradient force), which could lead to nontrivial particle's trajectories. This angular dependence of the radial force is especially pronounced for shorter wavelengths, where higher-order multipoles play a role. The sign of the radial component of the force dictates whenever the regime is

trapping or anti-trapping. The angular asymmetry of radial component, shown in Fig.1(a), is a direct consequence of the interplaying interception and recoil components. The azimuthal component, on the other hand, has a symmetric angular distribution (relative to $\pi/4$ angle) and is responsible for the deviation of particle's trajectory from a radial motion. It drives the particle towards the X or Y axis depending on wavelength.

Fig. 2a shows the situation when optical bending is obtained. At $\theta = 0$, the trapping effect is observed, while at $\theta = \pi / 2$, the value of net force changes sign to "plus" and the particle is pushed out of the beam. The sign of the net force in this case is determined by the recoil term (since the value of the interception term is always negative (towards the center) and does not depend on the angle θ). Here the contribution of both, interception and recoil terms, must be considered. But since the magnitude and sign of the interception term does not depend on the angle θ , the change of the direction of the net force and the bending effect is determined by the dipole interference term .

For the case in Fig. 2b, for any angle θ , the anti-trapping effect is observed, while the contributions of the interception term and interference multipole terms to the value of the net force are comparable. The net force has the contributions from interception and recoil terms but, in this case, is the dipole-quadrupole interference term the one governing the force direction. It should be noted that this transverse anti-trapping effect, obtained because of the two electric multipoles interference, is reported for the first time.

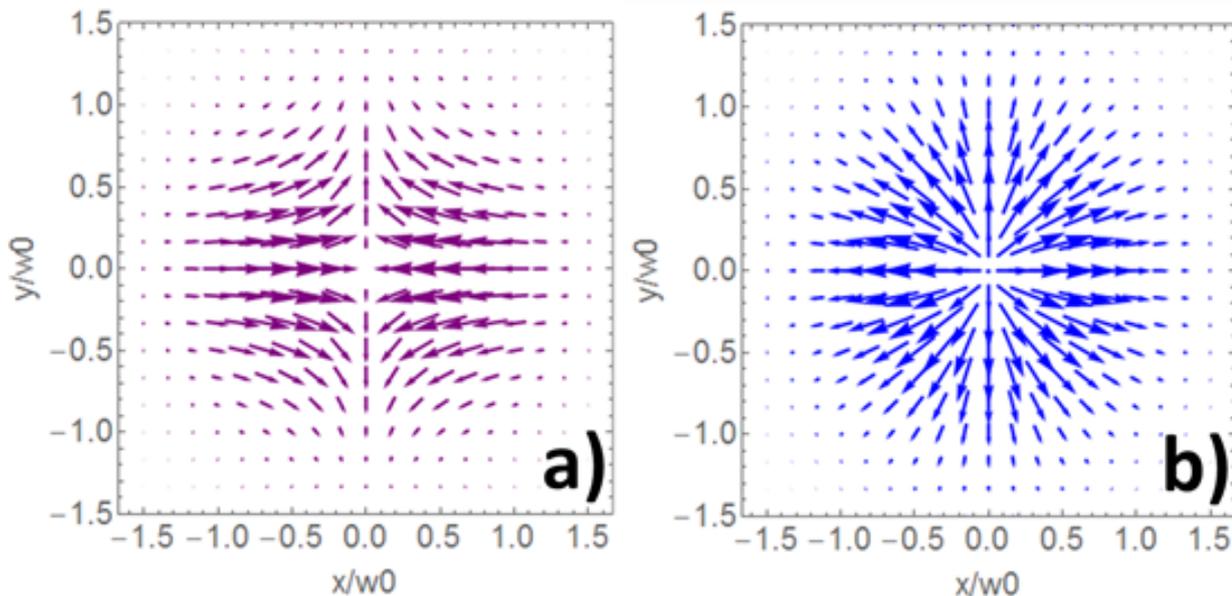


Figure 2. - Spatial distribution of the net force in the XY plane for points (a) $\lambda=555$ nm, (b) $\lambda=620$ nm.

In addition, we should pay attention to the following. The destructive interference between the multipole terms does take place and results in a complete nulling of the overall force. This happens even though there is a moderately high gradient of the field intensity. The total optical force is equal to zero only for a set of wavelengths and at $\theta = 0$ and at $\theta = \pi / 2$ (Fig. 1). There are also areas in which the net

force approaches zero for any angle, although strictly not equal to zero. These are the points with a wavelength of 600, 625 and 750 nm (Fig. 1.).

3. Conclusions

The impact of higher-order multipoles on optomechanical interactions between focused laser beams and high refractive index particles has been investigated. It was shown that a proper balance between multipolar contributions allows controlling direction of optical forces, switching between trapping, anti-trapping and bending regimes almost on demand. In particular, it was shown that quadrupole moments are responsible for achieving anti-trapping behavior. Furthermore, the interception force acting on a particle with a high refractive index can change sign depending on the incident light wavelength. This effect is atypical for the classical optical tweezers, where the trapping regime is usually implemented. A transverse anti-trapping regime can also emerge in the case of interplaying electrical modes only, where the recoil force dominates. Moreover, the very special regime of bending – particle's motion in a curved trajectory could be also realized via different angle-dependencies of the recoil and interception forces.

Introduction of multipolar degrees of freedom into optomechanical interactions enlarges the capabilities of the motion control at the nanoscale, opening a room of opportunities for new possible applications in optics, biology, medicine and lab-on-a-chip platforms.

Список литературы

1. Ashkin, A., Dziedzic, J. M., Bjorkholm, J. E., Chu, S. Observation of a single-beam gradient force optical trap for dielectric particles / A. Ashkin, J. M. Dziedzic, J. E. Bjorkholm, S. Chu // *Opt. Lett.* – 1986. - № 11. – P. 288-290.
2. Neuman, K.C., Block, S.M. Optical trapping / K.C. Neuman, S.M. Block // *Review of Scientific Instruments.* – 2004. - № 75. – P.2787-2809.
3. Grier, D. A revolution in optical manipulation / D. Grier // *Nature.* – 2003. - № 424. – P.810–816.
4. Juan, M., Righini, M., Quidant, R. Plasmon nano-optical tweezers / M. Juan, M. Righini, R. Quidant // *Nature Photon.* – 2011. - № 5. – P.349–356.
5. Tkachenko, G., Brasselet, E. Optofluidic sorting of material chirality by chiral light / G. Tkachenko, E. Brasselet // *Nat Commun.* – 2014. - №5. – P.3577.
6. Valero, A.C., Kislov, D., Gurvitz, E. A., Shamkhi, H. K., Pavlov, A. A., Redka, D., Yankin, S., Zemánek, P., Shalin, A. S. Nanovortex-Driven All-Dielectric Optical Diffusion Boosting and Sorting Concept for Lab-on-a-Chip Platforms / A.C. Valero, D. Kislov, E. A. Gurvitz, H. K. Shamkhi, A. A. Pavlov, D. Redka, S. Yankin, P. Zemánek, A. S. Shalin // *Adv. Sci.* – 2020. - №7. – P.1903049.
7. Favre-Bulle, I.A., Stilgoe, A.B., Scott, E.K., Rubinsztein-Dunlop, H. Optical trapping in vivo: theory, practice, and applications / I.A. Favre-Bulle, A.B. Stilgoe, E.K. Scott, H. Rubinsztein-Dunlop // *Nanophotonics.* – 2019. - Vol. 8. - № 6. - P. 1023-1040.

8. Liu, X., Yuan, J., Wu, D., Zou, X., Zheng, Q., Zhang, W., Lei, H. All-optical targeted drug delivery and real-time detection of a single cancer cell / X. Liu, J. Yuan, D. Wu, X. Zou, Q. Zheng, W. Zhang, H. Lei // *Nanophotonics*. – 2020. - Vol. 9. - №3. - P. 611-622.
9. Barredo, D., Lienhard, V., Scholl, P., de Léséleuc, S., Boulier, T., Browaeys, A., Lahaye, T. Three-Dimensional Trapping of Individual Rydberg Atoms in Ponderomotive Bottle Beam Traps / D. Barredo, V. Lienhard, P. Scholl, S. de Léséleuc, T. Boulier, A. Browaeys, T. Lahaye // *Phys. Rev. Lett.* – 2020. - №124. - P.023201.
10. Kostina, N., Petrov, M., Ivinskaya, A., Sukhov, S., Bogdanov, A., Toftul, I., Nieto-Vesperinas, M., Ginzburg, P., Shalin, A. Optical binding via surface plasmon polariton interference / N. Kostina, M. Petrov, A. Ivinskaya, S. Sukhov, A. Bogdanov, I. Toftul, M. Nieto-Vesperinas, P. Ginzburg, A. Shalin // *Phys. Rev. B*. – 2019. - №99. – P.125416.
11. Kostina, N.A., Kislov, D.A., Ivinskaya, A.N., Proskurin, A., Redka, D.N., Novitsky, A., Ginzburg, P., Shalin, A.S. Nanoscale Tunable Optical Binding Mediated by Hyperbolic Metamaterials / N.A. Kostina, D.A. Kislov, A.N. Ivinskaya, A. Proskurin, D.N. Redka, A. Novitsky, P. Ginzburg, A.S. Shalin // *ACS Photonics*. – 2020. - №7 (2). - P.425-433.
12. Ivinskaya, A., Kostina, N., Proskurin, A., Petrov, M.I., Bogdanov, A.A., Sukhov, S., Krasavin, A.V., Karabchevsky, A., Shalin, A.S., Ginzburg, P. Optomechanical Manipulation with Hyperbolic Metasurfaces / A. Ivinskaya, N. Kostina, A. Proskurin, M.I. Petrov, A. A. Bogdanov, S. Sukhov, A. V. Krasavin, A. Karabchevsky, A.S. Shalin, P. Ginzburg // *ACS Photonics*. - 2018. - №5 (11). - P.4371-4377
13. Ivinskaya, A., Petrov, M., Bogdanov, A. et al. Plasmon-assisted optical trapping and anti-trapping / Ivinskaya, A., Petrov, M., Bogdanov, A. et al. // *Light Sci Appl.* – 2017. - №6. - P.e16258.
14. Shalin, A.S., Sukhov, S.V. Plasmonic Nanostructures as Accelerators for Nanoparticles: Optical Nanocannon / A.S. Shalin, S.V. Sukhov // *Plasmonics*. - 2013. - Vol. 8. - №2. - P. 625-629.
15. Baryshnikova, K., Filonov, D., Simovski, C., Evlyukhin, A., Kadochkin, A., Nenasheva, E., Ginzburg, P., Shalin, A.S. Giant magnetoelectric field separation via anapole-type states in high-index dielectric structures /K. Baryshnikova, D. Filonov, C. Simovski, A. Evlyukhin, A. Kadochkin, E. Nenasheva, P. Ginzburg, A.S. Shalin // *Phys. Rev. B*. – 2018. - №98. – P.165419.
16. Barhom, H., Machnev, A.A., Noskov, R. E., Goncharenko, A., Gurvitz, E.A., Timin, A. S., Shkoldin, V. A., Koniakhin, S. V., Koval, O. Yu., Zyuzin, M. V., Shalin, A.S., Shishkin, I. I., Ginzburg, P. Biological Kerker Effect Boosts Light Collection Efficiency in Plants / H. Barhom, A.A. Machnev, R. E. Noskov, A. Goncharenko, E.A. Gurvitz, A. S. Timin, V. A. Shkoldin, S. V. Koniakhin, O. Yu. Koval, M. V. Zyuzin, A.S. Shalin, I. I. Shishkin, P. Ginzburg // *Nano Letters*. - 2019. – Vol.19 (10). - P.7062-7071.
17. Terekhov, P.D., Baryshnikova, K.V., Greenberg, Y., Fu, Y. H., Evlyukhin, A.B., Shalin, A.S., Karabchevsky, A. Enhanced absorption in all-dielectric

metasurfaces due to magnetic dipole excitation / P.D. Terekhov, K.V. Baryshnikova, Y. Greenberg, Y. H. Fu, A.B. Evlyukhin, A.S. Shalin, A. Karabchevsky // *Sci Rep.* – 2019. - №9. - P.3438.

18. Kozlov, V., Filonov, D., Shalin, A. S., Steinberg, B. Z., Ginzburg, P. Asymmetric backscattering from the hybrid magneto-electric meta particle / V. Kozlov, D. Filonov, A. S. Shalin, B. Z. Steinberg, P. Ginzburg // *Appl. Phys. Lett.* – 2016. - №109. - P.203503.

19. Terekhov, P. D., Shamkhi, H. K., Gurvitz, E. A., Baryshnikova, K. V., Evlyukhin, A. B., Shalin, A. S., Karabchevsky, A. Broadband forward scattering from dielectric cubic nanoantenna in lossless media / P. D. Terekhov, H. K. Shamkhi, E. A. Gurvitz, K. V. Baryshnikova, A. B. Evlyukhin, A. S. Shalin, A. Karabchevsky // *Opt. Express.* – 2019. - №27. – P.10924-10935.

20. Xu, X., Nieto-Vesperinas, M., Qiu, C., Liu, X., Gao, D., Zhang, Y., Li, B., Kerker-Type Intensity-Gradient Force of Light / X. Xu, M. Nieto-Vesperinas, C. Qiu, X. Liu, D. Gao, Y. Zhang, B. Li // *Laser & Photonics Reviews.* – 2020. - №14. – P.1900265.

21. Länk, N.O., Johansson, P., Käll, M. Directional scattering and multipolar contributions to optical forces on silicon nanoparticles in focused laser beams / N.O. Länk, P. Johansson, M. Käll // *Opt. Express.* – 2018. - №26. - P.29074-29085.

22. Liu, H., Panmai, M., Peng, Y., Lan, S. Optical pulling and pushing forces exerted on silicon nanospheres with strong coherent interaction between electric and magnetic resonances / H. Liu, M. Panmai, Y. Peng, S. Lan // *Opt. Express.* - 2017. - №25. – P.12357-12371.

23. Salandrino, A., Fardad, S., Christodoulides, D.N. Generalized Mie theory of optical forces / A. Salandrino, S. Fardad, D.N. Christodoulides // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2012. - №29. - P.855-866.

24. Duan, X.-Y., Wang, Z.-G. Fano resonances in the optical scattering force upon a high-index dielectric nanoparticle / X.-Y. Duan, Z.-G. Wang // *Phys. Rev. A.* – 2017. - №96. – P.053811.

25. Chen, J., Ng, J., Lin, Z., Chan, C. T. Optical pulling force / J. Chen, J. Ng, Z. Lin, C. T. Chan // *Nature Photon.* – 2011. - №5. - P.531–534.

26. Nieto-Vesperinas, M., Sáenz, J. J., Gómez-Medina, R., Chantada, L. Optical forces on small magnetodielectric particles / M. Nieto-Vesperinas, J. J. Sáenz, R. Gómez-Medina, L. Chantada // *Opt. Express.* – 2010. - №18. - P.11428-11443.

СОВРЕМЕННОЕ МЕДИЦИНСКОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ НЕЙРОЭНДОХИРУРГИИ

Рачинских А.В., Колесникова О.В., Сивожелезова В.М

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

Популярность нейроэндохирургического оборудования в медицинской практике растет с каждым днем. В частности, такие аппараты нашли широкое применение в современной нейрохирургии. Благодаря высококачественному эндоскопическому изображению специалист может детально изучить не только нервы, но и мельчайшие сосуды, а также проанализировать их состояние, определить местонахождение патологии.

Нейроэндоскопическая хирургия – это новый вид оперативной техники, предполагающий выполнение хирургического вмешательства исключительно при помощи эндоскопа и специального эндоскопического инструментария, что позволяет нейрохирургу с помощью изображения на мониторе четко видеть расположение сосудов и нервов и находить патологический очаг. На рисунке 1 представлен современный аппарат для проведения нейрохирургической операции.[6]1]



Рисунок 1 – ангиограф.

Современные методы оперативного лечения в нейрохирургии с эндоскопическим доступом и контролем имеют следующие преимущества:

- меньшая травматичность операции;
- возможность выбора оптимальной манипуляции;
- более кратковременный восстановительный период и длительность пребывания пациента в стационаре;

- увеличение обзора оперируемого участка;
- обеспечение постоянного визуального контроля манипуляций на мониторе;
- снижение числа осложнений и риска рецидива;
- ограничение или исключение разреза коры мозжечка, поверхности ствола мозга.[6]2]

На рисунке 2 представлена инновационная разработка учёных в области нейрохирургии, робот-хирург.



Рисунок 2 – робот-хирург да Винчи.

Эндоскопические оперативные методики позволяют обнаружить и удалить опухоль, кисту в различных участках головного мозга. Доброкачественная опухоль больших размеров удаляется в некоторых случаях отдельными фрагментами, что снижает риск возникновения осложнений и повреждений близлежащей ткани мозга.[6]3]

В 2016 году объем мирового рынка нейрохирургических инструментов достиг \$1,85 млрд, подсчитали в исследовательской компании Data Bridge Market Research.

По прогнозам аналитиков, продажи этого оборудования в период с 2017 по 2024 года будут расти на 8,9% в год и достигнут \$3,66 млрд к концу этого отрезка времени. Основными драйверами рассматриваемого рынка эксперты называют технологический прогресс, рост числа пожилого населения и людей с лишним весом, растущая популярность неинвазивных методов и увеличение частоты геморрагического и ишемического инсульта. Основными проблемами для рынка специалисты считают недостаток высококвалифицированных неврологов и строгие административные ограничения. Крупнейшими производителями нейрохирургического оборудования в Data Bridge Market Research называют следующие компании:

- Medtronic;
- Stryker;
- Terumo;
- Penumbra;
- Covidien;
- Abbott;
- Merit Medical Systems;
- Johnson & Johnson;
- MicroPort Scientific;
- Medikitco;
- Boston Scientific;
- Sequent Medical.

В эндоскопии используют комплексы эндоскопического оборудования, которые включают в себя несколько типов приборов, выполняющих ту или иную функциональную процедуру.[6]4

Универсальные:

- 1) Эндоскопическая видеокамера, принимает изображение от подключенной к ней эндоскопа, обрабатывает и передает цифровой или аналоговый видеосигнал на подключенный медицинский монитор.
- 2) Медицинский монитор, выводит изображение, полученное от видеокамеры.
- 3) Осветитель, подает освещение в исследуемую или оперируемую полость, через подключенный к эндоскопу световодный кабель.
- 4) Аспиратор, выполняет функции отсоса жидкости из полостей.
- 5) Ирригатор, выполняет функции подачи жидкости, используемой для промывания органов и тканей.
- 6) Стойка аппаратная, на ней размещаются все приборы.

Специализированные:

- 1) Инсуффлятор, предназначен для подачи газа в полости с целью увеличение внутреннего пространства необходимого для выполнения процедуры.
- 2) Нагнетательные помпы (гистеропомпа, уропомпа, артропомпа), предназначены для подачи жидкости в полость, с целью увеличение внутреннего пространства необходимого для выполнения процедуры.
- 3) Электрохирургический аппарат, генерирует высокочастотный электрический ток, используется если при процедуре используются электрохирургические инструменты.

Значение эндоскопических манипуляций безгранично. Благодаря эндоскопии появилась уникальная возможность не просто обнаружить различные новообразования на ранних стадиях развития, но и удалить их, без серьезного оперативного вмешательства. Посредством нейроэндокхирургических устройств можно легко и безопасно подвести инструмент к необходимому месту, не задевая ближайшие участки головного мозга. [5]

Сведенная практически к нулю травматичность, быстрый восстановительный процесс, возможность ориентации в полости черепа и спинном мозге,

систематичная визуализация происходящего внутри полости на мониторе — все это и многое другое позволяют современные эндоскопические технологии.

Список литературы

1. Можаяев С.В.: Нейрохирургия. - М.: ГЭОТАР-Медиа, 2009
2. «Оборудование для нейроэндокхирургии» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://medbuy.ru/articles/oborudovanie-dlya-nejroendohirurgii> (01.05.2020)
3. Военно-медицинская академия; Под ред. В.Е. Парфенова, Д.В. Сви-стова: Лекции по нейрохирургии. - СПб.: Фолиант, 2004
4. «Оборудование для нейроэндокхирургии» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://breman.ru/news/oborudovanie-dlya-nejroendohirurgii> (04.12.2017)
5. Пастор Э.: Основы нейрохирургии. - Будапешт: АН Венгрии, 1985

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ВЫТЯНУТОГО ЗОЛОТОГО НАНОСФЕРОИДА В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

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

Центр лазерной и информационной биофизики,

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

В настоящее время золотые наночастицы, на поверхности которых адсорбированы макромолекулярные цепи, находят широкое применение при создании сенсоров на основе эффектов гигантского комбинационного рассеяния и поверхностного плазмонного резонанса, а также в различных устройствах наноэлектроники. Особый интерес вызывает использование гибридных наносистем, в которых на поверхности золотых наночастиц, имеющих форму вытянутых сфероидов, расположены макромолекулы полиэлектролитов, конформации которых могут изменяться под воздействием внешнего электрического поля, в том числе переменного [1-2].

Больцмановская аппроксимация полевого формирования равновесных конфигураций адсорбированной макроцепи

При помещении сфероидальной наночастицы в однородное электрическое поле E_0 , возникает поле, создаваемое соответственно заряженной или поляризованной частицей. Тогда к адсорбционному потенциалу $V_1(\xi)$ в сфероидальных координатах ξ, η добавляется потенциал $V_2(\xi, \eta)$ внешнего поля $E_0 r$ вместе с потенциалом V_p поля поляризованного сфероида. Адсорбционный потенциал поверхности сфероидальной наночастицы, в случае ван-дер-ваальсовой адсорбции может быть эффективно представлен комбинацией $V_1(\xi) = V_\infty(2a/d) - V_{attr}(\xi | (2a + \delta r_0)/d)$ простейших модельных потенциалов $V_\infty(2a/d)$ – «твердая стенка» и $V_{attr}(\xi | (2a + \delta r_0)/d)$ – пристенная потенциальная яма короткого радиуса действия δr_0 (a – длина большой полуоси сфероида). Тогда суммарная потенциальная энергия взаимодействующего поля поляризованного сфероида с сегментом макроцепи адсорбированного на нем полиэлектролита, несущим заряд q_1 , может быть записана в виде [2]:

$$\begin{aligned} V(\xi, \eta) &= V_1(\xi) + V_2(\xi, \eta) = \\ &= V_\infty(2a/d) - V_{attr}(\xi | 2(a + \delta r_0)/d) - q_1 E_0 r \cos \theta + V_p(\xi, \eta) \end{aligned} \quad (1)$$

Общая энергия взаимодействия результирующего электромагнитного поля с группой звеньев полиэлектролита ($\varepsilon^{(i)}(\omega)$ – диэлектрическая проницаемость Au):

$$V_2(\xi_1, \eta) = q_1 \varphi^{(e)}(\xi_1, \eta) = -q_1 \frac{E_0 d}{2ae} \eta \sqrt{(\xi_1 + a^2)} \times \left\{ 1 - \frac{[\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}](1 - e^2)}{\{\varepsilon^{(e)} + [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]n^{(x)}\}} \frac{1}{2e^3} \left[\ln \frac{\sqrt{1 + \xi_1/a^2} + e}{\sqrt{1 + \xi_1/a^2} - e} - \frac{2e}{\sqrt{1 + \xi_1/a^2}} \right] \right\}. \quad (2)$$

Согласно упрощенной модели формирования конформаций макроцепи при адсорбции на поляризованной сфероидальной наночастице, когда квазистационарное поле для равновесных конформаций макромолекулы учитывается в виде больцмановского фактора с энергией взаимодействия звеньев с электрическим полем, где $W(\xi, \eta) = \exp[-V_2(\xi, \eta)/kT]$ больцмановский фактор для цепи полиэлектролита с электрическим зарядом q_1 звена (группы звеньев) в поле поляризованного сфероида определяется как

$$W_q(\xi, \eta) = \exp \left\{ -\frac{q_1}{kT} \left[\varphi_0(\xi, \eta) \left(1 - A \int_{\xi_1}^{\infty} \frac{d\sigma}{(\sigma + a^2)^{3/2}(\sigma + b^2)} \right) \right] \right\}, \quad (3)$$

$$A = \frac{ab^2 [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]}{2 \{ \varepsilon^{(e)} + [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]n^{(x)} \}}, \quad \varphi_0 = -E_0 x = -E_0 \xi \eta \frac{d^2}{4\sqrt{a^2 - b^2}},$$

а для макроцепи полиамфолита с характерным электрическим дипольным моментом \mathbf{p} сегмента (единичного звена или группы звеньев):

$$W_p(\xi, \eta) = \exp \left\{ -\frac{\mathbf{p} \nabla}{kT} \left[\varphi_0(\xi, \eta) \left(1 - A \int_{\xi_1}^{\infty} \frac{d\sigma}{(\sigma + a^2)^{3/2}(\sigma + b^2)} \right) \right] \right\}. \quad (4)$$

При частотах ω существенно меньших характерных частот конфигурационных переходов фрагментов макроцепи предполагается, что заряженные звенья, или звенья с дипольным моментом \mathbf{p} будут безынерционно успевать следовать адиабатически медленным изменениям поля. На частотах конформационного резонанса $\omega \sim 10^{10} - 10^{11} \text{c}^{-1}$ будут происходить переходы, индуцированные полем. Изменение конфигураций в переменном поле будет представлять собой сложную кинетическую картину с характерными неравновесными особенностями. В области надкритических частот изменения поля $> 10^{11} \text{c}^{-1}$ смещения звеньев, вызванные действием поля, становятся малоамплитудными и не приводят к заметным масштабным изменениям конформаций. При частотах близких к частотам конформационного резонанса в качестве характеристики стационарной структуры опушки можно использовать среднее за период поля значение факторов (3) или (4), содержащие временные зависимости напряженности $E(t) = E_0 \exp(-i\omega t)$

$$\langle W \rangle = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} W(\xi, \eta | E(t)) dt = \langle \exp[-V_2(\xi, \eta) / kT] \rangle. \quad (5)$$

Молекулярно-динамическое моделирование

В данной работе представлены результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования в целом нейтральных полиамфолитных полипептидов на поверхности золотого наносфероида, поляризованного вдоль большой оси во внешнем электрическом поле, изменяющегося со сверхвысокой частотой. В случае его воздействия на вытянутый металлический наносфероид будет происходить перестройка конформационной структуры адсорбированного полипептида в соответствии с колебаниями плотности индуцированных данным полем зарядов на поверхности наносфероида.

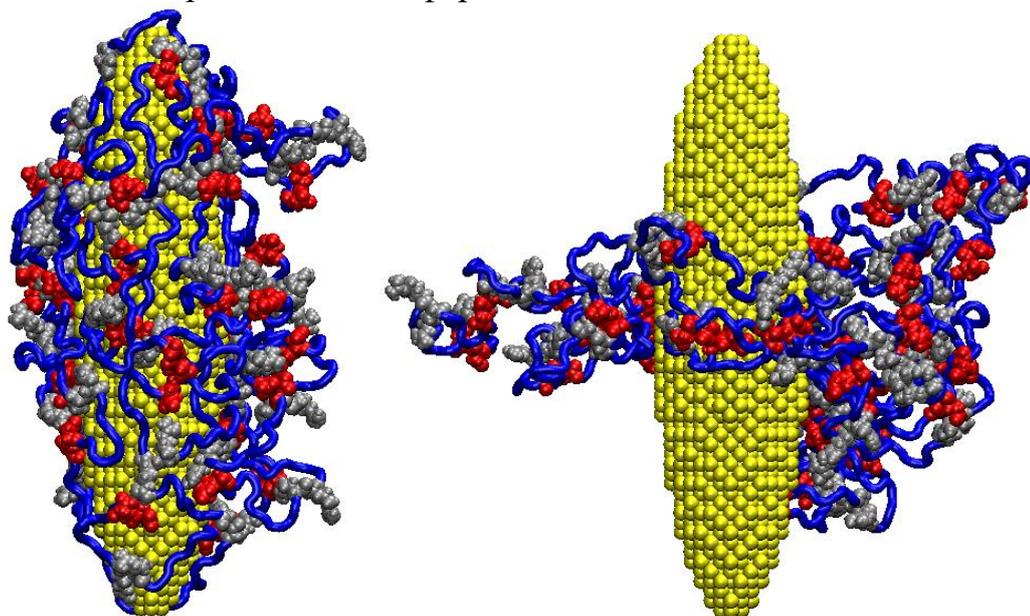


Рисунок 1. Стартовая конформация полипептида $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ (а), а также конформация по окончании МД-моделирования с периодическим изменением полярности наносфероида вдоль большой оси при температуре 300 К (б) (синяя трубка - звенья Ala, серым цветом изображены звенья Arg, а красным - Asp).

МД-моделирование было произведено с использованием программного комплекса NAMD 2.14 [3] с силовым полем CHARMM22 [4]. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1.2 нм с помощью функции сглаживания между 1.0 и 1.2 нм. Вся наносистема была помещена в куб с ребрами 24 нм, заполненный молекулами воды TIP3P.

Были рассмотрены три полиамфолитных полипептида с разным порядком расположения заряженных аминокислотных остатков: $(A_2DA_4RA_2)_{60}$, $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$, $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$, соответственно с 4, 8 и 16 нейтральными остатками между заряженными с разным знаком остатками в макроцепи. Предварительно были получены равновесные конформационные структуры для каждого рассмотренного полипептида, при которых он полностью обволакивал наносфероид. Локальное электрическое поле поляризованного вдоль большой

оси вытянутого наносфероида задавалось через изменение величины парциальных зарядов атомов на поверхности согласно [5]:

$$\sigma_p = \frac{\sigma_{\max} y}{a^2 \sqrt{\left(\frac{x^2 + z^2}{b^4} + \frac{y^2}{a^4}\right)}}, \quad (6)$$

где σ_p - поверхностная плотность зарядов, a - длина большой полуоси, направленной вдоль оси y , b - длина малых полуосей, $\sigma_{\max} = \frac{p_y}{V}$ - значение поверхностной плотности заряда на полюсе вытянутого поляризованного сфероида, p_y - дипольный момент сфероида, V - объем сфероида..

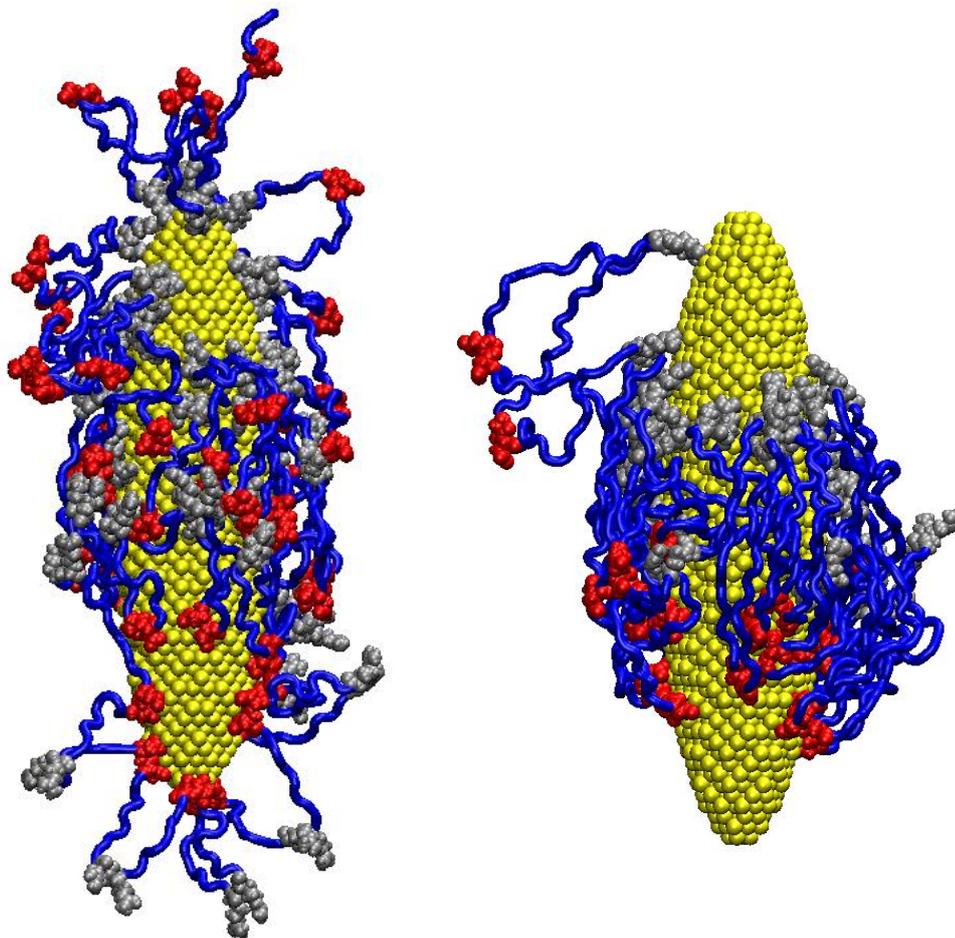


Рисунок 2. Конформации полипептидов $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ (а) и $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$ (б) по окончании МД-моделирования при температуре 900 К на временном отрезке последнего периода колебаний полярности наносфероида, когда он поляризован с дипольным моментом $-0.97 p_1^{\max}$ (а) и $-0.97 p_2^{\max}$ (б).

Были рассмотрены следующие пиковые значения индуцированного дипольного момента наносфероида: $p_1^{\max} \approx 39 \text{ кД}$ и $p_2^{\max} \approx 78 \text{ кД}$. В процессе МД-моделирования, плотности этих зарядов периодически изменялись во

времени по закону синуса с периодом колебаний $T = 2.4нс$ (частота колебаний 416.7 МГц) в течение 4 периодов колебаний

На рисунке 1а изображена стартовая конформационная структура полипептида $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$, при которой макроцепь полностью обволакивала золотой наносфероид. В результате МД-моделирования с температурой 300 К макромолекулярная опушка приобретала кольцообразную форму (рис. 1б). При этом чем больше было пиковое значение дипольного момента, тем тоньше было опоясывающее макромолекулярное кольцо. Такой эффект наиболее ярко был выражен у полипептидов $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ и $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$ с наибольшим числом нейтральных аминокислотных остатков Ala между положительными Arg и отрицательными Asp остатками в макромолекуле (рис. 3). На неполяризованной сфероидальной наночастице (рис. 3) атомы макромолекулы были распределены равномерно вдоль большой оси сфероида. Однако, чем больше было значение дипольного момента сфероидальной наночастицы, тем кривые линейной плотности атомов полипептидов были уже, а их пиковые значения в экваториальной области сфероида были больше.

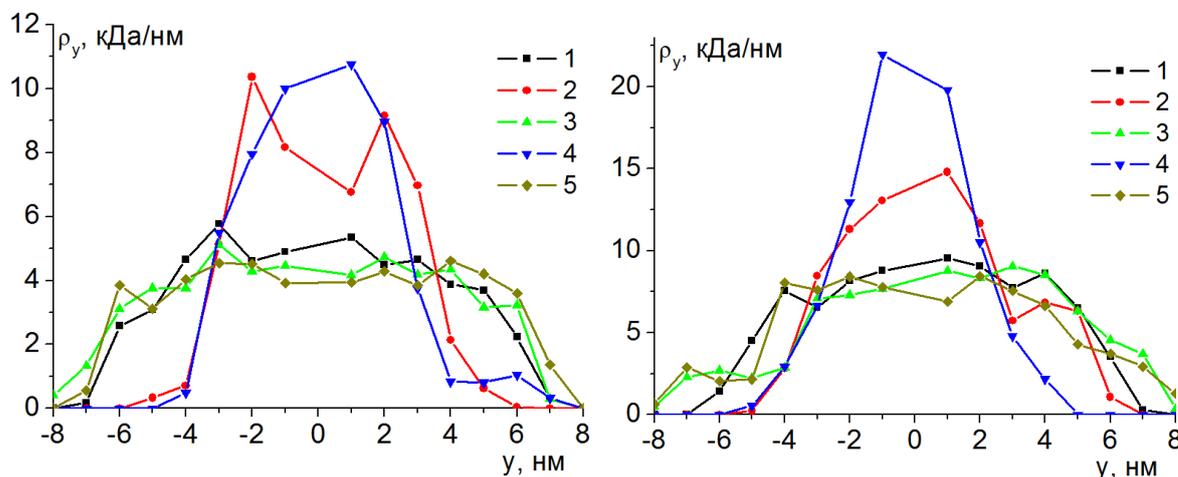


Рисунок 3. Распределения линейной плотности атомов полипептидов $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ (а) и $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ (б) вдоль большой оси сфероидальной золотой наночастицы по окончанию МД-моделирования с периодическим изменением полярности сфероидальной наночастицы с пиковым значением дипольного момента наносфероида p_1^{\max} (2 и 3) и p_2^{\max} (4 и 5) при температуре 300 К (2 и 4) и 900 К (3 и 5), а также распределение линейной плотности атомов полипептида в стартовой конформации (1).

На рисунке 4 изображены радиальные зависимости плотности атомов полипептидов в экваториальной области шириной 2 нм по окончанию МД-моделирования с периодическим изменением полярности наносфероида вдоль большой оси при температуре 300 К. При этом радиальные зависимости плотности атомов полипептидов с пиковым значением дипольного момента наносфероида p_1^{\max} были схожи радиальными распределениями плотности атомов в стартовой конформации макроцепи на поверхности неполяризованного наносфероида. Однако, при МД-моделировании с пиковым значением

дипольного момента наносфероида p_2^{\max} происходило набухание макромолекулярной опушки в экваториальной области наносфероида, причем тем сильнее, чем больше было расстояние между положительными и отрицательными аминокислотными остатками в макроцепи.

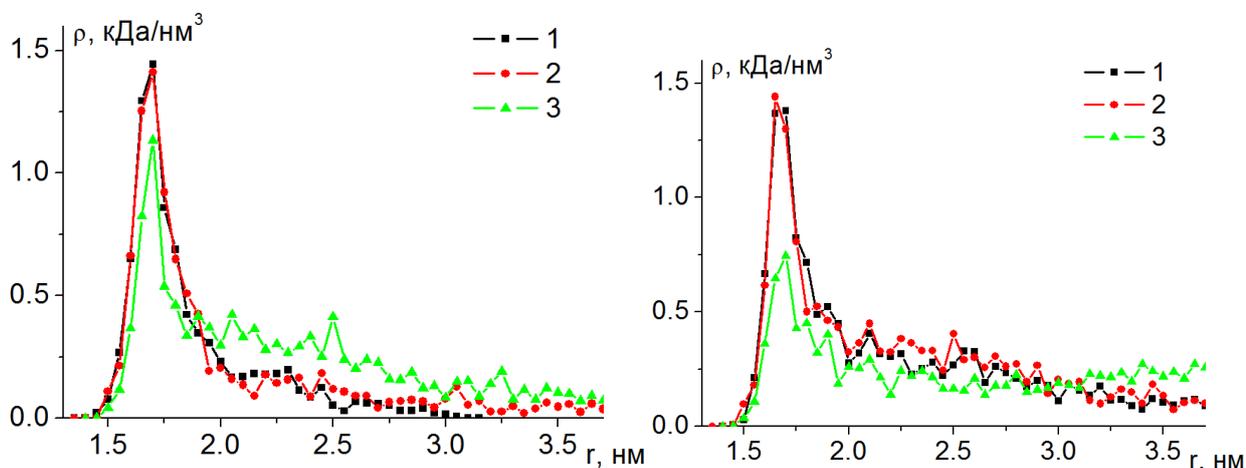


Рисунок 4. Радиальные зависимости плотности атомов полипептидов $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ (а), и $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$ (б) в экваториальной области наносфероида по окончанию МД-моделирования при 300 К с периодическим изменением полярности наносфероида вдоль продольной оси с пиковым значением дипольного момента p_1^{\max} (2) и p_2^{\max} (3), а также в стартовой конформации (1).

При МД-моделировании при температуре 900 К для полипептидов $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ и $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ (рис. 2а) опоясывающая макромолекулярная опушка в центральной области сфероида не образовывалась. Конформационная структура полипептида периодически изменялась в зависимости от величины наведенного дипольного момента наночастицы. В моменты времени, когда дипольный момент наносфероида был равен нулю, полипептид плотно обволакивал наносфероид схожим образом со стартовой конформацией (рис. 1а). А в моменты времени, когда дипольный момент наносфероида достигал пикового значения полиамфолитная опушка приобретала гантелеобразную форму (рис. 2а). При этом в центральной области наносфероида макромолекулярная опушка оставалась плотной, а в приполярных областях наблюдалось выбрасывание петель макроцепи вдоль нормали к поверхности. Таким образом форма макромолекулярной опушки изменялась дважды за период колебаний дипольного момента наносфероида от плотно обволакивающей всю сфероидальную наночастицу к гантелеобразной. На рисунке 3 видно, что распределения линейной плотности атомов полипептидов $(A_2DA_4RA_2)_{60}$ (а) и $(A_4R_2A_8D_2A_4)_{49}$ (б) при температуре 900 К имеют схожий вид с распределениями,

полученными для стартовых конформаций, что говорит о том, что смещения звеньев в центральную область наносфероида и образования кольцеобразной опушки не произошло.

Другой характер перестройки конформационной структуры при МД-моделировании с температурой 900 К наблюдался для полипептида $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$. В этом случае при переполяризации сфероидальной наночастицы происходило перемещение заряженных звеньев полипептида из одной половины сфероида в другую. На рисунке 2б изображена конформационная структура полипептида $A_8(A_8D_2A_{16}R_2A_8)_{27}A_8$ в момент времени, когда дипольный момент направлен вниз. Видно, что большая часть остатков Arg находится на поверхности наносфероида в верхней отрицательно заряженной половине, а большая часть остатков Asp в его нижней положительно заряженной половине. В экваториальной области наносфероида находятся преимущественно нейтральные аминокислотные остатки Ala. При смене направления дипольного момента наносфероида расположение заряженных звеньев адсорбированного полиамфолита менялось зеркально относительно экватора.

Такие изменения формы макромолекулярной опушки полиамфолита, адсорбированного на поверхности вытянутого золотого наносфероида, могут быть использованы при создании различных сенсорных устройств в биохимии и биомедицине, а также в ближнепольной оптической микроскопии.

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., Кучеренко М.Г./ Молекулярно-динамическое моделирование конформационных изменений макромолекул полиэлектролитов на поверхности заряженной или поляризованной вытянутой сфероидальной металлической наночастицы // Коллоидный журнал. 2021. Т. 83. №. 5. С. 557-571.
2. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. / Моделирование перестройки конформационной структуры полиамфолитов на поверхности вытянутой сфероидальной металлической наночастицы в переменном электрическом поле // Химия высоких энергий. 2021. Т. 55. №. 6. С. 423-435.
3. Phillips, J.C. Scalable molecular dynamics with NAMD / J.C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R.D. Skeel, L. Kale, K. Schulten // Journal of Computational Chemistry. – 2005. – V. 26. – P. 1781-1802.
4. MacKerell Jr., A. D. All-atom empirical potential for molecular modeling and dynamics studies of proteins / A. D. MacKerell Jr., D. Bashford, M. Bellott, R. L. Dunbrack Jr., J. D. Evanseck, M. J. Field, S. Fischer, J. Gao, H. Guo, S. Ha, D. Joseph-McCarthy, L. Kuchnir, K. Kuczera, F. T. K. Lau, C. Mattos, S. Michnick, T. Ngo, D. T. Nguyen, B. Prodhom, W.E. Reiher III, B. Roux, M. Schlenkrich, J. C. Smith, R. Stote, J. Straub, M. Watanabe, J. Wiorkiewicz-Kuczera, D. Yin, M. Karplus // Journal of Physical Chemistry B. – 1998. – V. 102. – P. 3586-3616.

5. Ландау Л.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

АКТУАЛЬНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ МЕДИЦИНСКИХ КАРТ

Кузнецова Ю.С., Тургаева С.А., Тумашев А.К.

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

В современном мире информация предоставляет реальную возможность управления всеми производственными процессами, эффективного взаимодействия по горизонтальным и вертикальным линиям связи, решения полного спектра задач в рамках планирования деятельности в любой сфере жизни. Одну из важнейших ролей информация играет и в здравоохранении.

Целью данной статьи является рассмотреть вопрос об актуальности электронных медицинских карт, трудностях их интеграции в систему здравоохранения и возможные варианты решения этих проблем.

Современные информационные технологии позволяют использовать в медицинских организациях электронные медицинские карты с целью повышения эффективности обслуживания. В коммерческих медицинских организациях при замене бумажной медицинской карты на электронный вариант требуется решить ряд проблем, таких как: информационная безопасность, обучение персонала и законность использования электронной карты.

Последние события, к которым относятся пандемия, режим самоизоляции подняли вопрос об актуальности электронных медицинских карт, на эту тему размышляли и раньше, но наиболее востребованным это стало сейчас.

Использование компьютерных технологий не ново для современного российского здравоохранения – информационные системы разной степени автоматизации используются во многих лечебно-профилактических учреждениях, как частных, так и государственных. Но стоит отметить, что процесс автоматизации долгое время был хаотичен, а единые требования к содержанию и структуре медицинских информационных систем отсутствовал. Ситуация начала стремительно изменяться с конца 2010 года со стартом разработки единой государственной информационной системы в сфере здравоохранения (ЕГИСЗ).

ЕГИСЗ – национальная информационная система, разработанная для обеспечения информационной поддержки организаций системы здравоохранения, а также граждан в рамках процессов управления медицинской помощью и ее непосредственного получения [1]. Все вопросы по разработке системы регулируются Концепцией создания единой государственной информационной системы в сфере здравоохранения, утвержденной приказом Министерства здравоохранения и социального развития Российской Федерации от 28 апреля 2011 № 364. В апреле 2015 года Министерство здравоохранения и социального развития Российской Федерации опубликовало проект дорожной карты по развитию ЕГИСЗ в 2015-2018 годах. В данном документе прописаны сроки и контрольные показатели по таким направлениям как инфраструктурное и прикладное обеспечение развития ЕГИСЗ, организационное и нормативное обеспечение. Все

региональные медицинские информационные системы субъектов РФ должны соответствовать утвержденным Минздравом требованиям.

Остановимся подробнее на понятии Медицинская информационная система (МИС). МИС – это комплексная автоматизированная информационная система, которая объединяет в себе электронное расписание, электронные записи о пациенте, его электронную историю болезни, данные медицинских исследований, маркетинговую, экономическую, финансовую и административную информацию. Сейчас один из важных ключевых факторов МИС является возможность ее интеграции, заключающаяся в способности работать совместно с самыми разнообразными внешними информационными системами, автоматически обмениваясь с ними информацией в электронном виде

Говоря об использовании МИС частными медицинскими учреждениями, важно отметить, что уровень их компьютеризации напрямую зависит от финансовых возможностей и реальных потребностей. Сеть медицинских клиник нуждается в полноценных МИС со всеми ее разделами, тогда как более мелким клиникам будет достаточно для использования одной автоматизированной регистратуры. Одним из наиболее сложных для внедрения блоков МИС является «Электронная медицинская карта» пациента, которая должна полностью заменять бумажный документооборот в медицинском учреждении.

Электронная медицинская карта пациента (ЭМК) – является основой медицинской информационной системы, это единое хранилище медицинской информации, предназначенное для ведения, хранения, поиска и выдачи по информационным запросам (в том числе и по электронным каналам связи) сведений по всем случаям обращения пациента за медицинской помощью в лечебное учреждение.

Важно отметить положительный вклад, которое влечет за собой внедрение ЭМК:

1. Электронная карта не потеряется и не будет забрана пациентом домой;
2. Отпадает необходимость поиска карты и передачи ее сотрудником регистратуры тому или иному доктору;
3. Упрощается работа врача на приеме: увеличивается скорость заполнения медицинской документации и уменьшается время, затраченное на поиск нужной информации в самой карте пациента
4. Обеспечение конфиденциальности медицинских данных;

При внедрении ЭМК любая медицинская организация сталкивается с определенными трудностями. Проанализировав весь процесс внедрения от начала, до конца, можно выделить три основные проблемные области:

1. Обучение медицинского персонала;
2. Обеспечение конфиденциальности данных;
3. Законность ведения электронной медицинской карты.

Обучение персонала может стать одной из самых больших проблем при внедрении любого нового программного продукта.

К врачу, ведущему прием, ежедневно обращается множество пациентов. Далеко не каждый врач, особенно в силу своего возраста, готов тратить большое

количество своего времени и сил на обучение новым компьютерным технологиям, особенно при отсутствии должной мотивации и разъяснений со стороны руководства. Важную роль в данном вопросе также играет твердая и последовательная позиция главного врача клиники.

Особое внимание необходимо уделить объяснению возможностей, которые предоставляют современные средства автоматизации, медицинскому персоналу.

Особенностью информации в области здравоохранения является ее конфиденциальность. Права граждан на конфиденциальность о факте обращения за медицинской помощью и передаваемых ими при обращении за сведениями установлены Основами законодательства РФ об охране здоровья граждан от 22.07.93 №5488-1 (Постановление Правительства Российской Федерации). Данные, с которыми работает ЭМК, являются персональными данными и могут составлять врачебную тайну.

Ключевым фактором при внедрении ЭМК должно стать обеспечение целостности базы данных и возможность слежения за состоянием системы и ее безопасностью [3]. Особое внимание при внедрении должно уделяться разделению доступа пользователей к различным фрагментам данных и защите информации от несанкционированного доступа, а также от утраты и искажения данных.

Помимо различных вариантов технических и программных средств по защите информации необходимо уделить внимание и вопросу по разработке пакета внутренних регламентирующих документов организации.

Еще одна проблема, связанная с внедрением электронной медицинской карты – это еще законность. В настоящее время одним из наиболее весомых препятствий для действительно массового внедрения ЭМК является вопрос о том, имеют ли право медицинские работники вести медицинскую документацию в электронном виде?

Сегодня на практике это приводит к тому, что медицинские организации стоят перед выбором:

1. Вообще отказываться от ведения своих записей в медицинской информационной системе (МИС), мотивируя это тем, что нет такого нормативно-правового акта (НПА), например, приказа Минздрава или пункта в федеральном законодательстве об основах охраны здоровья граждан, который явно бы разрешал применение ЭМК вместо бумажных документов. Так как явного разрешения со стороны правоохранительных органов нет, то и использовать ЭМК нельзя.

2. Вести электронные медицинские записи в МИС, основываясь на мнении, что явного запрета на ЭМК нет - а значит, использовать ее можно. Но в таком случае записи в ЭМК не являются юридически значимыми, поэтому их необходимо распечатывать и вручную подписывать, получая таким образом бумажную документацию, что уже своего рода автоматизация медицинской деятельности, сопряженная с постоянными затратами на печать документов и хранение бумажных архивов.

Рассмотрев вопрос законности ЭМК, можно отметить следующее:

С 2008 года действует Национальный стандарт «Электронная история болезни. Общие положения» (ГОСТ Р 52636-2006) [2]. Однако, статья 12 Федерального закона от 27.12.2002 № 184-ФЗ (ред. от 23.07.2013) «О техническом регулировании» среди принципов стандартизации указывает на добровольность применения документов в области стандартизации. В законе «Об обязательном медицинском страховании в РФ» ЭМК упомянута только один раз (в статье о финансировании).

В конце апреля 2015 года Минздрав опубликовал проект дорожной карты по развитию ЕГИСЗ в 2015-2018 гг.

В конце ноября 2013 г. письмом №18-1/1010 Министра здравоохранения В.И. Скворцовой был утвержден и разослан в регионы документ «Основные разделы электронной медицинской карты». В документе сформулированы требования к структуре ЭМК и электронной персональной медицинской записи, как элементу электронной медицинской карты. Однако, данный документ не имеет пока статуса нормативного правового акта, а, следовательно, не имеет юридической силы.

В 2014 году в региональной нормативно-правовой базе появились первые НПА, упоминающие электронную медицинскую карты, которые не столько регламентируют порядок работы и ведения ЭМК, сколько просто фиксируют требования к ведению ЭМК.

В отечественной практике ЭМК и так уже довольно активно используются коммерческими медицинскими учреждениями, которые понимают свои выгоды. Эти выгоды перекрывают возможные риски и негативные последствия от использования ЭМК. Риски снижаются за счет разработки внутренних нормативных документов, детально регламентирующих работу в МИС. Таким образом, практика сегодня такова: те МО, которые видят свой интерес во внедрении ЭМК, вполне могут внедрять их, не дожидаясь дополнительных указаний и разрешений, т.к. все, что не запрещено – разрешено с юридической точки зрения.

К примеру, в Москве начали пробовать переходить к единой медицинской информационно-аналитической системе (ЕМИАС) [4]. Поликлиники города постепенно начинают переход на ведение медицинских документов в электронном виде в ЕМИАС – протоколы осмотров, результаты исследований, сведения о прививках и многие другие. Они будут экспериментировать на базе двух детских поликлиник – в них будут использоваться электронные медицинские карты без дублирования на бумажном носителе. Это позволит им отладить все процессы, а с октября они планируют постепенно начать распространять современный формат ведения истории болезни и на другие детские поликлиники Москвы. По итогам будут также принимать решение и о внедрении проекта во взрослой поликлинической сети.

В данный момент обязать все подряд МО переходить на использование ЭМК вряд ли реально – очень многие к этому не готовы ни в материально-техническом, ни в организационном, ни в кадровом отношении. У государства нет денег, чтобы всех сразу профинансировать, поэтому политика государства

должна заключаться не в том, чтобы пытаться сделать невозможное, а в том, чтобы создать условия для тех МО, которые хотят их использовать.

Такая работа заключается в следующем:

- стимулировать процесс перехода на ЭМК;
- в приказном порядке (подкрепленном, естественно, соответствующими ресурсами) начать переход на ЭМК в отдельных сферах медицины - там, где это даст наибольшую отдачу. К примеру, такими сферами являются, медицинское обслуживание военнослужащих и сотрудников силовых ведомств и т. п.
- Минздраву РФ лучше с самого начала установить базовые требования к ЭМК и их использованию.

Одна из самых актуальных проблем в части ведения ЭМК с точки зрения нормотворчества – исполнение требований законодательства о персональных данных. Кроме того, внедрение облачных информационных медицинских систем также заставляет медицинскую отрасль решать ряд правовых вопросов [5].

Не урегулирован и вопрос об организации хранения электронных документов. Учитывая, что сроки хранения значительной части медицинской документации длительные, нерешенность этого вопроса создает один из самых серьезных рисков.

Поскольку с долговременным хранением электронных документов в стране вообще пока ничего не сделано, то Минздраву также стоило бы обратить на него внимание, и, может быть, проявить определенную правовую инициативу.

Еще одной проблемой является то, что сейчас имеется ряд НПА, согласно которым некоторая медицинская документация в любом случае должна быть оформлена на бумаге, либо требования к ее ведению составлены так, что иного варианта, как вести ее в бумажном виде, нет. Например – это обязательная распечатка льготных рецептов, распечатка листков временной нетрудоспособности, ведение температурных листов или листов почасового наблюдения пациентов ОАР и т.д. Вряд ли департаменту информационных технологий и связи удастся в короткие сроки добиться изменения таких НПА, т.к. это огромная и сложная работа, требующая привлечения различных департаментов и профильных специалистов Минздрава.

Учитывая, что разработка нормативно-правовых документов требует много времени, которого у Министерства нет, разумно подготовить методические рекомендации (они не должны быть большими), содержащие основные установки по ведению ЭМК. В частности, в этих методических рекомендациях должны быть отражены следующие вопросы:

- термины и определения, имеющие непосредственное отношение к ЭМК;
- состав ЭМК;
- рекомендации по внедрению ЭМК в работу медицинской организации (МО);
- состав документов, которые обязательно следует вести в бумажном варианте, распечатывая их из МИС;

Очень полезно организовать встречи с руководителями и ведущими специалистами тех МО, которые уже начали внедрение ЭМК, и на их положительных

и отрицательных примерах накапливать реальный опыт внедрения, обобщать его и активно распространять среди всех медицинских учреждений страны.

Проанализировать и активно распространять информацию о зарубежном опыте внедрения ЭМК, в том числе и о проблемах, возникающих у наших зарубежных коллег. На основе собираемой информации желательно постоянно уточнять методические рекомендации, с тем, чтобы через какое-то время на их основе можно было бы разработать работающие нормативные документы для отрасли.

Список литературы

1. Зингерман Б.В., Шкловский-Корди Н.Е.// Электронная медицинская карта и принципы ее организации. [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://novsu.ucoz.ru/publ/ozz/oblastnye_medicinskie_uchrezhdenija_oblastnaja_bolnica_ee_zadachi_struktura_funkcii/2-1-0-106.

2. ГОСТ Р 52636-2006 «Электронная история болезни. Общие положения». [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/1200048924>.

3. Федеральный закон об информации, информационных технологиях и о защите информации. Электронный ресурс – Режим доступа: http://www.consultant.ru/document/cons_doc_LAW_61798/.

4. «Поликлиники начинают переход на ведение медицинских документов в электронном виде». [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.mos.ru/news/item/86728073/>

5. Гусев А.В., Храпцовская Н.А., "Электронные Офисные Системы" (ЭОС)// «О правомочности ведения электронной медицинской карты (ЭМК)». [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://www.kmis.ru/media/files/o_pravomochnosti_vedeniya_elektronnoy_medicinskoy_karty.pdf.

КОНТЕКСТНЫЙ МЕТОД В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТА-ФИЗИКА ОСНОВАМ АСТРОНОМИИ

Кучеренко М.А., канд. пед. наук

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

«Основы астрономии» - новый факультативный курс для студентов направлений подготовки 03.03.02 [Физика](#), 03.03.03 Радиофизика и 02.03.04 [Биотехнические системы и технологии](#). Целостная система методических приемов и средств обучения астрономической науке находится пока еще на стадии формирования, но с осознанной опорой на выбранные целевые установки, методологические и педагогические подходы, с ориентацией на специфику профессионального образования учащихся физического факультета университета.

Курс физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова с аналогичным названием читается как межфакультетский он-лайн курс с 2013г. Он предназначен студентам всех специальностей, кроме будущих профессиональных астрономов. Для его усвоения, как подчеркивают авторы, достаточно подготовки учащихся по физике и математике в объеме программы средней школы. Программа курса на три зачетных единицы ориентирована на усвоение базовых астрономических знаний, достижений и современных проблем астрономической науки [1]. Общеуниверситетский факультатив «Основы астрономии» для учащихся естественнонаучных и гуманитарных направлений подготовки, имеющий отчетливо просветительский характер, предлагается и в Национальном исследовательском университете «Высшая школа экономики» [2].

Рассмотрим методические особенности обучения астрономическим знаниям в Оренбургском государственном университете.

Методика преподавания естественнонаучных дисциплин, как заявлено в [3], всегда должна решать три задачи:

- для чего учить? (целеполагание и задачи)
- чему учить? (содержание и структура)
- как учить? (приемы, средства, методы, принципы, подходы, технологии)

В связи с этим цель обучения студентов физического факультета ОГУ основам астрономии мы определяем как выявление механизмов существования Вселенной на различных структурных уровнях на основе вузовской подготовки учащихся в области математики и физики.

Ключевыми подходами в обучении нами выбраны герменевтический подход и элементы педагогики сотрудничества. Необходимыми и достаточными принципами при этом являются психолого-дидактические принципы наглядности, сознательности (по В.В. Давыдову: деятельности), прочности знаний, системности, доступности и научности [4].

Герменевтический подход, направленный на понимание учебного текста как надления смыслом новой для обучаемого знаково-символической системы

посредством интерпретации, реализуется посредством герменевтического методологического стандарта. Данный стандарт включает, кроме психологических и семиотических приемов, вопросно-ответных методик, принципов герменевтического круга, диалога и конгениальности, и контекстный метод (или принцип контекстуального подхода в понимании текста как объекта культуры) [5], [6], [7], [8].

Проиллюстрируем реализацию контекстного метода с помощью разработанной нами учебной матрицы лекционного занятия по теме «Тяготение в Солнечной системе» для студентов-физиков (таблица 1).

Таблица 1 - Учебная матрица по теме «Тяготение в Солнечной системе»

Цель учебного занятия	Понимание учащимися роли тяготения в Солнечной системе на примере: движения планет и их спутников; возмущенного движения планет и их спутников; приливов и отливов на Земле <i>Расширение контекста: приливные явления в мире звезд и галактик (аудиторная и самостоятельная работа студента)</i>
Актуализация знаний-межпредметный контекст (физика; математика)	Закон всемирного тяготения Законы динамики Ньютона Неинерциальная система отсчета Возмущающее ускорение Возмущающая сила Задача трех тел Элементы векторной алгебры: действия с векторами
Минимальный контекст (место и значение учебного материала в рамках предмета)	Решение задач небесной механики: определение траектории небесных тел; эфемериды; движение и устойчивость небесных и искусственных тел
Макроконтекст (место учебного материала в естественнонаучном знании; анализ смысложизненных ситуаций; иллюстрация примерами и обобщениями)	<i>Связь:</i> Законы Кеплера - Закон всемирного тяготения Ньютона Задача трех тел и запуск искусственных спутников Земли
Сверхконтекст (генетико-историческое, структурно-содержательное изложение материала; обнаружение существенных связей между блоками мироздания – Вселенной)	Универсальность тяготения на всех структурных уровнях Вселенной Система мира Птолемея – Система мира Коперника - Законы Кеплера – Законы механики - Закон всемирного тяготения Ньютона – Задача двух тел - Задача трех и более тел
Основная литература	1. Бакулин П.И., Кононович Э.В., Мороз В.И. Курс общей астрономии: Учебник. – М.: Наука, 1983. – С.71-112. 2. Сурдин В.Г. Астрономия. Популярные лекции. – М.: Изд-во МЦНМО, 2019. – С.56-76; С.211-255. 3. Астрономия: век XXI / Ред.-сост. В.Г. Сурдин. – Фрязино: «Век 2», 2019. – С.218-264.

Обратим внимание на то, что особенностью обучения студентов-физиков основам астрономии мы считаем не «описательный», фактологический подход, а научение посредством строгого анализа различных астрономических явлений с помощью фундаментальных физических законов и знаний различных разделов математики (векторной алгебры; сферической тригонометрии; дифференциального и интегрального исчисления).

Насколько эта направленность обучения усматривается самими студентами? Ниже мы приводим выборочные, существенные для тематики обсуждения, результаты письменного опроса студентов 4-х групп физического факультета, изучивших курс «Основы астрономии» в осеннем семестре 2021-2022 у.г. (всего 45 учащихся).

Таблица 2 – Результаты письменного опроса студентов физического факультета, изучивших курс «Основы астрономии»

Вопрос анкеты	Варианты ответа - % участников анкетирования, выбравших вариант ответа
1. Если бы мне предоставили возможность выбора факультативного курса для изучения, то Я бы	Выбрал курс «Основы астрономии» - 67 Не выбрал курс «Основы астрономии» - 8 Затрудняюсь ответить – 25
2. Считаете ли Вы важным для понимания окружающего мира изучение основ астрономии в вузе?	Да - 87 Нет - 5 Затрудняюсь ответить – 8
3. Для того, чтобы понимать содержание курса «Основы астрономии», нужно знать курс общей физики вуза	Согласен - 64 Не согласен- 23 Затрудняюсь ответить - 13
4. Знание дифференциального и интегрального исчисления и векторной алгебры помогает мне в освоении курса «Основы астрономии»	Да - 56 Нет- 23 Затрудняюсь ответить - 21

Анализируя ответы студентов на приведенные в таблице 2 вопросы, можно заключить следующее:

1. У большинства студентов существует важная мотивационная составляющая обучения – понимание мировоззренческой и развивающей направленности курса «Основы астрономии».

2. Учащиеся осознают важность физико-математических знаний для усвоения содержания науки, основным методом которой долгое время было наблюдение.

3. Почти треть студентов - анкетлируемых, прослушавших факультативный курс, затруднились в своем ретроспективном выборе.

Последнее обстоятельство, очевидно, определяет для участников двустороннего и взаимообусловленного образовательного процесса конкретные задачи

совершенствования как самостоятельной работы студентов, так и лекционных, и практических занятий на основе:

1. Создания учебно-методического пособия «Основы астрономии для физиков».

2. Подготовки задачника «Основы астрономии для физиков: задания и упражнения».

3. Дополнение аудиторных занятий и самостоятельной работы студентов самостоятельными астрономическими наблюдениями, тематическими лекциями и занятиями в планетарии Оренбургского государственного университета.

Вместе с тем, методика преподавания основ астрономии студентам-физикам, выстроенная на основе герменевтических средств, возрастных особенностей и субъектного опыта учащихся, может и должна быть дополнена принципами индивидуальных образовательных технологий (заявлены в [9]) и перевернутого обучения для обеспечения их прочными знаниями и глубоким пониманием учебной информации.

Список литературы

1. Открытое образование. Основы астрономии. Режим доступа: <https://openedu.ru/course/msu/BASTRO/>

2. Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики». Основы астрономии. Режим доступа: <https://www.hse.ru/edu/courses/341838258>

3. Основы методики преподавания физики /В.Г. Разумовский, А.И. Бугаев, Ю.И. Дик. – М.: Просвещение, 1984. –С.25-34.

4. Педагогика и психология высшей школы: Учеб. пособие. – Ростов н/Д.: Феникс, 2002. – С.69-73.

5. Словарь философских терминов /Научная редакция профессора В.Г. Кузнецова. – М.: ИНФРА-М, 2007. – С. 103-111.

6. Кузнецов, В.Г. Герменевтика и гуманитарное познание / В.Г. Кузнецов. - М.: Изд-во МГУ, 1991. – 191с.

7. Кучеренко, М.А. Стратегии смыслового чтения учебного текста по физике / Кучеренко М.А. – Оренбург: ОГУ, 2014. – 248с.

8. Вялых, В.А. Философия и технология образовательного процесса системного типа / В.А. Вялых. – Оренбург: Оренбургский ИУУ, 1995. – 118с.

9. Абакумова И.В., Финько М.В., Князева Ю.С. Трансформация высшего образования в условиях глобализации: новые форматы и альтернативные модели // Вестник высшей школы. – 2021.- №9.- С.7-17.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ ПЛАЗМОННЫХ И МАГНИТНЫХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ С МАКРОМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОПУШКОЙ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,

Кручинин Н. Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент,

Неясов П.П., Алимбеков И.Р.

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

В ряде наших работ [1-3] рассматривались молекулярные процессы в окрестности наносфероидов с адсорбированной макромолекулярной цепью, образующей рыхлую опушечную структуру. Малые фотоактивированные молекулы, входящие в состав опушки распределены в ней по закону, отражающему сформированную в пространстве плотность полимерных звеньев. При наличии электрического поля и зарядов на сегментах макроцепи появляется возможность управления локальной плотностью атомов опушки этим полем [4-5]. Интерес представляет изучение поляризации наносфероидов в электрическом поле молекулярного диполя, которое в случае достаточной удаленности диполя от сфероидальной наночастицы может приближенно считаться однородным, а при близком расположении диполя у поверхности НЧ однородность результирующего поля не имеет места ни внутри сфероида, ни в пространстве снаружи. Характерным каналом размена энергии для возбужденной молекулы, внедренной в структуру макроопушки является ее безызлучательный перенос к молекуле – акцептору, либо локализованному на полимерной цепи, либо способному к диффузионному перемещению между звеньями, приводящему к эффективному сближению реагентов в опушечном слое. Перестройка пространственной структуры такого слоя, вызванная действием электрического поля, деформированного частицей, приводит к изменению условий протекания молекулярной реакции, т.к. вблизи поверхности и напряженность поля и плотность сегментов цепи имеют одну величину, а при удалении на периферию опушки – совсем другую. Особая ситуация возникает, когда проводящий сфероид несет на себе нескомпенсированный электрический заряд q определенного знака [5]. Тогда поле вне частицы модифицируется, изменяя соответствующим образом конформацию макроцепи и распределение плотности ее звеньев. Разновидностью межмолекулярного переноса электронной энергии является взаимная аннигиляция электронных возбуждений: перекрестная – между квазичастицами разного сорта, либо внутривидовая – между односортными экситонами. Может иметь место, например, синглет- синглетная (S-S), или триплет-триплетная (T-T) аннигиляция экситонов макроцепи, либо локализованных на молекулах-реагентах синглетных или триплетных электронных возбуждений этих молекул. Во всех случаях электрическое поле НЧ оказывает влияние на формирование величин плотностей реагентов, следующих пространственному распределению плотности звеньев.

Для описания поля заряженных или поляризованных осесимметричных эллипсоидальных тел вращения, для которых полуоси $b=c$, используют эллипсоидальные координаты $\xi_1 = (r_1 + r_2)^2 / 4 - a^2$, $\eta_1 = (r_1 - r_2)^2 / 4 - a^2$, φ , где r_1, r_2 – фокальные радиусы, a – длина большой полуоси вытянутого сфероида. Для *вытянутого* эллипсоида вращения $a > b = c$. Тогда эксцентриситет сфероида $e = \sqrt{1 - b^2 / a^2}$. Связанные с эллипсоидальными координатами ξ_1, η_1 вытянутые сфероидальные координаты (ВСК) ξ, η заданы соотношениями $\xi = (r_1 + r_2) / d$, $\eta = (r_1 - r_2) / d$ через фокальные радиусы r_1, r_2 и фокусное расстояние d . Тогда области определения ВСК $\xi \in [1, \infty)$, $\eta \in [-1, 1]$, $\varphi \in [0, 2\pi)$. Угол φ – полярный, в плоскости, перпендикулярной оси сфероида, характеристики поля от этого угла не зависят. Связь между эллипсоидальными и сфероидальными координатами $\xi_1 = \xi^2 d^2 / 4 - a^2$, $\eta_1 = \eta^2 d^2 / 4 - a^2$. Для точек поверхности сфероида, т.е. при $\xi = 2a / d$ получаем $\xi_1 = 0$.

Потенциал $\varphi_a^{(e)}(\mathbf{r})$ поля электронейтрального в целом, но поляризованного внешним полем \mathbf{E}_0 эллипсоида на больших расстояниях от него, т.е. в асимптотике, представляется в виде суммы потенциалов однородного поля \mathbf{E}_0 и потенциала эффективного электрического диполя с наведенным моментом \mathcal{P}

$$\begin{aligned} \varphi_a^{(e)}(\mathbf{r}) &= -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + \mathcal{P} \mathbf{r} / r^3 = \\ &= -\mathbf{E}_0 \mathbf{r} + \frac{ab^2}{3} \left(\varepsilon^{(i)}(\omega) / \varepsilon^{(e)} - 1 \right) \left[\tilde{\mathbf{1}} - \tilde{\mathbf{n}} \left(1 - \varepsilon^{(i)}(\omega) / \varepsilon^{(e)} \right) \right]^{-1} \mathbf{E}_0 \mathbf{r} / r^3, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\varepsilon^{(i)}(\omega)$ и $\varepsilon^{(e)}$ – диэлектрические проницаемости металла НЧ и окружающей частицу среды, соответственно; $\tilde{\mathbf{n}}$ – симметричный второго ранга тензор деполяризации сфероида. Для *вытянутого* эллипсоида вращения выполняется следующее соотношение между длинами его полуосей: $a > b = c$.

Вблизи же поверхности сфероида, помещенного в однородное внешнее поле (переменное, произвольной частоты ω , начиная от низких ее значений и вплоть до значений частот оптического диапазона, но при этом все еще удовлетворяющее условию квазистационарности), ориентированное вдоль его оси вращения $2a$, совмещенной с осью x , потенциал может быть записан как решение уравнения Лапласа $\nabla^2 \varphi(\xi, \eta) = 0$ для потенциалов и $\varphi^{(e)}(\xi, \eta)$ статического и квазистационарного поля в вытянутых сфероидальных координатах. Вместе с граничными условиями $\varphi_q(\xi_1 = 0) = \text{const}$ и $\varphi_q(\xi_1 \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ для области вне заряженного сфероида, и соответствующими условиями на поверхности и вдали от нее $\varphi^{(e)}(\xi_1 \rightarrow \infty, \eta)$ для нейтрального сфероида, поляризованного в однородном поле, можно получить точное решение задачи для потенциала квазистационарного поля, которое выражается через элементарные функции [6].

Потенциал статического поля вне сфероида с зарядом q

$$\varphi_q(\xi_1) = \frac{q}{\sqrt{a^2 - b^2}} \ln \frac{\sqrt{\xi_1 + a^2} + \sqrt{a^2 - b^2}}{\sqrt{\xi_1 + a^2} - \sqrt{a^2 - b^2}}. \quad (2)$$

Или в сфероидальных координатах

$$\varphi_q(\xi) = \frac{q}{\sqrt{a^2 - b^2}} \ln \frac{\xi d + 2\sqrt{a^2 - b^2}}{\xi d - 2\sqrt{a^2 - b^2}} = \frac{q}{ae} \ln \frac{\xi + 1}{\xi - 1}. \quad (3)$$

Потенциал $\varphi^{(e)}(\xi, \eta | t)$ квазистатического поля вне незаряженного, но поляризованного во внешнем переменном поле $E_0(t) = E_0 \exp(-i\omega t)$ сфероид в сфероидальных координатах принимает вид

$$\begin{aligned} \varphi^{(e)}(\xi, \eta | t) = & -E_0(t) \xi \eta \frac{d^2}{4\sqrt{a^2 - b^2}} \times \\ & \times \left\{ 1 - \frac{[\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]}{\{\varepsilon^{(e)} + [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]n^{(x)}\}} \frac{(1 - e^2)}{2e^3} \left[\ln \frac{\xi d / (2a) + e}{\xi d / (2a) - e} - \frac{2e}{\xi d / (2a)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь, в (4) $n^{(x)}$ – главное значение тензора \vec{n} деполяризации сфероид, при ориентации его оси вращения вдоль декартовой оси x . Оставляя в стороне энтропийные эффекты [1-2], [5], здесь, при формировании равновесных конформаций макромолекулы будем учитывать квазистатическое поле (4), посредством больцмановского фактора $W(\xi, \eta) = \exp[-V_2(\xi, \eta) / kT]$ с энергией $V_2(\xi, \eta) = q_1 \varphi^{(e)}(\xi, \eta | t)$ взаимодействия звеньев цепи полиэлектролита с электрическим полем поляризованного сфероид и тепловой энергией kT

$$W(\xi, \eta) = \exp \left\{ -\frac{q_1}{kT} \left[\varphi_0(\xi, \eta) \left(1 - \frac{A}{a^3 e^3} \left[\ln \frac{\sqrt{1 + \xi / a^2} + e}{\sqrt{1 + \xi / a^2} - e} - \frac{2e}{\sqrt{1 + \xi / a^2}} \right] \right) \right] \right\}, \quad (5)$$

$$\varphi_0 = -E_0 x = -E_0 \xi \eta \frac{d^2}{4\sqrt{a^2 - b^2}} = -E_0 \eta \sqrt{(\xi + a^2)},$$

где постоянная A

$$A = \frac{ab^2 [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]}{2 \{ \varepsilon^{(e)} + [\varepsilon^{(i)}(\omega) - \varepsilon^{(e)}]n^{(x)} \}}. \quad (6)$$

При переходе к статическому полю $A \rightarrow A_0$, и для константы A_0 получаем

$$A_0 = \frac{ab^2}{2n^{(x)}} = \frac{ab^2e^3}{(1-e^2) \left[\ln \frac{1+e}{1-e} - 2e \right]}.$$

и формула (4) переходит к потенциалу внешнего результирующего статического поля в окрестности проводящего наносфероида

$$\varphi_{stat}^{(e)}(\xi, \eta) = -E_0 \xi \eta \frac{a}{e} \left(\frac{d}{2a} \right)^2 \left\{ 1 - \frac{1}{\left[\ln \frac{1+e}{1-e} - 2e \right]} \left[\ln \frac{\xi d / (2a) + e}{\xi d / (2a) - e} - \frac{2e}{\xi d / (2a)} \right] \right\}. \quad (7)$$

Больцмановский фактор $W(\xi, \eta) = \exp[-V_2(\xi, \eta) / kT]$ для цепи полиэлектролита с электрическим зарядом звена (группы звеньев) q_1 в поле заряженного сфероида определяется потенциалом (3), но может быть записана и так

$$W_{q_1}(\xi) = \exp \left\{ - \frac{q_1 q}{kT \sqrt{a^2 - b^2}} \operatorname{arcth} \left(\frac{2\sqrt{a^2 - b^2}}{\xi d} \right) \right\}. \quad (8)$$

Для макроцепи полиамфолита с характерным электрическим дипольным моментом \mathbf{p} сегмента (единичного звена или группы звеньев) можем записать

$$W_p(\xi) = \exp \left\{ - \frac{q \mathbf{p} \mathbf{n}_\xi}{kT h_1 \sqrt{a^2 - b^2}} \frac{d}{d\xi} \operatorname{arcth} \left(\frac{2\sqrt{a^2 - b^2}}{\xi d} \right) \right\}, \quad (9)$$

где \mathbf{n}_ξ единичный орт ВСК, а h_1 – масштабный параметр Ламе.

Результирующий потенциал $\varphi_q(\xi) + \varphi^{(e)}(\xi, \eta)$ заряженного и поляризованного сфероида в силу принципа суперпозиции может быть записан в виде

$$\begin{aligned} \varphi_q(\xi) + \varphi^{(e)}(\xi, \eta) &= \frac{q}{ae} \ln \frac{\xi + 1}{\xi - 1} - E_0 \xi \eta \frac{d^2}{4\sqrt{a^2 - b^2}} \times \\ &\times \left\{ 1 - \frac{[\varepsilon(\omega) - \varepsilon^{(e)}]}{\{\varepsilon^{(e)} + [\varepsilon(\omega) - \varepsilon^{(e)}]n^{(x)}\}} \frac{(1-e^2)}{2e^3} \left[\ln \frac{\xi + 1}{\xi - 1} - \frac{2}{\xi} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Справедливость суперпозиции полей вытекает из линейности базовых уравнений электродинамики. На уровне общих рассуждений учет внешнего поля E_0 приводит к перераспределению заряда на поверхности тела, так что сама поверхность становится эквипотенциальной. Тогда избыточный заряд q перераспределяется по поверхности сфероида таким образом, чтобы эта эквипотенциальность не нарушалась.

Для заряженного сфероида в поляризующем поле больцмановские факторы $W_{q_1}(\xi, \eta)$, $W_p(\xi, \eta)$, определяющие вероятности обнаружения полимерного звена в точке с координатами ξ, η в равновесной конфигурации опушечной системы в случаях полиэлектролитных и полиамфолитных макроцепей получаем аналогично (8) и (9), но уже на основе использования потенциала (10).

Заостренная полюсовая часть вытянутого сфероида (Рис. 1) обуславливает увеличение напряженности поля в его окрестности. Таким образом, основные эффекты формы сфероида связаны с различиями характеристик поля в полюсовой и экваториальной областях.

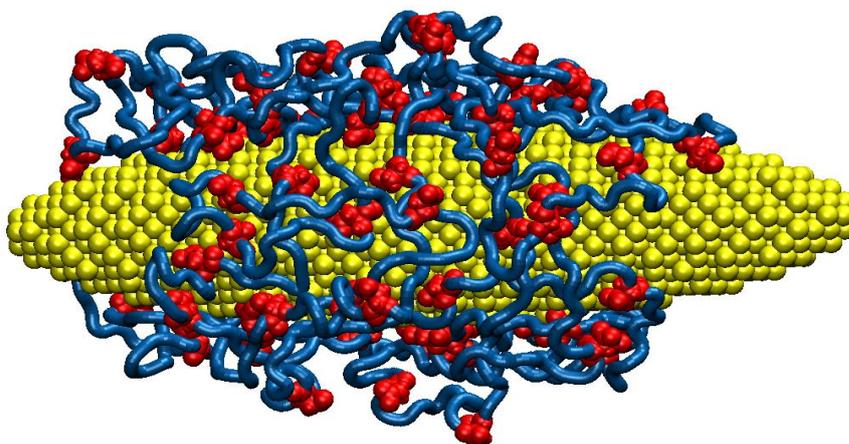


Рис. 1. Конечная стадия МД-моделирования конформационной структуры полипептида на золотом наносфере при температуре 600 К и периодическом изменении во времени его поляризации вдоль большей оси для суммарного заряда $q_{0,3}$ наносфероида и пикового значения p_1^{\max} индуцированного дипольного момента наносфероида (голубая трубка - звенья Ala, красным цветом отображены звенья Asp).

При импульсной лазерной активации системы окрашенных макроцепей форма времяразрешенного сигнала $I_{DF}^{T\Delta}(t) T^{-1} \Delta_g(O_2)$ кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции определяется как интеграл по объему области пространства, заполненному полимерной опушкой, от произведения концентраций $n_T(\xi, \eta, t)$ триплетных возбуждений органических молекул, локализованных на звеньях цепи, и $n_\Delta(\xi, \eta, t)$ диффузионно-подвижных синглетных возбуждений молекул кислорода

$$I_{DF}^{T\Delta}(t) \sim \int_{2a/d}^{\infty} \int_{-1}^1 n_T(\xi, \eta, t) n_{\Delta}(\xi, \eta, t) 2\pi(d/2)^3 (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta. \quad (11)$$

На основе интеграла (11) могут быть построены кинетические кривые сигналов кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции в зависимости от характерных геометрических (длины a, b полуосей), электромагнитных ($q, \mathbf{p}, \mathbf{E}_0$), термодинамических (T) и молекулярно-кинетических параметров системы.

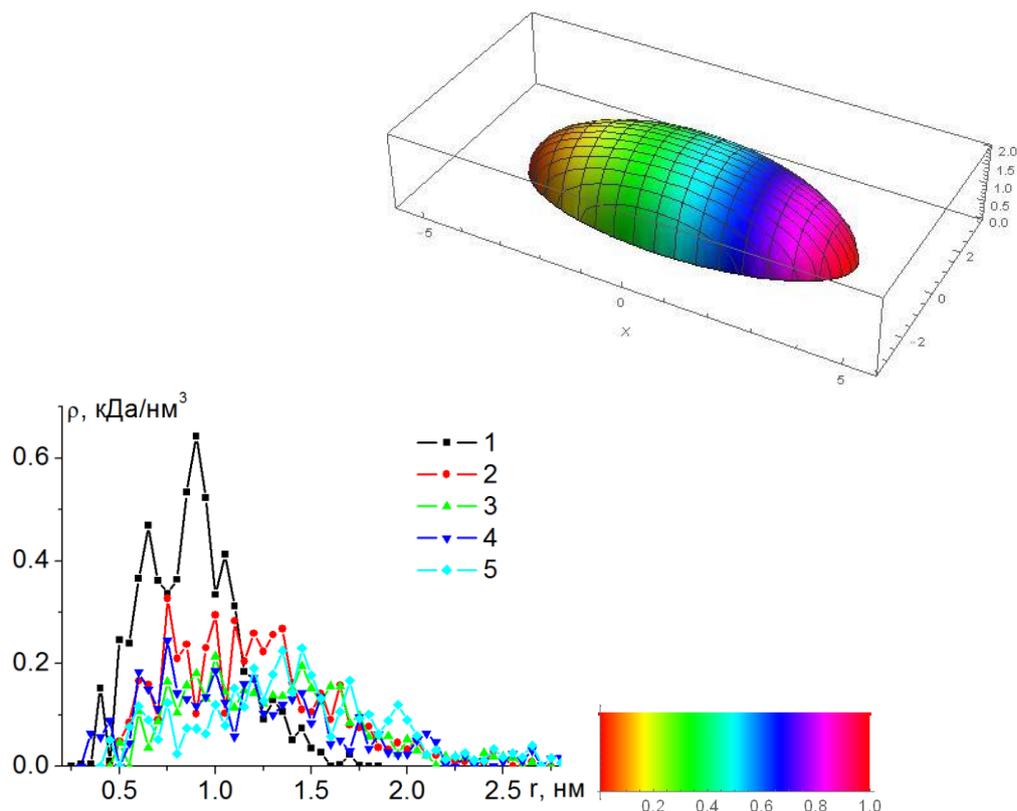


Рис. 2. Радиальные зависимости средней плотности атомов полипептида в области полюса сфероидальной золотой наночастицы при различных значениях дипольного момента и полного заряда наночастицы. 1 - на нейтральной поверхности наночастицы, 2 и 3 - на поверхности поляризованной с дипольным моментом $p_{0.5}$ и $p_{1.0}$, а 4 и 5 - заряженной с полным зарядом $q_{0.5}$ и $q_{1.0}$ наночастицы.

Рис. 3. Распределение заряженных звеньев полиэлектролита на сфероидальной поверхности $\xi = \text{const} > 2a/d$ (показана половина фигуры) в поле поляризованного вдоль большой оси x проводящего наносфероида (цветом отображаются участки на поверхности НЧ с различной концентрацией заряженных звеньев макроцепи).

Изменение величины заряда сфероида или его поляризации приводит к перестройке конформаций адсорбированной макроцепи. Это влечет за собой

пространственные изменение распределений локальных плотностей $n_T(\xi, \eta, t)$ и $n_A(\xi, \eta, t)$ реагентов, и как следствие – модификацию кинетического режима реакции и выхода ее продуктов.

Увеличение скорости межмолекулярного безызлучательного переноса энергии, аннигиляции возбуждений и локальное плазмонное усиление люминесценции на поверхности наносфероида

Отдельную задачу представляет собой расчет характеристик квазистационарного ближнего поля вблизи замагниченного плазмонного наносфероида. При Т-Т-аннигиляции в приповерхностной области такого наносфероида (рис. 4а), или тушении возбужденных Т-состояний триплетными молекулами кислорода в его невозбужденном состоянии, представляет интерес рассмотрение плазмонного эффекта в отношении замедленной флуоресценции, сопровождающей акты триплет-триплетной аннигиляции возбуждений, или фосфоресценции в условиях протекания реакции $T + {}^3\Sigma_g(O_2) \rightarrow S_0 + {}^1\Delta_g(O_2)$ в магнитном поле. Динамическая электрическая поляризуемость наносфероида определяется его формой и диэлектрической проницаемостью $\varepsilon^{(i)}(\omega)$ металла. Во внешнем магнитном поле электронная плазма металла замагничивается, и функция $\varepsilon^{(i)}(\omega)$ приобретает зависимость от индукции \mathbf{B} магнитного поля. Тогда замедленная флуоресценция, сопровождающая акты ТТА, в свою очередь, становится магнитозависимой.

В некоторых случаях возможен другой вариант одновременного проявления действия локальных электрических и магнитных полей на молекулярные процессы вблизи поверхности наносфероида. Нестандартная ситуация возникает, когда речь идет о магнитном поле ферромагнитного наносфероида, находящегося в окружении малых сферических плазмонных наночастиц (бусин) (рис. 4б), определяющих особенности протекания радиационных процессов с участием молекул, расположенных поблизости от таких наночастиц. Неоднородное магнитное поле снаружи частицы модулирует скорость спин-селективных молекулярных реакций, таких, например, как Т-Т- аннигиляция (ТТА), либо тушение возбужденных Т-состояний органики молекулярным кислородом – O_2 в его основном, ${}^3\Sigma_g$ -состоянии.

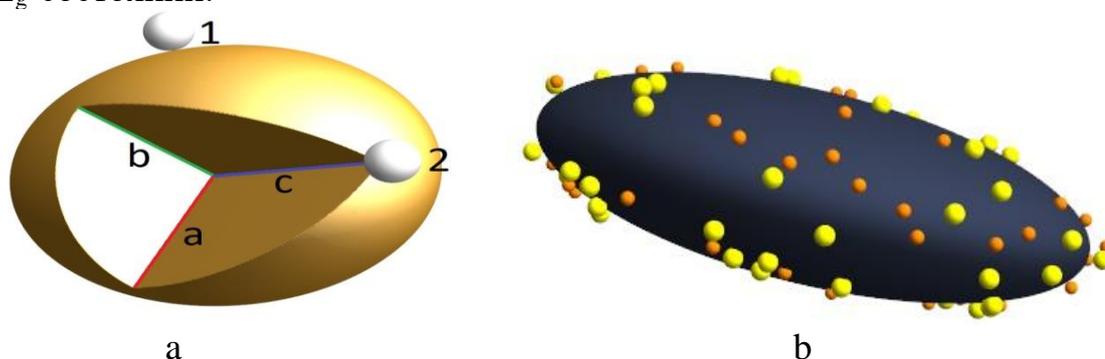


Рис. 4. а) Молекулы 1 и 2 – реагенты на поверхности плазмонного трехосного эллипсоида; б) ферромагнитный наносфероид в окружении сферических плазмонных наночастиц (желтые бусины), определяющих особенности протекания радиационных процессов с участием молекул (оранжевые шарики), расположенных вблизи плазмонных бусин.

Магнитное поле однородно намагниченного ферромагнитного наносфероида неоднородно снаружи него, и воздействует локально на процессы с участием триплетных молекулярных центров, адсорбированных ферросфероидом (Рис. 4а). Отметим, что задача о наносфероиде в окружении сферических плазмонных наночастиц (золотые бусины, Рис. 4б), определяющих особенности протекания радиационных процессов с участием молекул, расположенных на поверхности сфероида, вблизи от плазмонных нанобусин, допускает аналитическое решение в приближении отдельной плазмонной НЧ.

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

Список литературы

1. Кучеренко М. Г., Кручинин Н. Ю. Структура адсорбированного сфероидальной наночастицей опушечного слоя из гауссовой макромолекулярной цепи // Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2021, С. 2409-2417.
2. Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. Molecular Dynamics Simulation of Conformational Rearrangements in Polyelectrolyte Macromolecules on the Surface of a Charged or Polarized Prolate Spheroidal Metal Nanoparticle // Colloid Journal, 2021, Vol. 83, No. 5, pp. 591–604. DOI: 10.1134/S1061933X21050070
3. Kruchinin N. Yu., Kucherenko M. G. Modeling the Conformational Rearrangement of Polyampholytes on the Surface of a Prolate Spheroidal Metal Nanoparticle in Alternating Electric Field // High Energy Chemistry, 2021, Vol. 55, No. 6, pp. 425–436. DOI: 10.1134/S0018143921060084.
4. Кручинин Н. Ю., Кучеренко М. Г. Конформации однородных полипептидов на поверхности поляризованного вытянутого металлического наносфероида при изменении водородного показателя: Молекулярно-динамическое моделирование // Журнал физической химии. 2022, Том 96, № 3, 10 с.
5. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. Конформационные изменения макромолекул полиэлектролитов на поверхности заряженного металлического вытянутого наносфероида в переменном электрическом поле // Высокомолекулярные соединения. 2022. 14 с.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VIII. Электродинамика сплошных сред. 2-е изд., -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982. - 621 с.

РАДИАЦИОННЫЕ И БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРОЦЕССЫ ВБЛИЗИ ПОВЕРХНОСТИ СФЕРОИДАЛЬНЫХ НАНОЧАСТИЦ

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

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

Ранее в ряде наших работ были рассмотрены молекулярные процессы в окрестности проводящих наночастиц сферической формы и протяженных наноцилиндров (нанопроволок) [1-4]. При переходе к сфероидам (эллипсоидам вращения) возникают анизотропные эффекты [5-7], связанные с более сложной формой наночастицы по сравнению с шаром или цилиндром. Интерес представляет (1) изучение плазмонных свойств проводящих наносфероидов [6], (2) особенностей взаимодействия несущих на себе электрический заряд макромолекулярных цепей с поляризованными в электрическом поле наносфероидами [7], а также (3) магнитное поле ферромагнитного наносфероида в окружении сферических плазмонных наночастиц (бусин), определяющих особенности протекания радиационных процессов с участием молекул, расположенных поблизости от таких наночастиц. Отдельную задачу представляет собой (4) расчет характеристик квазистационарного ближнего поля вблизи замагниченного плазмонного наносфероида [6]. Вытянутый и сплюснутый сфероиды обладают существенно различающимися свойствами в отношении формирования распределенных характеристик полей [8]. Заостренная полюсовая часть вытянутого сфероида (Рис. 1) обуславливает увеличение напряженности поля в его окрестности, а у сплюснутого сфероида, наоборот, полюсовая поверхностная зона имеет наименьшую кривизну, и напряженность поля около нее принимает наименьшее значение. Таким образом, основные эффекты формы сфероидов связаны с различиями характеристик поля (электрического или магнитного) в полюсовой и экваториальной областях.

Локальное плазмонное усиление люминесценции и увеличение скорости межмолекулярного безызлучательного переноса энергии на поверхности наносфероида

Данная проблема связана, в основном, с двумя типами бимолекулярных процессов, сопряженных с люминесценцией: (а) замедленной флуоресценцией, сопровождающей акты триплет-триплетной аннигиляции возбуждений и (б) флуоресценцией донорных молекул, передающих энергию электронного возбуждения к акцепторным центрам, локализованным на поверхности сфероида. Активированный в процессах (а) или (б) молекулярный излучатель характеризуется вектором $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 \exp(-i\omega t)$ электронного дипольного момента,

осциллирующим с частотой ω . В ближней зоне такого источника поле является квазистационарным и излучения нет. В квазистационарном поле диполя находится сфероид, который поляризуется, изменяя поле излучателя вблизи своей поверхности, и приобретает наведенный дипольный момент \mathbf{P}_{NP} . Складываясь друг с другом, эти моменты образуют общий дипольный момент $\mathbf{P}_{\text{tot}} = \mathbf{p} + \mathbf{P}_{\text{NP}}$, который будет определять поле излучения в дальней зоне.

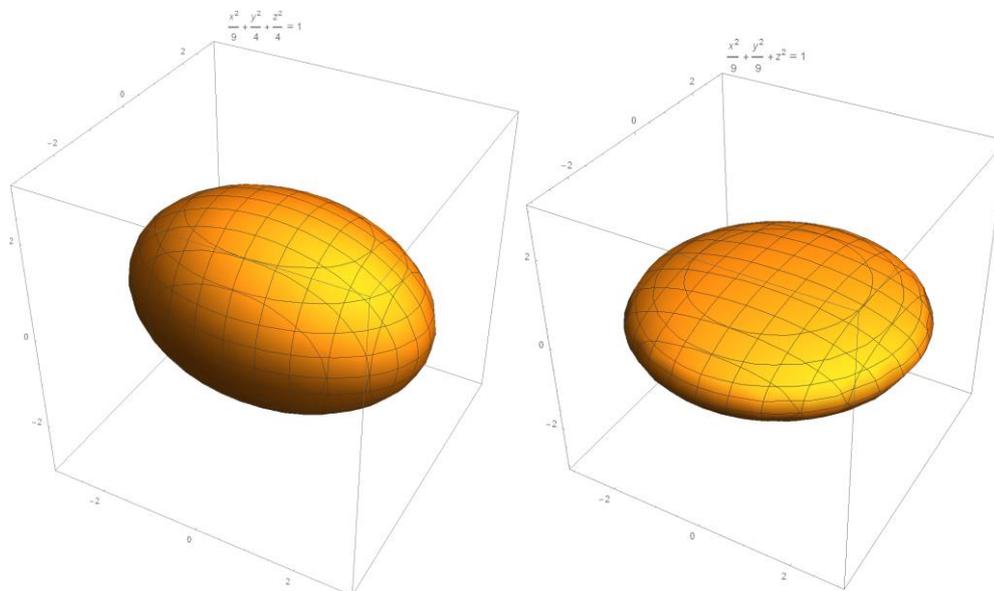


Рис. 1. Вытянутый и сплюснутый сфероиды

Кроме трансформации в люминесценцию (i) энергия возбужденного состояния молекулы донора может быть передана НЧ необратимым образом (ii), с последующей ее диссипацией и превращением во внутреннюю энергию сфероида. Еще одним каналом размена энергии возбуждения является ее безызлучательный перенос к молекуле – акцептору (iii); разновидностью такого межмолекулярного переноса является взаимная аннигиляция электронных возбуждений (iv) перекрестная – между квазичастицами разного сорта, либо внутривидовая – между односортовыми экситонами (например, синглет-синглетная аннигиляция экситонов или локализованных на молекулах синглетных электронных возбуждений). Во всех четырех случаях (i)-(iv) плазмонное поле НЧ оказывает влияние на формирование величин скоростей соответствующих процессов. Если перенос энергии или аннигиляция осуществляется с участием триплетных (T) спиновых состояний, то такие процессы могут оказаться спин- селективными (T-T-аннигиляция, тушение возбужденных T-состояний молекулами кислорода O_2 в $^3\Sigma_g$ -состоянии), а значит и магнитозависимыми. В таких случаях локальное магнитное поле ферромагнитного наносфероида может влиять на формирование величины скорости спин-селективной аннигиляции или межмолекулярного переноса электронной энергии.

1. Люминесценция двухчастичной системы «молекула-наночастица»

Отождествляемая с сигналом люминесценции (i) спектральная плотность N числа фотонов, испущенных на частоте ω объединенной системой «молекула-сфероид»

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

в приближении дипольной поляризуемости [6] определяется вероятностью w_{sp} спонтанного перехода в этой объединенной системе «М-НЧ»

$$w_{sp}(\omega | \mathbf{r}_0) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} \left| \left[\tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_0) \tilde{\mathbf{a}}(\omega) \right] \mathbf{p} \right|^2. \quad (2)$$

Предполагается, что молекула-излучатель расположена вблизи наночастицы, на расстоянии r_0 от ее центра. Здесь, в (2) $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3} (3\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \tilde{\mathbf{I}})$ - квазистатическая диадическая функция Грина точечного дипольного источника \mathbf{p} ; $\tilde{\mathbf{I}}$ - единичная диада; $\tilde{\mathbf{a}}(\omega)$ - тензор электрической дипольной поляризуемости сфероида с полуосями a и b : $\tilde{\mathbf{a}}(\omega) = (ab^2 / 3) (\tilde{\mathbf{\epsilon}}(\omega) - \epsilon_{ex} \mathbf{1}) [\epsilon_{ex} (\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{n}}) + \tilde{\mathbf{n}} \tilde{\mathbf{\epsilon}}(\omega)]^{-1}$. Функция $\Gamma(\omega | r_0, \mathcal{G}) = w_{sp}(\omega | r_0) + U(\omega | r_0, \mathcal{G}) + K$ спектральной ширины лоренцевой линии зависит от угла \mathcal{G} между векторами \mathbf{p} и \mathbf{r}_0 , $K = \text{const}$.

2. Диссипация энергии в наночастице

Скорость $U(\omega | r_0, \mathcal{G})$ безызлучательной передачи энергии (ii) от молекулы к наночастице в приближении дипольной поляризуемости принимает вид

$$U(\omega | r_0, \mathcal{G}) = \frac{1}{2\hbar} \text{Im} \left[\mathbf{p}_\omega \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \tilde{\mathbf{a}}(\omega) \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \mathbf{p}_\omega \right]. \quad (3)$$

В более общем, но все еще аксиально-симметричном случае, при отказе от использования формализма дипольной поляризуемости сфероида, скорость диссипации энергии поля дипольного источника в НЧ, т.е. скорость безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от молекулы или квантовой точки к металлическому наносфероиду может быть записана в виде

$$U(\omega | \mathbf{r}) = \frac{1}{2\hbar} \int_V \text{Im} (\nabla \delta\varphi(\mathbf{r}'))^* \tilde{\mathbf{\epsilon}}(\omega) \nabla \delta\varphi(\mathbf{r}') \, d\mathbf{r}', \quad (4)$$

где $\delta\varphi$ - потенциал квазистатического поля, наведенного внешним дипольным источником внутри проводящего сфероида объемом V ; $\tilde{\mathbf{\epsilon}}(\omega)$ - тензор диэлектрической проницаемости замагниченной электронной плазмы металла.

В спектре (1) люминесценции комплекса «молекула– сфероидальная НЧ» обычно наблюдается несколько спектральных полос с двумя частотами $\omega_{1,2}$ характерных плазмонных резонансов и частотой ω_f перехода из возбужденного состояния i молекулы в ее основное состояние f .

3. Межмолекулярный безызлучательный перенос энергии вблизи наносфероида в магнитном поле

Результирующая скорость U_{DA} межмолекулярного безызлучательного переноса энергии на частоте ω в окрестности плазмонного наносфероида (iii) определяется квадратом модуля суммы двух матричных элементов

$$U_{DA}(\omega | \mathbf{r}_{DA}, \mathbf{r}_D, \mathbf{r}_A) \sim \left| \mathbf{p}_D \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_{DA}) \mathbf{p}_A + \mathbf{p}_D \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_D) \vec{\mathbf{a}}(\omega) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_A) \mathbf{p}_A \right|^2. \quad (5)$$

Вначале рассмотрим характерный случай, когда большая ось вытянутого сфероида направлена вдоль оси X декартовой системы координат, и на этой же оси располагаются молекулы донора и акцептора. Вектор \mathbf{B} индукции магнитного поля направлен вдоль оси Z .

При замагничивании электронной плазмы металла НЧ внешним магнитным полем тензор ее поляризуемости содержит характерную ларморовскую частоту $\Omega_L(B)$ (электронного диамагнитного резонанса), а частоты плазмонных резонансов сфероида являются действительными положительными корнями уравнений [5-6]

$$(\omega^2 \pm \Omega_L \omega - n_x \omega_p^2)^2 + \gamma^2 \omega^2 = 0, \quad (\omega^2 - n_z \omega_p^2)^2 + \gamma^2 \omega^2 = 0. \quad (6)$$

Постоянные параметры в (6): γ – частота столкновений электронов проводимости; ω_p – плазменная частота металла; n_x, n_z – главные значения симметричного тензора $\vec{\mathbf{n}}$ деполяризации сфероида, определенные соотношениями [8]

$$n_x = \frac{1-e^2}{2e^3} \left[\ln \frac{1+e}{1-e} - 2e \right], \quad n_z = n_y = \frac{1}{2}(1-n_x), \quad (7)$$

где $e = \sqrt{1 - b^2 / a^2}$ – эксцентриситет эллипса с полуосями a и b . Из первого уравнение (6) получаем частоты двух магнитозависимых плазмонных резонансов $\omega_{1,2} \approx \sqrt{n_x} \omega_p + (\pm \Omega_L - \gamma) / 2$. Легко заметить, что положительный корень последнего уравнения (6) $\omega_3 = \sqrt{n_z \omega_p^2 + \gamma / 4} - \gamma / 2$ не зависят от индукции B магнитного поля. В случае шара имеем $n_x = n_z = 1/3$, и положения центров тяжести

всех резонансов совмещаются с частотой Ми $\Omega_{Me} = \omega_p / \sqrt{3}$, расщепляющейся в магнитном поле на две компоненты $\omega_{1,2} = \Omega_{Me} + (\pm\Omega_L - \gamma) / 2$ [2-3].

На рис. 2 представлены графики магнитозависимых высокочастотных плазмонных резонансов для квадрата модуля матричного элемента $V_{D-MNP-A}^2(\omega | \mathbf{r}_D, \mathbf{r}_A) = \left| \mathbf{p}_D \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_D) \vec{\mathbf{a}}(\omega) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_A) \mathbf{p}_A \right|^2$ вытянутой сфероидальной наночастицы в полях различной индукции В от 0 до 20 Тл. Как видно из графика, плазмонный резонанс на частоте $6.182 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ в отсутствие магнитного поля, при его наличии расщепляется на две симметричные полосы, максимумы которых смещаются в противоположные стороны при увеличении индукции В.

Как видно из формулы (5), результирующая скорость U_{DA} межмолекулярного безызлучательного переноса энергии будет определяться не только величиной $V_{D-MNP-A}^2$, но и интерференционным слагаемым $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$, определяющим интенсивность и характер взаимодействия между двумя параллельными каналами переноса: прямого, ферстеровского и опосредованного через плазмонные моды НЧ. На рис. 3 представлены графики магнитозависимых интерференционных слагаемых $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$, связанных с высокочастотными плазмонными резонансами опосредованно через матричный элемент $V_{D-MNP-A}$.

Наличие положительных и отрицательных частей в частотных зависимостях величины $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$ делают вклад интерференционного слагаемого в скорость переноса (5) нетривиальным в зависимости от рассматриваемого участка спектра.

Амплитуда высокочастотного $6.182 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ плазмонного резонанса рис. 2 и 3 почти на порядок превышает высоту низкочастотного $4.855 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ пика. Причем, амплитуда низкочастотного резонанса и его положение на оси частот, как это и следует из выражения $\omega_3 = \sqrt{n_z \omega_p^2 + \gamma / 4} - \gamma / 2$, не изменялись при вариации индукции магнитного поля, в отличие от магниточувствительного высокочастотного плазмонного резонанса рис. 2 и 3.

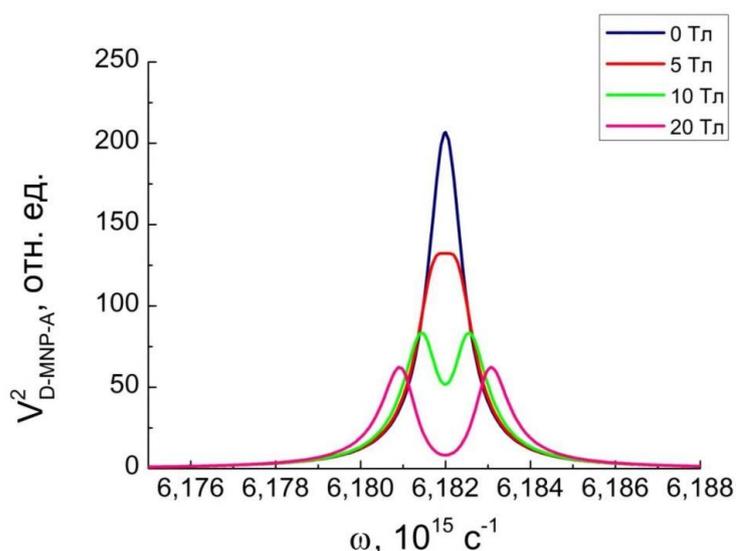


Рис. 2. Магнитозависимые высокочастотные плазмонные резонансы матричного элемента $V_{D-MNP-A}^2$ для наночастицы в форме вытянутого эллипсоида вращения.

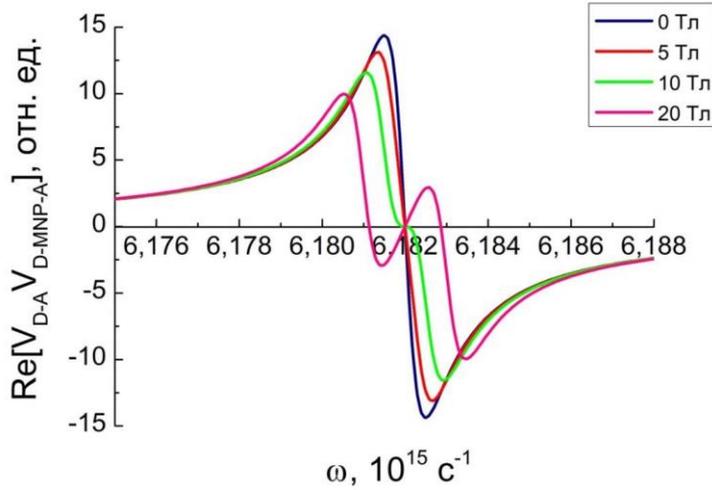


Рис. 3. Частотные зависимости магниточувствительных интерференционных слагаемых $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$ для наночастицы в форме вытянутого эллипсоида вращения.

При размещении молекул D и A на скрещенных осях X и Y и направлении вектора \mathbf{B} индукции магнитного поля вдоль оси Z , частотные зависимости величин $V_{D-MNP-A}^2$, и $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$ принимают несколько иную форму. Так, уравнения для частот плазмонных резонансов сфероида теперь записываются в виде [5]

$$(\Omega_L^2 + \gamma^2)\omega^2 - (\omega^2 - n_x \omega_p^2)^2 = 2\omega\gamma(\omega^2 - n_x \omega_p^2), \quad (\omega^2 - n_z \omega_p^2)^2 + \gamma^2 \omega^2 = 0. \quad (8)$$

Однако, с учетом малости частотного параметра γ по сравнению с плазменной частотой, из уравнений (8) опять получаем частоты двух магнитозависимых плазмонных резонансов в прежнем виде $\omega_{1,2} \approx \sqrt{n_x} \omega_p + (\pm \Omega_L - \gamma) / 2$, а положительный корень $\omega_3 = \sqrt{n_z \omega_p^2 + \gamma / 4} - \gamma / 2$ второго уравнения (8) остается таким же как и в случае (6), и не зависит от индукции B магнитного поля.

На рис. 4. представлены графики магнитозависимых высокочастотных плазмонных резонансов для квадрата модуля матричного элемента $V_{D-MNP-A}^2(\omega | \mathbf{r}_D, \mathbf{r}_A) = \left| \mathbf{p}_D \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_D) \vec{\mathbf{a}}(\omega) \vec{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_A) \mathbf{p}_A \right|^2$ в скрещенной конфигурации трехчастичной системы $D - MNP - A$.

Как и в случае линейного размещения частиц вдоль оси X , в магнитном поле наблюдается расщепление на две компоненты лишь полосы магниточувствительного высокочастотного плазмонного резонанса. Но теперь, в отличие от рис. 2, с ростом магнитного поля вначале наблюдается рост амплитуды резонансного пика, без его расщепления. При дальнейшем увеличении индукции поля образуются две отдельные спектральные полосы.

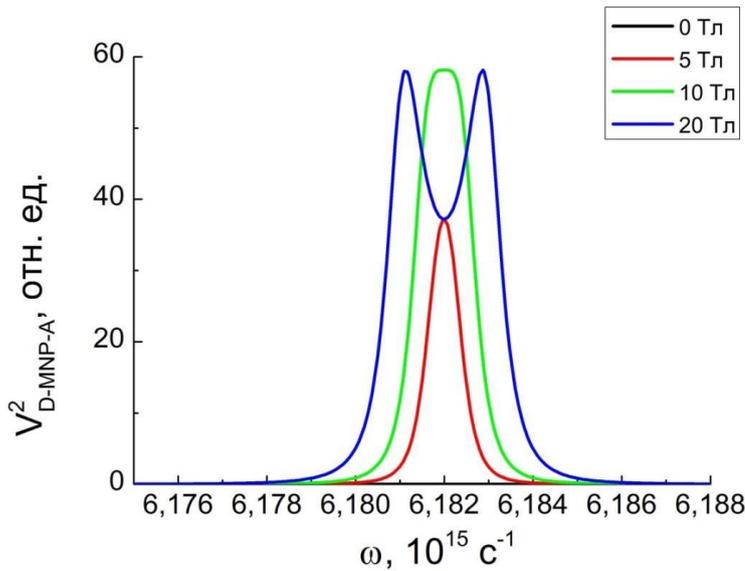


Рис. 4. Расщепление полосы высокочастотного плазмонного резонанса наносфероида для квадрата матричного элемента $V_{D-MNP-A}^2$ в случае скрещенной конфигурации компонентов системы

Из рис. 5 видно, что расщепления спектральной полосы перекрестного матричного элемента $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$ не наблюдается вплоть до значений индукции поля 20 Тл, в отличие от рис. 3, где такое расщепление имело место. Что же касается его амплитуды, то она монотонно увеличивается с ростом индукции поля В.

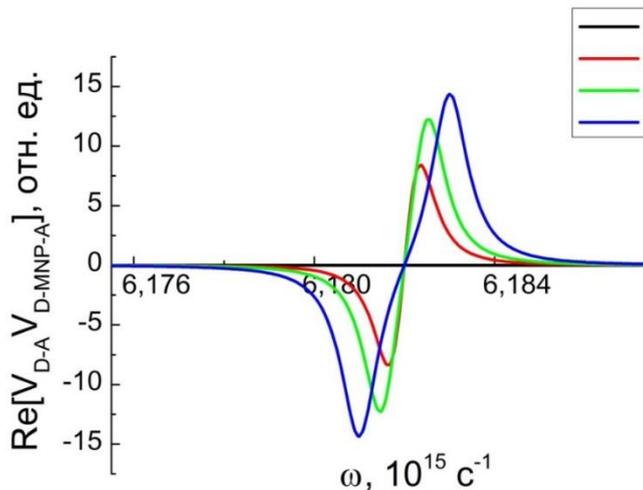


Рис. 5. Деформация высокочастотного плазмонного резонанса наносфероида для перекрестного матричного элемента $\text{Re}[V_{DA} \cdot V_{D-MNP-A}]$ в случае скрещенной конфигурации компонентов системы

При синглет-синглетной аннигиляции экситонов будут иметь место два противоположных по направленности плазмонных эффекта. С одной стороны локальное поле плазмонов будет увеличивать скорость спонтанных радиационных переходов в системе, а с другой – это поле будет увеличивать скорость бимолекулярной синглет-синглетной аннигиляции возбуждений, которая определяется выражением, схожим по структуре с формулой (5). В результате этого процесса населенность возбужденных синглетных состояний молекул уменьшается, а это значит, что интенсивность люминесценции будет подавлена.

При T-T-аннигиляции в приповерхностной области наносфероида, или тушении возбужденных T-состояний триплетными молекулами кислорода в его невозбужденном состоянии, представляет интерес рассмотрение плазмонного эффекта в отношении замедленной флуоресценции, сопровождающей акты триплет-триплетной аннигиляции возбуждений, или фосфоресценции в условиях протекания реакции $T + {}^3\Sigma_g(O_2) \rightarrow S_0 + {}^1\Delta_g(O_2)$ в магнитном поле.

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

Список литературы

1. Кучеренко М. Г., Чмерева Т. М. Перенос энергии в цилиндрической наноструктуре, состоящей из металлической жилы и коаксиальной оболочки с молекулами люминофора // Журнал приклад. спектр. 2017. -Т. 84. -№ 3. - С. 358-367.
2. Кучеренко М. Г., Налбандян В. М. Спектры поляризуемостей замагниченных слоистых нанокомпозитов с анизотропной сердцевиной или оболочкой и локализованными поверхностными плазмонами // Оптический журнал. 2018. -Том 85. -№ 9. - С. 1-9.
3. Кучеренко М.Г., Налбандян В.М. Люминесценция двухчастичного комплекса из сферической квантовой точки и плазмонной наноглобулы во внешнем магнитном поле // Оптика и спектр., 2020, том 128, вып. 11. С. 1778-1783.
4. Kucherenko M. G., Nalbandyan V. M., Chmereva T. M. Luminescence of a complex composed of a quantum dot and a layered plasmon nanoparticle in a magnetic field // J. Opt. Technol. 2021.88(9), 489-496.
5. Большаков Д. С., Пеньков С. А., Кучеренко М. Г. Влияние магнитного поля на безызлучательный перенос энергии вблизи проводящего наноразмерного эллипсоида // Матер. IV Междунар. научно-практ. конфер. Сборник научных трудов. – Краснодар, 2012. –33 т. – С. 58. – ISBN 978-5-905897-17-7.
6. Кучеренко М.Г., Пеньков С.А., Налбандян В.М., Большаков Д.С. Влияние магнитного поля на межмолекулярный безызлучательный перенос энергии вблизи сфероидальной металлической наночастицы // Универ-й комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. (с международным участием). Сборник трудов. 2013 Издательство: ИПК "Университет" (Оренбург). С. 1107-1114.
7. Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. Molecular Dynamics Simulation of Conformational Rearrangements in Polyelectrolyte Macromolecules on the Surface of a Charged or Polarized Prolate Spheroidal Metal Nanoparticle // Colloid Journal, 2021, Vol. 83, No. 5, pp. 591–604. DOI: 10.1134/S1061933X21050070
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред. 2-е изд., -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982. - 621 с.

КИНЕТИКА РЕЛАКСАЦИИ АКТИВИРОВАННОЙ ЛАЗЕРОМ СФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ С КОНВЕКТИВНЫМ ТЕПЛООБМЕНОМ НА ЕЕ ГРАНИЧНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Кучеренко М. Г.¹, д-р физ.-мат. наук, профессор,
Русинов А.П.¹, канд. физ.-мат. наук, доцент,
Ибраев Н.Х.², д-р физ.-мат. наук, профессор,
Селиверстова Е.В.², PhD

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»

²Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова, Казахстан

В работе [1] экспериментально исследовано переходное поглощение наночастиц (НЧ) Ag различного размера при фотовозбуждении лазерными импульсами наносекундной длительности. Обнаружена замедленная кинетика переходного поглощения, длительность которой зависит от размера НЧ.

В поле монохроматической электромагнитной волны с частотой ω , близкой к частоте плазмонного резонанса НЧ, энергия поля передается поверхностным колебаниям электронов металла [2], что за счет электрон-электронного и электрон-фононного рассеяния, в конечном счете приводит к нагреву НЧ до начальной температуры T_0 . В [1] исследована зависимость характерного времени релаксации неравновесного состояния электрон-фононной системы от среднего размера НЧ, их концентрации и плотности энергии лазерного возбуждения. Для объяснения наблюдаемых процессов была предложена математическая модель, рассматривающая затянутый релаксационный процесс в коллоидной системе как проявление затрудненного теплообмена с окружающей средой. Показано, что в замедленном гетерофазном теплообмене на границе раздела «частица – среда» кинетика «затянута» вплоть до времен порядка несколько десятков наносекунд.

Длительность кинетики переходного поглощения определяется временем релаксации ансамбля возбужденных электронов, образованных при воздействии лазерного импульса. Релаксация возбужденных электронов представляет собой сложный процесс, который протекает в несколько характерных, обособленных друг от друга стадий.

Время жизни поверхностных плазмонов определяется процессом дефазировки электронов с типичной постоянной времени 10 – 100 фс. Этот временной промежуток представляет собой первую стадию сложного процесса релаксации электронов металлических наночастиц, за которым следуют другие, хорошо разделимые по времени этапы. На второй стадии получает развитие процесс электрон-электронного рассеяния на временном масштабе 100 – 1000 фс, приводящий к выравниванию температур электронов. Типичный процесс, характерный для последующего – третьего этапа – это рассеяние электронов на фононах на временном масштабе 1–10 пс, который приводит к выравниванию температур электронов и фононов решетки металла. Приведенные оценки

продолжительности релаксационных стадий на сегодняшний день являются общепризнанными. Именно такие значения характерных времен релаксации используются различными авторами для интерпретации экспериментов. Однако остывание нагретой наночастицы в растворе – это достаточно сложный процесс по сравнению с предыдущими стадиями релаксации. В теплообмене на границе раздела «частица – среда» речь идет не о фонон-фононных столкновениях в решетке одного типа, а о столкновениях типа «фонон металла - молекула растворителя» и «электрон проводимости – молекула растворителя».

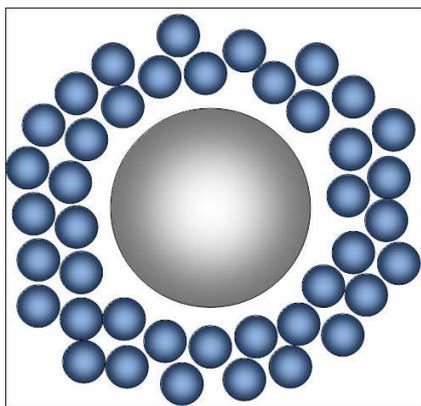


Рис. 1. Нагретая сферическая наночастица серебра в коллоидном растворе. На границе раздела фаз «металл-жидкость» формируется тонкий переходный приповерхностный слой, обедненный молекулами жидкости, и препятствующий эффективному энергообмену между наночастицей и окружающей ее жидкой средой. Это обстоятельство является главной причиной относительно низкого значения коэффициента конвективного теплообмена.

Поскольку наблюдаемая в [1] кинетика наведенного поглощения «затянута» вплоть до времен порядка несколько десятков наносекунд, то это может рассматриваться как прямое свидетельство того факта, что энергообмен между НЧ и средой затруднен. Рассматриваемые с таких позиций как электрон-фононный, так и фонон-фононный энергообмены становятся нетривиальными на интерфейсе – т.е. на поверхности наночастицы. Интерфейсный фононный энергообмен будет затянутым по времени до наносекунд и выше, что не позволяет быстро остыть ускоренно разогретым лазерным импульсом электронам металлической НЧ. На наш взгляд, именно этим обстоятельством объясняется и наблюдаемая в экспериментах [1] наносекундная кинетика релаксации сигналов наведенного поглощения. Таким образом, медленная релаксация двухкомпонентного электрон-фононного газа – это релаксация системы «наночастица – среда», в то время как термодинамическое равновесие внутри самой НЧ наступает очень быстро – за времена порядка 1–10 пс. Поверхность НЧ консервирует энергию локального разогрева, выступая в качестве своеобразной адиабатической оболочки. Т.е. электроны в металлической НЧ очень долго остаются «горячими» как и фононы НЧ из-за относительно малого коэффициента температуропроводности среды и затрудненного энергообмена газа квазичастиц и молекул жидкости на интерфейсе. В процессе тепловой релаксации металлических наночастиц столкновения «электрон проводимости – молекула растворителя» могут являться определяющими в механизме теплообмена.

Кинетика остывания НЧ на первичном временном этапе энергообмена будет неэкспоненциальной, а это означает, что в общем случае представлять ее в виде суперпозиции двух или большего числа экспонент смысла не имеет, т.к. это может даже завуалировать истинную ситуацию с полихронным процессом, заставляя, к тому же, давать не всегда уместную интерпретацию нескольких характерных времен жизни, различающихся по порядку величины.

Тепловая модель кинетики охлаждения активированной лазерным импульсом сферической наночастицы

Уравнение теплопроводности для сферически-симметричного температурного поля $T(r,t)$ внутри глобулярной НЧ радиуса R записываем в виде

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \quad (1)$$

$$0 \leq r < R, \quad T(r,0) = T_0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_{r=R} + k[T(R,t) - T_m] = 0. \quad (2)$$

Здесь, в (1) a^2 – предполагаемый постоянным коэффициент температуропроводности металла НЧ, т.е. отношение коэффициента теплопроводности κ к произведению «удельная теплоемкость на плотность»: $\kappa / (c\rho)$. Температура T_m в граничном условии (2) – постоянная температура внешней среды, т.е. растворителя. Параметр k в (2) определяется как отношение $k = h / \kappa$ коэффициентов теплообмена h «тело-среда» и теплопроводности κ . Решение краевой задачи (1)-(2) может быть представлено в виде ряда по собственным функциям

$$T(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \exp(-a^2 \lambda_n^2 t) \frac{\sin \lambda_n r}{r}, \quad (3)$$

где

$$C_n = T_0 \frac{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)^2}{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)Rk} \int_0^R r \sin(\lambda_n r) dr, \quad (4)$$

а собственные числа λ_n представляют собой положительные корни трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} \lambda_n R = \frac{\lambda_n R}{1 - Rk}. \quad (5)$$

В окончательном виде решение (3)-(4) представляется выражением

$$T(r,t) = T_m + 2(T_0 - T_m)kR^2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\sqrt{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)^2}}{R \lambda_n [R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)Rk]} \exp(-a^2 \lambda_n^2 t) \frac{\sin \lambda_n r}{r}, \quad (6)$$

Таким образом, решение (3) или (6) представляет собой суперпозицию затухающих со временем экспонент, с характерными временами $\tau_n = 1/(a^2 \lambda_n^2)$. В асимптотике основной вклад в (3) дает слагаемое с наименьшим временем $\tau_1 = 1/(a^2 \lambda_1^2)$ и процесс становится моноэкспоненциальным. На начальной стадии, поскольку, как это видно из (4), все коэффициенты C_n имеют соизмеримую друг с другом величину, соизмеримыми будут и вклады в (3) от различных временных экспонент. Таким образом, вначале процесс тепловой релаксации НЧ будет существенно неэкспоненциальным. Двумя экспонентами с соответствующими временами $\tau_1 = 1/(a^2 \lambda_1^2)$ и $\tau_2 = 1/(a^2 \lambda_2^2)$ этот процесс имеет смысл представлять лишь на достаточно далекой временной стадии. Для «отцепления» радиальной координаты от функции $T(r,t)$, связанной с внутренними точками шара, кинетику процесса удобно характеризовать средней по объему шара величиной температуры $\langle T(r,t) \rangle$, или, например, температурой в центре шара

$$T(0,t) = T_m + 2(T_0 - T_m)kR \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\sqrt{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)^2}}{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)Rk} \exp(-a^2 \lambda_n^2 t). \quad (7)$$

Другой удобной характеристикой может служить температура $T(R,t)$ на поверхности сферической НЧ

$$T(R,t) = T_m + 2(T_0 - T_m)kR \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{\sqrt{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)^2}}{R^2 \lambda_n^2 + (Rk - 1)Rk} \exp(-a^2 \lambda_n^2 t) \frac{\sin \lambda_n R}{\lambda_n R}. \quad (8)$$

Зависимость (7) или (8) от параметра k – сложная, учитывая, что от этого параметра зависят и собственные числа λ_n , определяемые уравнением (5). Однако именно этот параметр, введенный в нашей модели, будет определять особенности энергообмена на интерфейсе, т.е. превращение фононов металлической решетки НЧ в колебания молекул растворителя и их трансляционные перемещения. При сильно затрудненном энергообмене коэффициент k мал, что и приводит к заметному уменьшению скорости общей релаксации неравновесной электрон-фононной системы металла. Именно модельное предположение о микроконвективном характере теплообмена НЧ со средой позволяет использовать в граничном условии (2) только один такой постоянный параметр как температура T_m растворителя.

Если $kR < 1$, то ряд (7) удовлетворяет условиям теоремы Лейбница о знакочередующихся рядах. Тогда при всех значениях времени t , удовлетворяющих неравенству

$$t \geq t_c = - \frac{1}{a^2 (\lambda_1^2 - \lambda_2^2)} \ln \frac{R^2 \lambda_2^2 + k^2 - k/R}{R^2 \lambda_1^2 + k^2 - k/R} \sqrt{\frac{R^2 \lambda_1^2 + (Rk - 1)^2}{R^2 \lambda_2^2 + (Rk - 1)^2}}, \quad (9)$$

кинетика в центре шара экспоненциализуется с относительной точностью $\varepsilon > 0$

$$u(0, t_i t_c) = U_m + 2(U_0 - U_m) \frac{\sqrt{R^2 \lambda_1^2 + (Rk - 1)^2}}{\lambda_1^2 R / k + (Rk - 1) \frac{\text{ш}}{\text{в}}} \exp(-a^2 \lambda_1^2 t). \quad (10)$$

Для нахождения наименьшего по модулю собственного числа $\mu_1 = \lambda_1 R$ запишем уравнение (5) в виде

$$\text{tg } \mu_n = \frac{\mu_n}{1 - kR}, \quad \mu_n = \lambda_n R.$$

С учетом малости приведенного коэффициента теплообмена $k \rightarrow 0$ получаем $kR \ll 1$. Тогда $0 < 1 - kR \gg 1$. При этом первый положительный корень μ_1 достаточно мал $0 < \mu_1 \ll 1$. Перепишем уравнение (5) для этого корня в виде

$$\mu_1 \text{ctg } \mu_1 = 1 - kR, \quad \mu_1 \frac{\cos \mu_1}{\sin \mu_1} = 1 - kR$$

$$\frac{1 - \mu_1^2 / 2!}{(1 - \mu_1^2 / 3!)} = 1 - kR,$$

откуда получаем

$$\mu_1 \gg \sqrt{\frac{3kR}{1 + kR/2}}. \quad (11)$$

$$u(0, t_i t_c) = U_m + 2(U_0 - U_m) \frac{\sqrt{R^2 \lambda_1^2 + (Rk - 1)^2}}{\lambda_1^2 R / k + (Rk - 1) \frac{\text{ш}}{\text{в}}} \exp(-a^2 \lambda_1^2 t). \quad (12)$$

Принимая для $kR=0,005$ ($R=25$ nm, $k=2 \cdot 10^{-4}$ nm⁻¹) для корня μ_1 из (11) получаем $0 < \mu_1 = 0,12232$. Заметим, что более точное численное решение уравнения (5) дает значение этого корня $0 < \mu_1 = 0,1224$, т.е. аналитическая аппроксимация (11) вполне валидна. Тогда для характерного времени $\tau_1 = R^2 / (a^2 \mu_1^2)$ в случае НЧ серебра $a^2=1,71$ см²/сек [3], и мы получаем $\tau_1=0,244$ ns. При уменьшении параметра kR на порядок, т.е. полагая $kR=0,0005$ ($R=25$ nm, $k=2 \cdot 10^{-5}$ nm⁻¹) получаем уже $0 < \mu_1 = 0,06925$ и время $\tau_1=0,762$ ns. Для наночастицы большего радиуса $R=35$ nm это время достигает уже 1,49 ns. Для наночастиц золота $a^2=1,18$ см²/сек и $\tau_1=1,104$ нс. (Для большего радиуса НЧ $R=35$ nm, $\tau_1=2,16$ ns). При уменьшении параметра kR еще на один порядок, т.е. при $kR=0,00005$ получаем для серебряных частиц $\tau_1=24,3$ нс в случае $R=25$ nm и $\tau_1=47,7$ нс при $R=35$ nm, что неплохо согласуется с экспериментально определенными значениями для времени $\tau_1 = R^2 / (a^2 \mu_1^2)$ из Таблицы 1 работы [1].

Тип растворителя в рамках данной модели учитывается исключительно через удельный коэффициент теплоотдачи k . Коэффициент тепло- / температуропроводности растворителя в явном виде в данную модель не входит.

В другой, более общей постановке, можно рассматривать задачу сопряжения, с равенством температур и тепловых потоков на поверхности интерфейса. На поверхности задается формально времязависящая величина плотности теплового потока (впоследствии подлежащая определению), и решается вторая краевая задачи внутри и вне шара. После этого внутреннее и внешнее решения приравниваются друг другу на сферической поверхности S_R в результате чего получаем уравнение (интегральное) для функции потока на сфере.

Функции $T(0,t)$ или $T(R,t)$, определяемые выражениями (7) и (8), могут быть непосредственно сопоставлены наблюдаемым экспериментальным кинетикам наведенного электронного поглощения наночастиц.

Численная реализация внешней тепловой задачи

Далее проведем анализ процесса остывания разогретой плазмонной НЧ, помещенной в однородную (диэлектрическую) теплопроводящую среду, на основе численного решения внешней краевой задачи для уравнения теплопроводности.

Детали кинетики релаксации процессов, лежащих в диапазоне временных масштабов 100 fs – 10 ps, и при использовании для разогрева наночастиц оптических импульсов наносекундного диапазона длительности, могут быть опущены. Будем считать, что по завершению импульса накачки ($t_0=10$ ns) НЧ металла разогревается до некоторой температуры $T_{NP}(0)$.

Так как температуропроводность благородного металла на 2–3 порядка выше чем у среды, температурное поле в объеме НЧ можно считать однородным и, вследствие теплопередачи во внешнюю среду, уменьшающимся с течением времени $T_{NP} = T(t) < T_{NP}(0)$. В силу сферической симметрии задачи тепловое поле во внешней среде можно представить одномерной радиальной зависимостью $T_m(r,t)$. Принимая скорость теплообмена на границе «наночастица-среда» пропорциональной разнице температур металла и приповерхностного к нему слоя среды можно записать выражение для теплового потока через поверхность наночастицы в виде $q(t) = h[T(t) - T_m(R,t)]$, где параметр h определяет эффективность теплообмена на границе «тело-среда».

$$f(R,t) = h[T_{NP}(t) - T_m(R,t)] / (c_m \rho_m),$$

где c_m , ρ_m - удельная теплоемкость и плотность среды.

Процесс теплопереноса во внешней среде в области $r > R$ тогда описывается неоднородным уравнением теплопроводности с источником

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_m^2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial T}{\partial r} + f(R,t) \delta(r - R), \quad (13)$$

где теперь $T(r,t) \in T_m(r,t)$ – нестационарное температурное поле среды; a_m^2 – коэффициент температуропроводности среды.

Расчет динамики теплового поля проводился численно с использованием явной конечно-разностной схемы для уравнения (13). Шаг по времени выбирался из критерия устойчивости разностной схемы.

Обсуждение результатов

По результатам численного моделирования проводился анализ динамики теплового поля в среде вокруг «разогретой» НЧ. Использовались следующие значения теплоемкостей и плотностей для системы «серебряная наночастица - вода»: $c_M = 240$ Дж/(кг·°C), $\rho_M = 10^4$ кг/м³, где c_M , ρ_M - удельная теплоемкость и плотность металла, $c_m = 4200$ Дж/(кг·°C) $\rho_m = 10^3$ кг/м³. Важным параметром, определяющим моделируемый процесс, является отношение эффективности теплообмена на границе «тело-среда» к температуропроводности среды a_m^2 . В расчетах величина h была неизменной, а a_m^2 варьировалась. За «базовое» значение a_m^2 была взята температуропроводность воды $a_0^2 = 1.4 \cdot 10^{-7}$ м²/с. Наглядно динамика температурного поля всей системы представлена на рис. 2.

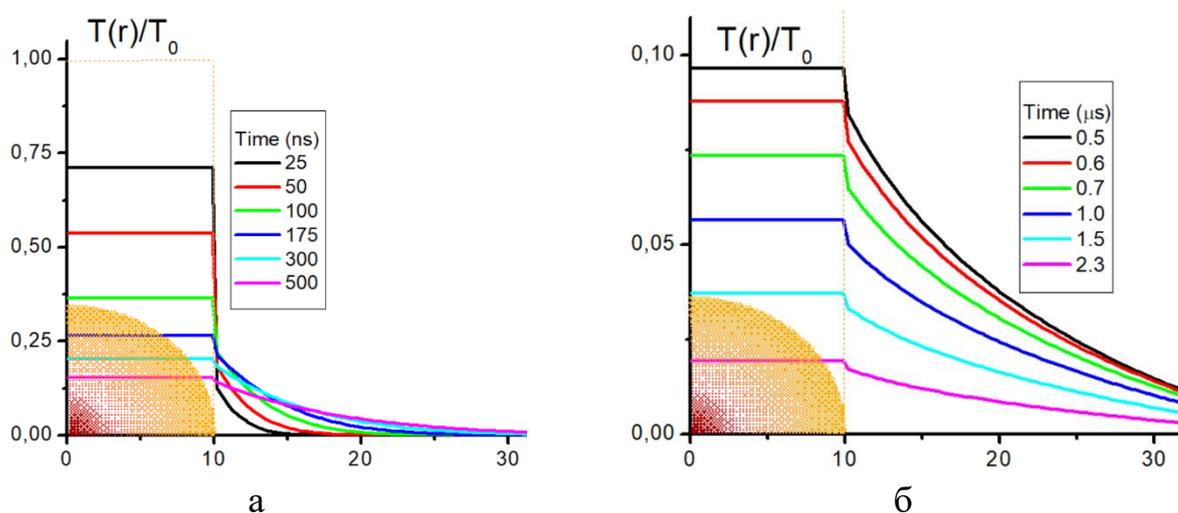


Рис. 2. Радиальные профили температурного поля в НЧ и среде в различные моменты времени t . Температуропроводность среды (вода) $a_0^2 = 1.4 \cdot 10^{-7}$ м²/с.

Из рисунков 2а и 2б видно, что динамику температурного поля в среде, при остывании разогретой плазмонной наночастицы, условно можно разделить на два этапа: (1) - начальный этап «разогрева» среды, когда приток тепла от НЧ в прилегающий слой среды превышает отток тепла в более удаленные слои, он сопровождается ростом температуры в прилегающем слое (рис. 2а); (2) - «релаксационный» этап, на котором амплитуда температурного поля в прилегающем и удаленных слоях монотонно уменьшается со временем (рис. 2б).

Временные зависимости амплитуды теплового поля внутри наночастицы и в окружающей среде (вблизи границы раздела) приведены на рис. 3 и 4. Как видно из рис. 3, на временах превышающих 250 нс и расстояниях более $0.5R$ от поверхности наночастицы температурные поля, найденные численным и

аналитическими методами, практически совпадают. Из рисунка 3 также видны два этапа тепловой динамики в системе, отраженные на рис. 2а и 2б. На рис. 3 они проявляются как стадия выравнивания температур на границе фаз и стадия «совместной» тепловой релаксации системы «наночастица - среда». При этом, с увеличением коэффициента теплопроводности среды, точнее отношения a_m^2/h , ожидаемо наблюдается ускорение процесса остывания наночастицы.

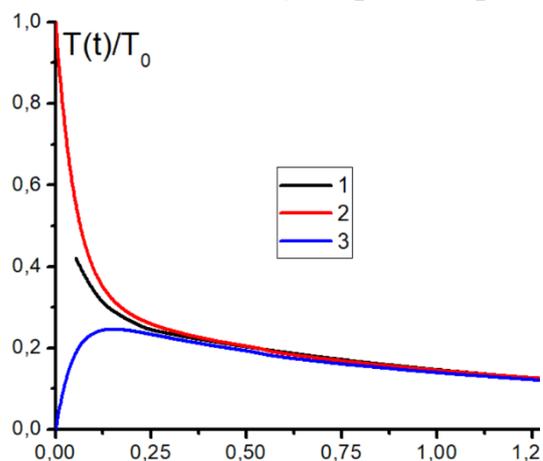


Рис. 3. Временные зависимости температур системы «наночастица - среда»: 1 – расчет на основе аналитического решения, 2 - температура наночастицы, 3 – температура $T_m(R,t)$ среды на границе с НЧ. Теплопроводность среды $a_0^2 = 1.4 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

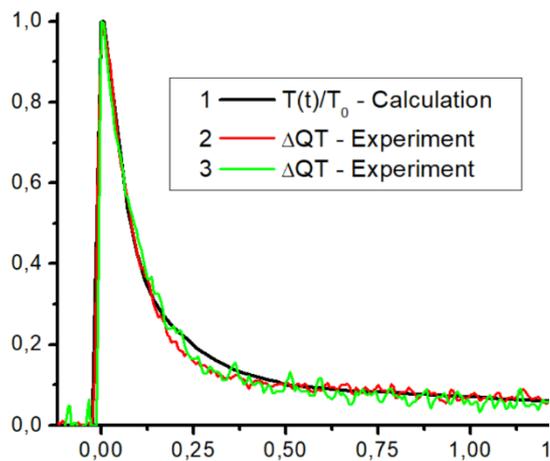


Рис. 4. Сравнение кривой релаксации температуры $T(t)/T_0$ НЧ (1) с экспериментальными кинетическими кривыми переходного поглощения НЧ Ag для концентраций $3 \cdot 10^{-12}$ (2) и $3 \cdot 10^{-11}$ моль/л (3) при различных длинах волн возбуждающего лазерного импульса [1].

В предельном случае среды с очень высокой теплопроводностью $a_m^2 \gg a_0^2$ понижение температуры НЧ до температуры среды хорошо отражается экспоненциальной зависимостью от времени t . Данная зависимость отражается кривой (на рисунке не показана), к которой стремятся все численные решения уравнения (13) при увеличении коэффициента a_m^2 . На рис. 4 показано наложение расчетной кривой временной зависимости температуры $T(t)/T_0$ НЧ на экспериментальные кинетические кривые переходного поглощения ΔQT НЧ Ag в водном растворе, полученные в [1]. Имеет место хорошее соответствие расчетных и экспериментальных зависимостей.

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

Список литературы

1. Ibrayev N., Seliverstova E., Kucherenko M. Features of nanosecond transient absorption of Ag nanoparticles with manifestations of electron gas degeneracy // Journal of Luminescence. 2022. (to be published).

2. Kucherenko, M.G. Plasmon Resonances in Nanocomposites with Degenerated Electron Gas of Metal Components and their Demonstration in Photonics of Molecular Hybrid Systems. *Eurasian Phys. Tech. J.* 2016, 1(25), 6-14.
3. Carslaw H. S., Jaeger J. C. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford, Clarendon Press, 1959.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ФОТОПРОЦЕССЫ НАД КВАЗИДВУМЕРНЫМИ РЕШЕТКАМИ ИЗ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ НА ПОДЛОЖКАХ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Русинов А. П., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Коловертнов Г. С.

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

Представлены результаты расчетов характеристик ближних полей, а также частотных зависимостей скоростей радиационных и безызлучательных процессов с участием молекул, размещенных над плазмонной нанорешеткой из слоистых сферических наночастиц (Рис. 1). Для расчетов использовались разработанные ранее [1-2] модели квазидвумерной суперрешетки с взаимодействующими элементами и тензорный формализм описания ее свойств, а также модели сферической слоистой нанокompозитной системы [3]. Производился учет частотной дисперсии проводящих компонентов композита. Для графического отображения пространственных зависимостей ближнеполевых характеристик, а также поглощения системой света, использовался метод представления потенциалов или напряженностей поля двумерными цветовыми картами.

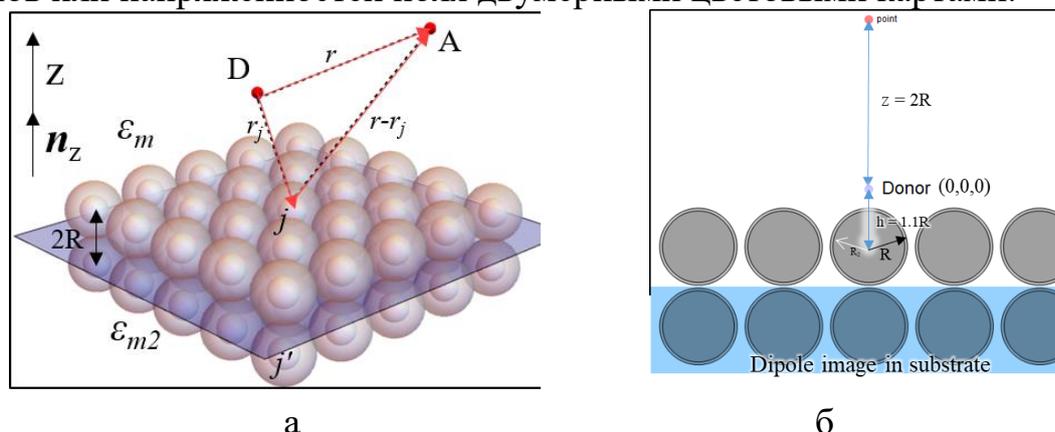


Рис. 1. Геометрия системы из решетки на подложке, в которой формируются контактные диполи-изображения шаровых узлов, а также молекул донора (D) и акцептора (A): а) трехмерная картина; б) ее двумерный срез.

В работах [1,3] рассматривались системы с квазидвумерной структурой из наноразмерных однородных металлических шаров с гексагональной либо квадратной упаковкой. В настоящей работе рассматриваются наночастицы, имеющие слоистую структуру – диэлектрическое ядро радиуса R_1 и оболочку толщиной $R_2 - R_1$ из серебра или золота. Предполагается, что решетка из таких частиц размещена на твердой плоской подложке, влияние которой на формируемые поля можно учесть посредством размещения в подложке диполей-изображений от узлов решетки [4]. В используемой модели была учтена, также, диссипация энергии поля в решетке. При проведении расчетов рассматривались две первые

координационные сферы структуры с гексагональной упаковкой наночастиц, дающие наибольший вклад в определяемые величины полей и скоростей процессов.

Рассматриваемая регулярная решетка является идеализированной моделью совокупности нанесенных на подложку металлических наночастиц [5]. При необходимости действительно регулярная сверхрешетка может быть синтезирована в пористой матрице оксида анодированного алюминия. Важно отметить, что разработка методов прецизионной сборки 2D-суперрешеток (super-lattice) плазмонных наночастиц дает возможность использования четко определенных коллективных плазмонных мод такой системы.

Для эффективного тензора дипольной поляризуемости решетки из сферических нанокompозитных частиц можем записать [1-2]

$$\tilde{\alpha}_{eff}(\omega) = \left[\mathbf{I} - \alpha_0(\omega) \sum_{j=1}^N \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}_j) \right]^{-1} \alpha_0(\omega). \quad (1)$$

где α_0 - дипольная поляризуемость отдельной слоистой наночастицы [3]

$$\alpha_0(\omega) = \frac{[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_m][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c] - [2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_m][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c] \xi^3}{[\varepsilon(\omega) + 2\varepsilon_m][2\varepsilon(\omega) + \varepsilon_c] - 2[\varepsilon(\omega) - \varepsilon_m][\varepsilon(\omega) - \varepsilon_c] \xi^3} R_2^3, \quad (2)$$

где $\varepsilon(\omega)$ - частотнозависимая диэлектрическая проницаемость (ДП) металла оболочки, а ε_c - ДП непроводящего кора; $\xi = R_1 / R_2$. Предполагается, что пространство вне шара заполнено средой с диэлектрической проницаемостью ε_m .

$\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r})$ - тензор Грина ближнего поля дипольного источника, определяемый соотношением

$$\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = r^{-3} (3\mathbf{n} \mathbf{D} \mathbf{n} - \tilde{\mathbf{I}}). \quad (2)$$

Результирующая напряженность квазистатического поля от дипольного источника с моментом \mathbf{p} в пространстве над такой решеткой определяется выражением

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{3(\mathbf{p}\mathbf{r})\mathbf{r} - \mathbf{p}r^2}{r^5} + \sum_{j=1}^N \frac{[3(\mathbf{p}_{eff}^{(j)}(\omega)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j))(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) - \mathbf{p}_{eff}^{(j)}(\omega)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)^2]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|^5} - \nabla \phi'(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где наведенный дипольный момент в (j) -м элементе решетки

$$\mathbf{p}_{eff}^{(j)}(\omega) = \tilde{\alpha}_{eff}(\omega) \frac{3(\mathbf{p}\mathbf{r}_j)\mathbf{r}_j - \mathbf{p}r_j^2}{r_j^5}.$$

Вклад $\varphi'(\mathbf{r})$ в результирующий потенциал поля от диполей-изображений (Рис. 1) решетки в подложке с ДП ε_{sub} [6] осуществлен введением в (3) дополнительной решеточной суммы

$$\varphi'(\mathbf{r}) = \frac{\varepsilon_m - \varepsilon_{sub}}{\varepsilon_m + \varepsilon_{sub}} \sum_{j=1}^N \left[-\mathbf{p}_{eff}^{(j)}(\omega) + 2(\mathbf{p}_{eff}^{(j)} \mathbf{n}_z) \mathbf{n}_z \right] \frac{[\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - 2R\mathbf{n}_z)]}{|\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j - 2R\mathbf{n}_z)|^5}.$$

На рис. 2 для сравнения приведены спектры дипольных поляризуемостей плоской решетки и отдельной слоистой наночастицы как ее узлового элемента. Взаимодействие между элементами решетки приводит к расщеплению спектральных полос, характерных для поляризуемости отдельного наноконструкта.

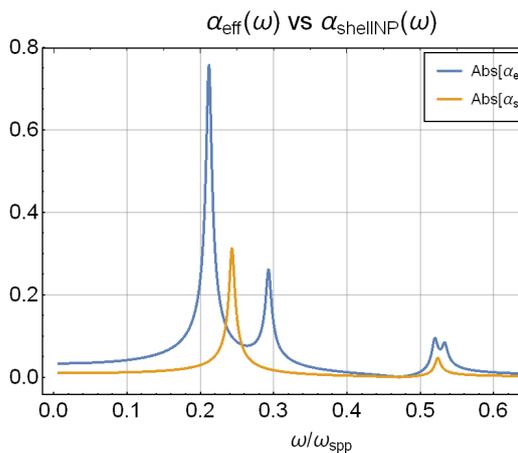


Рис. 2

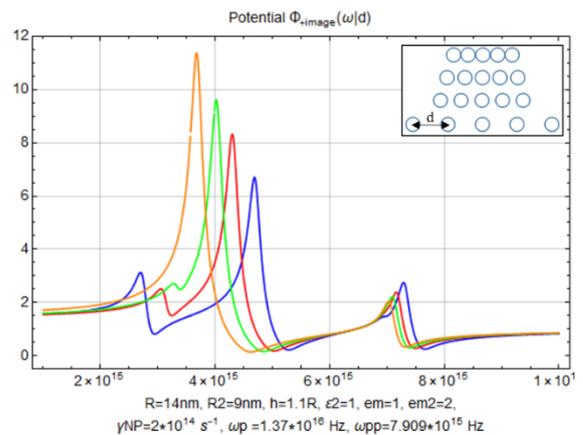


Рис. 3

Рис. 2. Частотная зависимость эффективной поляризуемости кластера решетки и отдельной оболочечной наночастицы. Для $|\alpha_0(\omega)|$ характерны 2 резонанса, тогда как для $\text{Tr}[\alpha_{eff}(\omega)]$ в спектре наблюдается два дополнительных максимума.

Рис. 3. Трансформация частотной зависимости потенциала ближнего поля над решеткой при изменении ее периода $d = a \cdot R$. На верхней вставке показана последовательность изменения периода решетки.

При увеличении периода решетки спектр ее поляризуемости сдвигается в низкочастотную область (рис. 3), при этом расщепленные спектральные полосы начинают сближаться, амплитуда одной из полос возрастает, а другой – уменьшается до полного слияния с высокоамплитудной полосой.

На рис. 4 представлены частотные зависимости потенциала ближнего поля для решеток с проводящими оболочками из Ag и Au. На рис. 4а наблюдаются различия в спектрах ближнего поля, заключающиеся в разных величинах амплитуд практически идентичных резонансных полос, полученных в предельном случае высокочастотной части ДП $\varepsilon_\infty = 1$. В более близком к реальной ситуации случае различных параметров ε_∞ (рис. 4б) для Ag (3,7) и Au (9,84) спектры ближнего

поля для решеток из этих металлов существенно деформируются и смещаются относительно друг друга по частотной шкале.

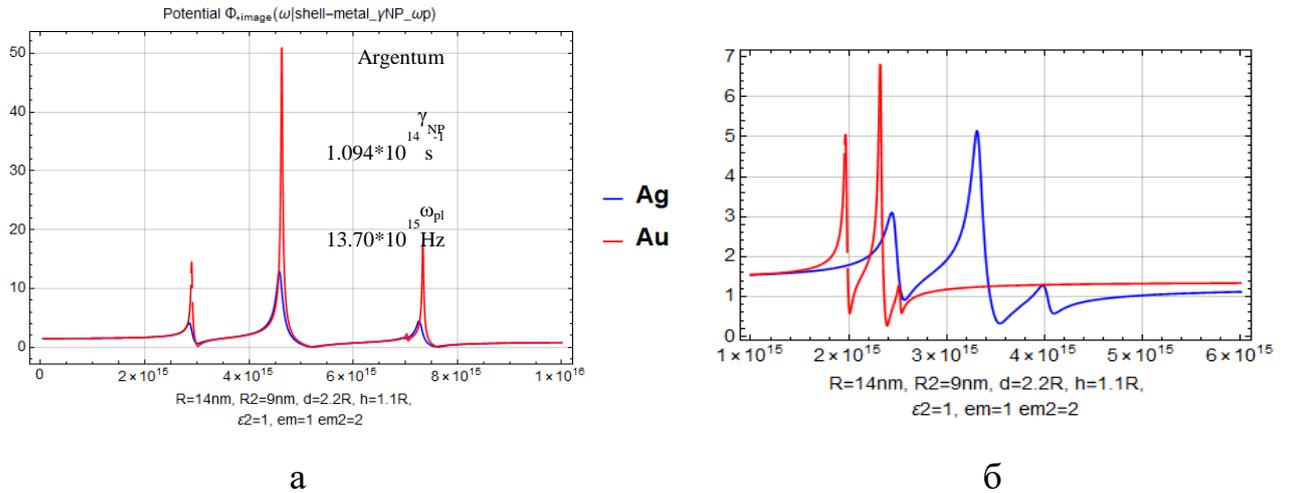


Рис. 4. Частотные зависимости потенциала ближнего поля для решеток из наночастиц с оболочками из Ag и Au. а) при $\epsilon_\infty = 1$; б) при ϵ_∞ , различных для Ag и Au: 3,7 и 9,84.

Люминесценция молекул вблизи плазмонной нанорешетки

Плазмонная инициация люминесценции осуществляется посредством увеличения скорости $w_{sp}(z_D | \omega)$ радиационного спонтанного перехода в наноструктуре

$$w_{sp}(z_D | \omega) = \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{\hbar c^3} |\mathbf{p}_{eff}|^2 \tag{4}$$

за счет формирования эффективного дипольного момента перехода [1-2]:

$$\mathbf{p}_{eff} = \mathbf{p} + \sum_j \mathbf{p}_{eff}^{(j)} = \mathbf{p} + \sum_j \tilde{\alpha}_{eff}(\omega) \frac{3(\mathbf{p}\mathbf{r}_j)\mathbf{r}_j - \mathbf{p}r_j^2}{r_j^5}, \tag{5}$$

Безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения от молекулы донора (D) на плазмонные моды наночастицы с последующим затуханием этих мод характеризуется скоростью U такого процесса, записываемой в виде

$$U(\omega | \mathbf{r}) = (2\hbar)^{-1} V \text{Im}[\mathbf{E}^*(\omega) \tilde{\alpha}_{eff}(\omega) \mathbf{E}(\omega)] = (2\hbar)^{-1} V \text{Im}[\mathbf{p}_D \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \tilde{\alpha}_{eff}(\omega) \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}) \mathbf{p}_D] \tag{6}$$

И только для случая отдельной шаровой изотропной наночастицы эта скорость пропорциональна мнимой части эффективной скалярной поляризуемости $\alpha_0(\omega)$, определенной формулой (2)

$$U(\omega, r, \theta) = \frac{1}{2\hbar} \frac{p_D^2}{\varepsilon_m^2 r^6} (1 + 3\cos^2 \theta) \text{Im} \alpha_0(\omega), \quad (7)$$

где $\varepsilon_m = \varepsilon_m(\omega_{if})$ – диэлектрическая проницаемость среды на частоте перехода $i \rightarrow f$, а $\text{Im} \alpha_0(\omega) > 0$. Радиус-вектор \mathbf{r} берет свое начало в центре наночастицы.

Частотные и дистанционные зависимости скорости $U(h|\omega)$ безызлучательного переноса энергии от молекулы к решетке представлены на рис. 5.

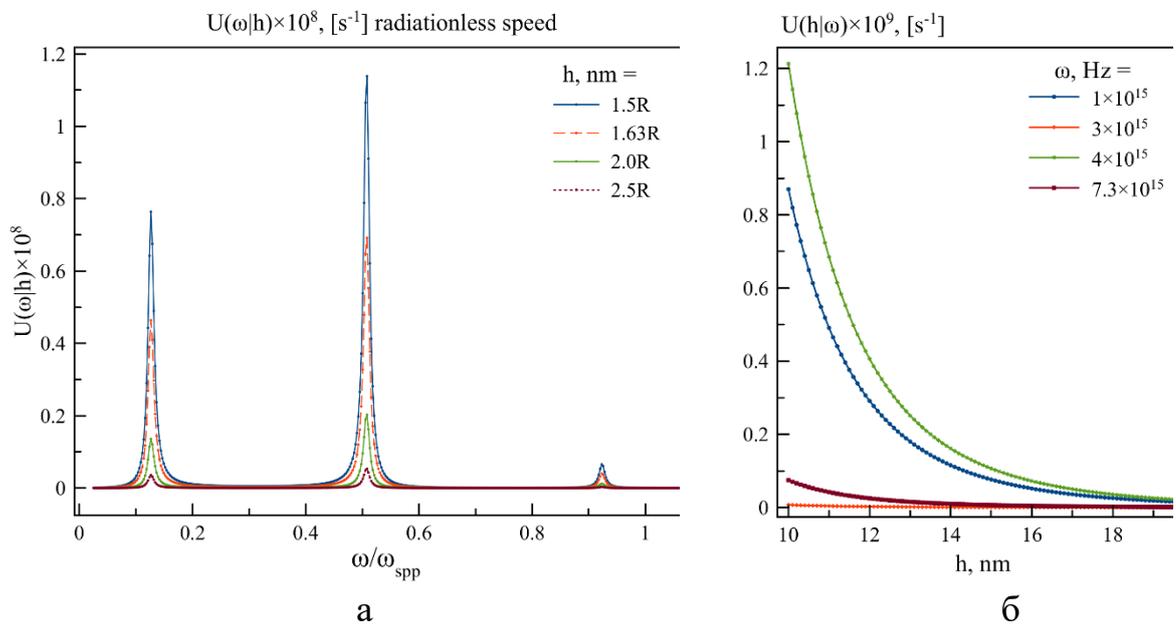


Рис. 5. а) Спектр скорости безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения от молекулы к решетке при различных расстояниях $z_D=h$ между молекулой и решеткой; б) Дистанционные зависимости $U(h|\omega)$ от h на околорезонансных частотах.

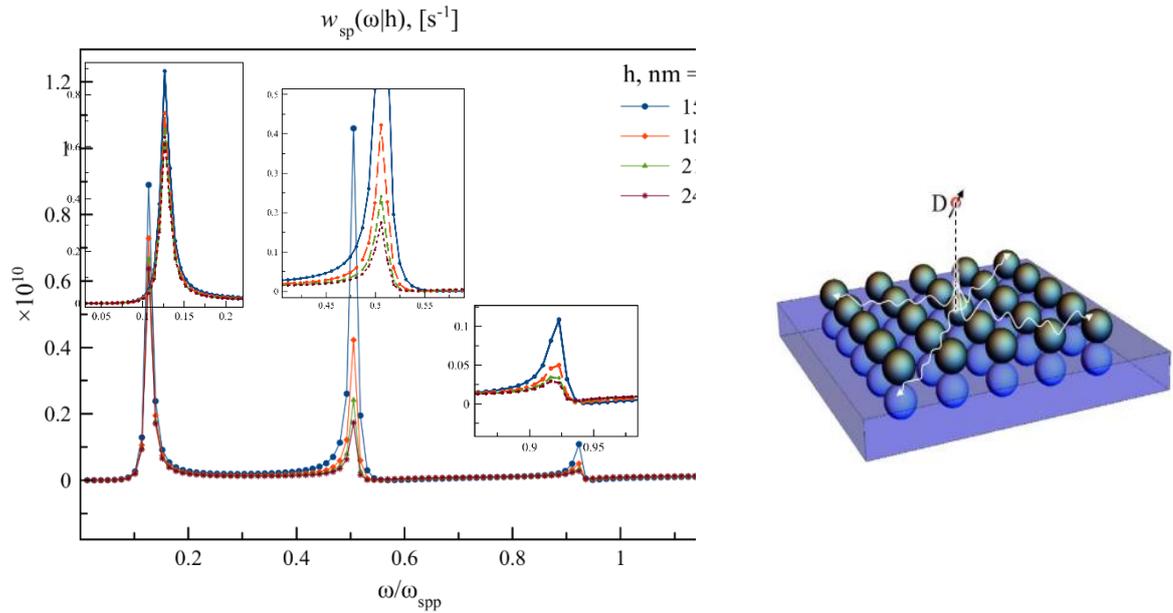


Рис. 6. Спектр скорости $w_{sp}(z_D | \omega)$ спонтанных переходов в системе «донор-решетка» при различных расстояниях h между решеткой и молекулой. На трех вставках выделены резонансные пики – низкочастотный – связанный с переходами в молекуле донора, центральный и высокочастотный – плазмонные резонансы решетчатой системы

Спектральная плотность N_ω числа фотонов, испущенных объединенной системой «D-NP» на частоте ω , определяется как произведение вероятности $w_{sp}(\omega)$ спонтанного перехода (4) на функцию формы линии, которую будем считать лоренцевой, с шириной, определяемой скоростью $U(h|\omega)$ диссипации и скоростью $w_{sp}(\omega)$ плазмон-активированного радиационного распада

$$N_\omega(\omega | z_D) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{w_{sp}^2(\omega | z_D) \Gamma(\omega | z_D)}{(\omega - \omega_{if}^{(D)})^2 + \Gamma^2(\omega | z_D)}. \quad (8)$$

Здесь, в (8), $\omega_{if}^{(D)}$ - резонансная частота лоренцева контура спектральной полосы люминесценции донора; $\Gamma(\omega | z_D) = w_{sp}(\omega | z_D) + U(\omega | z_D) + K$ - полная ширина линии возбужденного состояния донора; K - скорость одномолекулярной безызлучательной релаксации донора.

При наличии в системе молекулярного акцептора А энергии лоренцева ширина задается общей скоростью $\Gamma(\omega | z_D, z_A) = w_{sp}(\omega | z_D) + U_{tot}(\omega | z_D, z_A) + K$, где скорость диссипации $U_{tot}(\omega | z_D, z_A, r_{DA}) = U_{DA}(\omega | z_D, z_A, r_{DA}) + U(\omega | z_D)$.

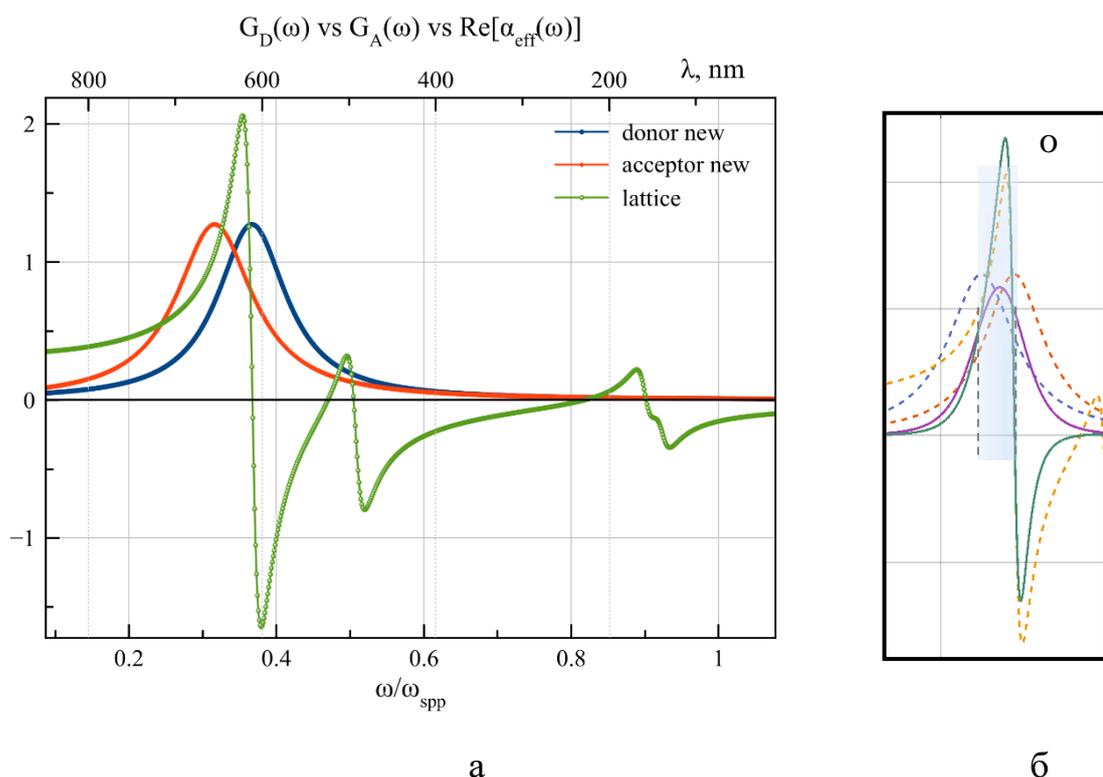


Рис. 7. а) Перекрывающиеся спектры люминесценции донора, поглощения акцептора и реальной части эффективной поляризуемости решетки; б) Дифференциальное перекрытие трех спектров: молекул D и A, а также решетки вблизи частоты плазмонного резонанса ω_{spp} . Пурпурная кривая отражает спектральное перекрытие Д-А, изумрудная кривая – тройное перекрытие ДА-решетка.

Эффективная скорость $U_{DA}(\omega | z_D, z_A, r_{DA})$ межмолекулярного переноса энергии в ДА-системе вблизи плазмон-активируемой решетки в большой степени определяется спектральными перекрытиями компонентов системы, представленными на рис. 7.

На основании проведенных в работе расчетов были сделаны следующие выводы о свойствах 2D-решеток из наночастиц с плазмонными оболочками.

Решетка из слоистых наночастиц с металлической оболочкой и диэлектрическим кором демонстрирует наличие четырех разных по амплитуде плазмонных резонансов. При уменьшении толщины оболочки НЧ плазмонный отклик системы естественным образом уменьшается. Увеличение радиуса кора смещает плазмонный резонанс в низкочастотную область.

С увеличением расстояния между узлами решетки максимумы в спектре смещаются в низкочастотную область с одновременным сглаживанием малого резонансного низкочастотного пика.

Введение в систему диэлектрической подложки приводит к усилению ближнего поля решетки на 13% при достаточно больших значениях диэлектрической проницаемости ϵ_{sub} .

Оптимальное для спонтанного перехода в системе «молекулярный донор – решетка» соотношение внешнего радиуса нанокompозитной глобулы и периода

решетки составляет величину 1:2.5. При увеличении диэлектрической проницаемости материала ядра композитной частицы люминесцентные свойства молекулярного донора вблизи решетки становятся хуже. Скорость спонтанных переходов составляет при этом величину порядка 10^7 - 10^9 с⁻¹ (вплоть до 10^{10} в области резонанса). Наблюдается трехкратное увеличение амплитуды вероятности $w_{sp}(\omega)$ радиационного перехода в системе «молекула-решетка» по сравнению со скоростью спонтанного перехода в одиночном донорном излучателе.

Наиболее высокая скорость диссипации энергии донора на решетке формируется при отношении d/h периода решетки к расстоянию между молекулой и решеткой равном $d/h \approx 0.4$.

Скорость межмолекулярного донор-акцепторного переноса энергии может быть увеличена введением в систему канала передачи энергии через плазмонную подсистему частично, или полностью регулярной 2D-решетки композитных наночастиц на диэлектрической подложке. С учетом влияния подложки поправка к скорости фёрстеровского переноса составляет величину вплоть до 11%. Этот параллельный канал переноса энергии возбуждения хорошо регулируется в реальном эксперименте [5] изменением расстояния между слоями донорных и акцепторных молекул, выбором химической специфики молекулярной структуры, определяющей степень перекрытия ее электронных спектров со спектром эффективной дипольной поляризуемости решетки из композитных плазмонных узлов. Желаемый отклик с подавлением или увеличением скорости молекулярных процессов в рассмотренной гибридной системе можно получить варьируя степень перекрытия спектров Д и А с полосами плазмонных резонансов оболочечных наноструктур, организованных в периодическую 2D-сверхрешетку.

Исследования дистанционных зависимостей спектральной плотности (8) показали, что максимум интенсивности люминесценции гибридной системы D-A-2D-super-lattice с учетом всех диссипативных каналов, получающих в ней развитие, формируется на расстоянии h около 7.5 нм. Наиболее высокая скорость для процесса FRET наблюдается при $h=12.2$ нм ($r_{DA}=15$ нм).

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

Список литературы

1. Кучеренко, М.Г. Радиационные и безызлучательные процессы в молекулярных системах над квазидвумерной решеткой плазмонных наночастиц / М. Г. Кучеренко, А. П. Русинов, Н. Х. Ибраев, Е. В. Селиверстова // Материалы междунар. конф. «11th International Conference «Chaos and structures» in nonlinear systems. Theory and experiment» - 2019. - С. 128-133.
2. Кучеренко, М.Г. Радиационные спектры и частотные зависимости скорости межмолекулярного переноса энергии над двумерной плазмонной решеткой / Кучеренко М.Г., Русинов А.П. // Сборник трудов XII Международной конференции – 2020, СПб - С. 324-326.

3. Kucherenko, M.G. Plasmon resonances in nanocomposites with degenerated electron gas of metal components and their demonstration in photonics of molecular hybrid systems // Eurasian Physical Technical Journal. 2016. Vol.13. No.1(25). P. 6-14. ISSN 1811-1165.

4. Берковиц, В. Л. Эффекты локального поля в спектрах анизотропного оп-тического отражения поверхности (001) арсенида галлия / В.Л. Берковиц, А.Б. Гордеева, В.А. Кособукин // ФТТ. – 2001. – Т.41. - В.6. – С. 985.

5. Ibrayev, N. Plasmon effect in the donor-acceptor pairs of dyes with various ef-ficiency of FRET / N. Ibrayev, E. Seliverstova, N. Zhumabay, D. Temirbayeva // Journal of Luminescence. – 2019. – V. 214. – No. 116594.

6. Ландау, Л.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.

СПЕКТРЫ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ СЛОИСТЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОКОМПОЗИТОВ В РЕЖИМЕ СПАЗЕРА С ВЫРОЖДЕННЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ МЕТАЛЛА ОБОЛОЧКИ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент, Пискунов А.А.

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

Потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ электрического поля вырожденного электронного газа в металлических наночастицах (НЧ) может быть найден из решения уравнения Томаса-Ферми [1-2]. На его основе в работах [2-3] была определена дипольная динамическая поляризуемость однородной металлической наноглобулы. В то же время, определенный интерес для исследования радиационных и безызлучательных молекулярных процессов в ближнем поле сферических плазмонных наноплазмонных представляет определение дипольной динамической поляризуемости двухкомпонентного шарового нанокompозита со структурой «шар-оболочка». Характеристики такой сложной наноплазмонной являются более гибкими по сравнению с характеристиками однородного проводящего шара за счет вариации диэлектрических проницаемостей компонентов композита и их радиусов. В работах [4-7] исследовано влияние вырожденности электронного газа сферической металлической наноплазмонной оболочки и проводящего кора на резонансное поведение дипольной поляризуемости двуслойного шарового композита в монохроматическом электромагнитном поле на оптических частотах ω . При учете диссипативных процессов в проводниках в теорию вводятся комплексные диэлектрические проницаемости компонентов. Графики частотных зависимостей действительной и мнимой частей поляризуемости сферического нанокompозита получены в [4-7] для различных значений радиусов слоистых частиц, длин томаса-фермиевского экранирования и постоянных затухания плазмонов в металлах. При включении нанокompозита в систему имеет место плазмонное ускорение процесса безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения между молекулами, размещенными вблизи композитной НЧ, а также изменение их радиационных характеристик. В то же время необходим учет появления дополнительного релаксационного канала в виде необратимого переноса энергии от молекулы к нанокompозиту. Как и в случае однородной частицы [3], скорость безызлучательного переноса энергии между молекулами вблизи композитной наночастицы включает в себя в виде отдельных слагаемых модуль и реальную часть динамической поляризуемости нанокompозита с вырожденным электронным газом оболочки.

Если диэлектрический кор слоистого композита представляет собой активную среду с возможностями усиления в ней электромагнитного поля, то на основе наносистемы такого рода может быть создан генератор плазмонных колебаний в оболочке, получивший название спазера [8-10]. Слоистая глобула, электронный газ металлической оболочки которой является вырожденным, а

диэлектрическое ядро подвергается внешней накачке и становится неравновесной системой, рассматривается во второй части данной работы.

1. Пассивный слоистый нанокompозит в однородном внешнем поле.

Для нахождения потенциала $\delta\varphi(r, \theta)$ квазистатического поля в случае вырожденного электронного газа с плотностью n_j ($j=1,2$) металлической оболочки 2 и кора 1 в [4-7] использованы линеаризованные уравнения Томаса-Ферми. В сферических координатах при $r < R_1$, $k_1 = k_c$ и $R_1 < r < R_2$, $k = k_2$ эти уравнения принимают вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \delta\varphi \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \delta\varphi}{\partial \theta} \right) = -k_j^2 \delta\varphi, \quad (1)$$

$$k_j^2 = -\frac{4}{\pi \varepsilon_j(\omega) l_j^2} > 0, \quad l_j = (3\pi^2 n_j)^{-1/3} \sqrt{\frac{\hbar^2}{m e^2}} = \sqrt{r_B \langle r_j \rangle}. \quad (2)$$

Постоянные l_j в (2) определяют характерные длины $l_j = \sqrt{r_B \langle r_j \rangle}$ томас-фермиевского экранирования для металла типа j со средним расстоянием между свободными электронами $(3\pi^2 n_j)^{-1/3} = \langle r_j \rangle$ и $r_B = \hbar^2 / (m e^2)$. Потенциал поля вне композита удовлетворяет уравнению Лапласа и является суммой потенциалов внешнего поля и наведенного на композите диполя.

В случае внешнего переменного поля $E_0(\omega)$ диэлектрические проницаемости $\varepsilon_1(\omega)$ ядра и $\varepsilon_2(\omega)$ оболочки зависят от частоты ω этого поля, а диэлектрическая проницаемость ε_m среды, заполняющей пространство вне композита, принимается равной постоянной величине (т.е. частотная дисперсия среды не имеет места). В случае вырожденности электронного газа металлов ядра и оболочки для дипольной поляризуемости $\alpha_0(\omega)$ нанокompозита во внешнем поле получаем ($\xi = R_1 / R_2 \leq 1$)

$$\alpha_0(\omega) = \frac{\varepsilon_2(\omega) k_2 [j_1'(k_2 R_2) - \beta y_1'(k_2 R_2)] - \varepsilon_m (1/R_2) [j_1(k_2 R_2) - \beta y_1(k_2 R_2)]}{\varepsilon_2(\omega) k_2 [j_1'(k_2 R_2) - \beta y_1'(k_2 R_2)] + 2\varepsilon_m (1/R_2) [j_1(k_2 R_2) - \beta y_1(k_2 R_2)]} R_2^3. \quad (3)$$

Здесь и ниже $j_1(k_j R_j)$, $y_1(k_j R_j)$ - сферические функции Бесселя первого и второго рода первого порядка. Функция $\beta = \beta(\omega, k_1, k_2, R_1)$ зависит от диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(\omega)$ металлической оболочки, диэлектрической проницаемости $\varepsilon_1(\omega)$ шаровой сердцевины и ее радиуса R_1

$$\beta(\omega, k_1, k_2, R_1) = \frac{\varepsilon_2(\omega) k_2 j_1'(k_2 R_1) - \varepsilon_1(\omega) j_1(k_2 R_1) k_1 j_1'(k_1 R_1) / j_1(k_1 R_1)}{\varepsilon(\omega) k y_1'(k R_1) - \varepsilon_c(\omega) y_1(k R_1) k_1 j_1'(k_1 R_1) / j_1(k_1 R_1)}. \quad (4)$$

Особый характерный случай возникает при отсутствии вырождения одного из компонентов слоистой наноструктуры $R_1 \neq 0, R_2 > R_1$, например при $k_1 \rightarrow 0$ (вырожденный электронный газ оболочки и невырожденный газ кора). Такой случай может иметь место, например, для гибридной нанокompозитной системы «металл-полупроводник», когда электронный газ металла – вырожденный, а полупроводника – нет. При этом $k_2(\omega) \neq 0, k_1 \rightarrow 0$, и для функции (4) получаем

$$\beta(\omega, k, k_c \rightarrow 0, R_1) = \frac{\varepsilon(\omega)kj'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega)j_1(kR_1) / R_1}{\varepsilon(\omega)ky'_1(kR_1) - \varepsilon_c(\omega)y_1(kR_1) / R_1}. \quad (5)$$

Графики для дипольной поляризуемости $\alpha_0(\omega)$ нанокompозита во внешнем поле представлены в [4-6], и они демонстрируют наличие множественных резонансных максимумов в спектре.

2. Слоистый нанокompозит с активным ядром и оболочкой с вырожденным электронным газом.

При активации ядра композита внешним источником накачки такой композит начинает проявлять признаки генератора электромагнитных колебаний, которые становятся наиболее высокоамплитудными в оболочке спазера, выполняющей функции плазмонного резонатора. Проведем теперь обобщение модели спазера, приведенной в работах [9-10], имеющей точное решение и названной авторами “Toy model”, на случай вырожденного электронного газа металлической оболочки. Как и в случае пассивного нанокompозита во внешнем поле, будем исходить из математического базиса, основанного на линеаризованном уравнении (1) Томаса-Ферми [4-7]. В рассматриваемом случае исходным полем системы является однородное поле E_1 внутри кора, порождаемое внешней накачкой, не обязательно имеющей электромагнитную природу.

Тогда потенциал поля внутри шара, как и в предыдущем разделе, по-прежнему будет таким

$$\delta\varphi_I(r, \theta) = -E_1 r P_1(\cos \theta), \quad r < R_1. \quad (6)$$

Потенциал поля вне композита также пропорционален полиному Лежандра $P_1(\cos \theta)$

$$\delta\varphi_{III}(r, \theta) = E_1 \frac{\alpha_1(\omega)}{r^2} P_1(\cos \theta), \quad r > R_2. \quad (7)$$

Внутри оболочки потенциал поля представляет собой комбинацию сферических функций Бесселя $j_1(k_2 r), y_1(k_2 r)$ первого и второго рода.

Таким образом, постоянная (во времени) величина $\alpha_1(\omega)$ является дипольной динамической поляризуемостью нанокompозита в режиме спазера. Его дипольный момент $P_{sp}(\omega) = \alpha_1(\omega)E_1(\omega)$, является источником поля вне спазера, тогда как первичное поле E_1 внутри кора определяется внешней накачкой, временами релаксации и частотой. Сшивая решения на граничных сферах радиуса R_1 и R_2 , для поляризуемости $\alpha_1(\omega)$ получаем выражение ($k_2(\omega) = k$, $\varepsilon_2(\omega) \equiv \varepsilon(\omega)$), в котором отсутствует величина диэлектрической проницаемости материала ядра

$$\alpha_1(\omega) = \frac{R_1 R_2^2 \varepsilon(\omega) [j(kR_2)y'(kR_2) - j'(kR_2)y(kR_2)]}{\varepsilon(\omega) [j'(kR_2)y(kR_1) - j(kR_1)y'(kR_2)] + \frac{2\varepsilon_m}{kR_2} [j(kR_2)y(kR_1) - j(kR_1)y(kR_2)]} \quad (8)$$

Основной идеей Toy model, предложенной в работах [9-10], является введение эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{gain}(\omega, E_1, D_0)$ усиливающей среды. При положительной начальной инверсии $D_0 > 0$ мнимая часть ε_{gain} отрицательна: $\text{Im} \varepsilon_{gain}(\omega, E_1, D_0) < 0$.

Сшивка потенциалов и радиальных компонентов напряженности на граничных сферах приводит к равенству $\varepsilon_{gain}(\omega, E_1, D_0) = F(\omega)$, где

$$\begin{aligned} \frac{F(\omega)}{\varepsilon_2(\omega)kR_1} &= \\ &= \frac{\varepsilon_2(\omega) [j'(kR_2)y'(kR_1) - j'(kR_1)y'(kR_2)] + \frac{2\varepsilon_m}{kR_2} [j(kR_2)y'(kR_1) - j'(kR_1)y(kR_2)]}{\varepsilon_2(\omega) [j'(kR_2)y(kR_1) - j(kR_1)y'(kR_2)] + \frac{2\varepsilon_m}{kR_2} [j(kR_2)y(kR_1) - j(kR_1)y(kR_2)]} \end{aligned} \quad (9)$$

Следуя рассуждениям, приведенным в [9-10], получаем следующее выражение для определения частоты ω_{sp} спазирования

$$\text{Im} \frac{F(\omega_{sp}) - \varepsilon_1}{-i + 2\omega_{sp}\Gamma} = 0. \quad (10)$$

Здесь в (10) ω_0 – частота перехода в двухуровневом атоме активной среды, $T_2 = \Gamma^{-1}$ – время фазовой релаксации.

Ранее было наглядно показано [4-7], [11] что при больших длинах томас-фермиевского экранирования квантовая модель вырожденного электронного газа плавно переходит в классическую. Типично вырожденному электронному газу металлической оболочки соответствует длина томас-фермиевского экранирования порядка $l \sim 0.1$ нм. С увеличением длины экранирования электронный газ утрачивает свою вырожденность, и уже при $l \sim 3-5$ нм его можно считать практически невырожденным.

При $l \sim 3.76$ нм значение частоты спазирования составляет $0.209 \cdot \omega_{pl}$. При уменьшении же длины экранирования до значений $l \sim 0.102$ нм вместе с частотой $0.209 \cdot \omega_{pl}$ появляются дополнительные решения уравнения (10) – частоты $0.188 \cdot \omega_{pl}$ и $0.227 \cdot \omega_{pl}$.

Подставляя найденную из (10) частоту ω_{sp} спазирования в формулу для порога генерации [9-10], приходим к следующему выражению для порогового значения инверсии

$$D_{thresh} = \frac{\omega_{sp}}{\omega_0} \left(1 + \left(\frac{\omega_{sp}^2 - \omega_0^2}{2\omega_{sp}\Gamma} \right)^2 \right) \operatorname{Re} \left[\frac{F(\omega_{sp}) - \varepsilon_1}{-i + \frac{\omega_{sp}^2 - \omega_0^2}{2\omega_{sp}\Gamma}} \right]. \quad (11)$$

При $l \sim 3.76$ нм на частоте спазирования $0.209 \cdot \omega_{pl}$ теория предсказывает значение порога генерации, равное 3.22. При $l \sim 0.102$ нм на частоте спазирования $0.209 \cdot \omega_{pl}$ значение порога генерации возрастает до 2437, а для частот $0.227 \cdot \omega_{pl}$ и $0.188 \cdot \omega_{pl}$ оно равно соответственно 719 и 1059.

На рис. 1-3 представлены результаты численного расчета частотных зависимостей (в единицах плазменной частоты) дипольной поляризуемости $\alpha_1(\omega)$, определенной формулой (8), для длин экранирования от 0.1 нм до 3 нм. Использовались следующие значения параметров: $\omega_{pl} = 1$, $\gamma = 0.03$, $R_1 = 1.1$ нм, $R_2 = 8$ нм, $\varepsilon_m = 1.4$.

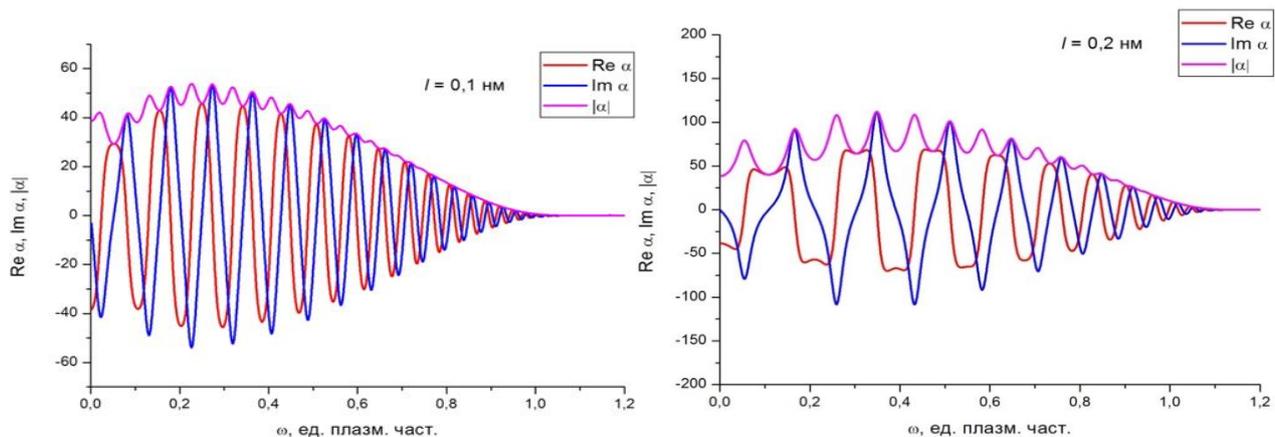


Рис. 1. Частотные зависимости действительной и мнимой частей поляризуемости $\alpha_1(\omega)$ слоистой наночастицы с вырожденным электронным газом металлической оболочки, а также ее модуля, при $l = 0.1$ (слева) и 0.2 (справа) нм.

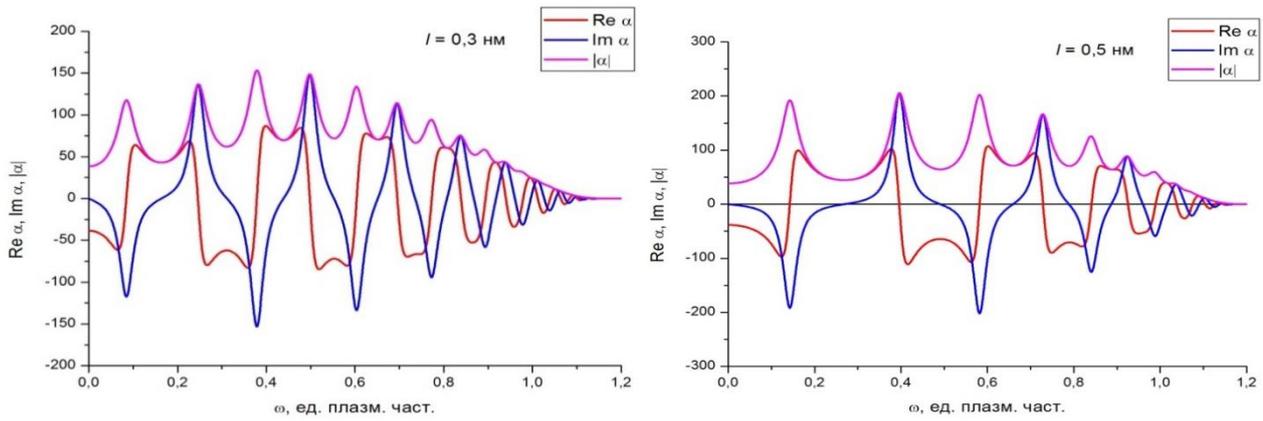


Рис. 2. Частотные зависимости действительной и мнимой частей поляризуемости $\alpha_1(\omega)$ слоистой наночастицы с вырожденным электронным газом металлической оболочки, а также ее модуля, при $l = 0.3$ (слева) и 0.5 (справа) нм.

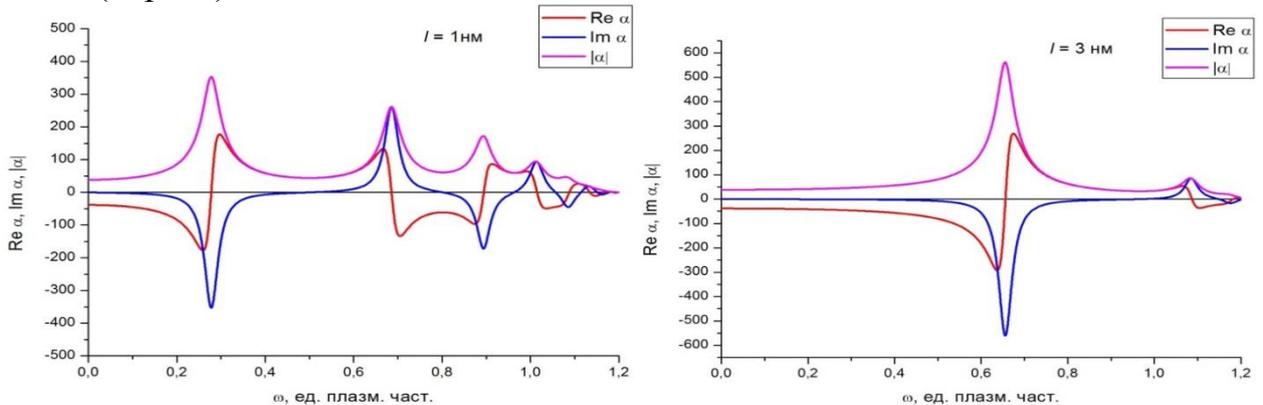


Рис. 3. Частотные зависимости действительной и мнимой частей поляризуемости $\alpha_1(\omega)$ слоистой наночастицы с вырожденным электронным газом металлической оболочки, а также ее модуля, при $l = 1$ (слева) и 3 (справа) нм.

Таким образом, как видно из рис. 1-3, при неизменных радиусах диэлектрического ядра и металлической оболочки слоистой наночастицы с уменьшением длины экранирования спектральные кривые $\text{Re } \alpha_1(\omega)$, $\text{Im } \alpha_1(\omega)$ и $|\alpha_1(\omega)|$ заметно изменяются. Кривые на рис. 1 и 2 обладают большим числом резонансов, однако их амплитуда относительно невелика. С увеличением длины экранирования (рис. 3) число резонансов на кривых уменьшается, но существенно увеличивается их амплитуда.

Дипольный момент спазера определяется следующим выражением

$$\mathbf{P}_{sp}(\omega) = \alpha_1(\omega)\mathbf{E}_1(\omega), \quad (12)$$

как в случае классического [9-10], так и в случае вырожденного электронного газа оболочки. Заметим, что в [9-10] поляризуемость $\alpha_1(\omega)$ определяется не выражением – аналогом (8), а формулой, содержащей диэлектрическую проницаемость ε_{gain} кора из активного материала. Первичное же поле внутри ядра спазера можно записать в виде [9-10]

$$E_1 = \sqrt{\frac{(D_0 - D_{thresh})}{D_{thresh}\beta} \left(1 + \left(\frac{\omega_{sp}^2 - \omega_0^2}{2\omega_{sp}\Gamma} \right)^2 \right)}, \quad (13)$$

где β – характерный параметр двухуровневых атомов активной среды с размерностью обратного квадрата напряженности поля, а D_{thresh} определено выражением (11). На рис. 4 представлены частотные зависимости действительной части дипольного момента P_{sp} слоистой наночастицы при накачке D_0 ниже (а) и выше (б) порогового значения в условиях сильного вырождения электронного газа металлической оболочки спазера.

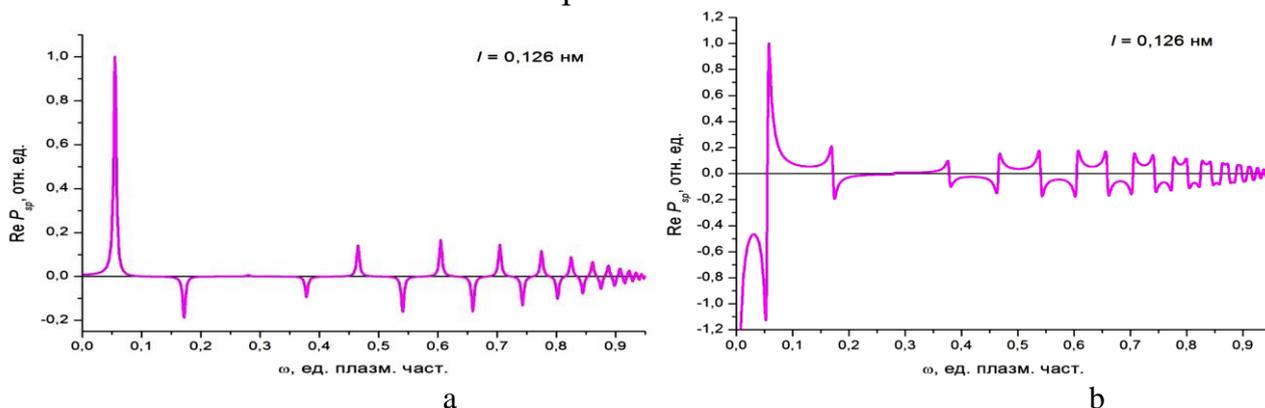


Рис. 4. Частотная зависимость действительной части дипольного момента P_{sp} слоистой наночастицы при накачке D_0 ниже (а) и выше (б) порогового значения и при малой длине экранирования (сильное вырождение).

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

Список литературы

1. *Smirnov M.B., Krainov V.P.* Many-time ionization Thomas-Fermi's cluster by power electromagnetic field // *ЖЭТФ*. 1999. -Vol. **115**. -# 6. –P. 2014-2019.
2. *Krainov V.P., Smirnov M.B.* Evolution of large clusters under action of ultra-short superpower laser pulse // *Uspekhi Fiz. Nauk*. 2000. -Vol. **170**. - # 9. –P. 969-990.
3. *Кучеренко М.Г.* Динамическая поляризуемость наносфера в случае вырожденного электронного газа и ее роль в плазмонном механизме передачи энергии // *Вестник ОГУ*. 2012. №1. С. 141-149.
4. *Кучеренко М.Г., Игнатова Ю.Ф.* Спектры плазмонного резонанса двухкомпонентных сферических металлокомпозитов с учетом вырожденности электронного газа металлов кора и наноболочки // *Матер. Всеросс. научно-метод. конфер. «Университет. комплекс как регион. центр образ., науки и культуры»*. Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2014. -

4014 с. Секция 6 «Вопросы фундамент., прикладной физики и физического образования». - С. 1422-1430.

5. *Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М.* Проявление вырожденности электронного газа металлов в плазмонно-резонансном структурировании спектров поглощения и рассеяния проводящих композитных наночастиц // Сборник трудов Международ. конфер. «Фундамент. проблемы оптики – 2014». Санкт-Петербург. 20-24 октября 2014 / Под ред. профессор В.Г. Беспалова, профессор С.А. Козлова.– СПб: Университет ИТМО, 2014. – С. 113-116.

6. *Kucherenko M.G., Chmereva T.M.* Plasmon resonances in absorption and scattering spectra of bimetallic nanoparticles with degenerate electronic gas // Russian-Japanese Conference «Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials»: Proceedings. 29-31 October 2014. – OSU, Orenburg, Russia / IPK «Universitet», 2014. – P.78-80.

7. *Kucherenko M.G.* Plasmon resonances in nanocomposites with degenerated electron gas of metal components and their demonstration in photonics of molecular hybrid systems // Eurasian Physical Technical Journal. 2016. Vol.13. No.1(25). P. 6-14. ISSN 1811-1165.

8. *Bergman D.J., Stockman M. I.* Surface Plasmon Amplification by Stimulated Emission of Radiation: Quantum Generation of Coherent Surface Plasmons in Nanosystems // Physical Review Letters. – 2003. – V. 90. – № 2. – P. 027402.

9. *Андреанов Е.С., Виноградов А.П., Дорофеев А.В., Зябловский А.А., Лисянский А.А., Пухов А.А.* Квантовая наноплазмоника / Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект». 2015. – 368 с.

10. *Varanov D. G., Andrianov E.S., Vinogradov A. P., Lisiansky A. A.* Exactly solvable toy model for surface plasmon amplification by stimulated emission of radiation // Optics Express. 2013.- Vol. 21. - No. 9. –P. 10779-10791. DOI:10.1364/OE.21.010779

11. *Кучеренко М.Г., Налбандян В.М.* Дипольные поляризуемости и сечения поглощения двухчастичных нанокластеров из проводящих однородных и слоистых частиц с вырожденным электронным газом // Известия вузов. Физика. 2016. -Т. 59. -№ 9. – С. 87-93.

МЕХАНИЗМ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ЗАПИСИ В ПЛЕНКАХ ПВС-ТИОНИН

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

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

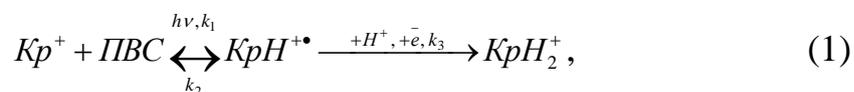
Материалы на основе систем краситель-полимер, активно трансформирующие энергию светового воздействия и обладающие разрешающей способностью на молекулярном уровне, являются основой для разработки устройств оптоэлектронной техники, носителей для записи оптической информации.

Уникальные фотофизические и фотохимические свойства тиазиновых красителей (метиленового голубого, тионина и др.) [1, 2] являются основой для использования этих красителей в качестве генераторов синглетного кислорода, инициаторов фотополимеризации, светочувствительных компонентов в полимерных регистрирующих средах. Связывание тиазиновых красителей с ДНК позволяет влиять на процессы в клетке, получать плёночные структуры, пригодные для молекулярного конструирования и записи информации [3]. Интерес к тиазиновым красителям связан также с применением последних для сенсбилизации бихромированного желатина к красной области спектра, в частности, к излучению *He-Ne* лазера [4]. Исследованию реакций обесцвечивания тионина (ТН) и метиленового голубого (МГ), сопровождающих запись голограмм, посвящён ряд работ [5-7], однако полной ясности в механизме фотохимических превращений тиазиновых красителей (Кр) до сих пор нет.

Целью настоящей работы являлось исследование особенностей голографической записи в плёнках поливинилового спирта (ПВС) с добавками тиазинового красителя тионина.

Ранее [8] нами был предложен механизм фотовосстановления тионина в твёрдой плёнке ПВС под действием *He-Ne* лазера. ПВС, являясь донором электронов, необходимых для фотовосстановления красителя, играет роль кислородонепроницаемой матрицы, что позволяет избежать окисления красителя и продуктов его восстановления. Реакция обесцвечивания метиленового голубого, наряду с фотовосстановлением, включает параллельные процессы деметилирования. Показано, что присутствие в плёнках ассоциатов (димеров) красителей существенно влияет на кинетику обесцвечивания.

Предложено процесс фотовосстановления неассоциированного тионина описывать цепочкой реакций [8]:



где Kp^+ – краситель в основном состоянии; KpH^+ – протонированный семихинон красителя; KpH_2^+ – протонированная лейкоформа красителя; k_1 – константа скорости образования протонированного семихинона красителя; k_2 – константа скорости регенерации красителя из протонированного семихинона; k_3 – константа скорости образования протонированной лейкоформы красителя.

Добавление в плёнки малых количеств глицерина (пластификатора) позволяет управлять соотношением констант скоростей реакционной схемы, и может привести к полному разрушению решёток после окончания записи.

В этой работе в целях проверки предложенного механизма фотовосстановления тионина в матрице ПВС было проведено исследование кинетики фотообесцвечивания при низкой интенсивности облучающего лазера в образцах с малым значением оптической плотности D_0 красителя, т.е. в оптически тонких слоях ($D_0 \ll 1$). В таких условиях изменение концентрации красителя от времени описывается моноэкспоненциальной зависимостью. Обычное фотометрическое детектирование в данном случае невозможно из-за недостаточной чувствительности. Для исследования кинетики фотообесцвечивания красителя в образце *He-Ne* лазером записывалась амплитудная голограмма-решётка. Описание экспериментальной установки и методики проведения экспериментов изложено в работах [3, 9]. Информация о механизме процесса фотовосстановления красителя сохранилась в кинетической кривой формирования голограммы. Кинетика записи голографической решётки исследовалась на начальном участке. В этом случае [9] корень из эффективности голограммы $\eta^{1/2}$ линейно зависит от времени экспозиции.

$$\sqrt{\eta}(t) = 0,57 D_0 k_1 t. \quad (2)$$

Из тангенса угла наклона γ данной прямой к оси времени можно найти константу скорости реакции:

$$k_1 = \operatorname{tg} \gamma / (0,57 D_0). \quad (3)$$

Рассмотренный выше случай имеет место при записи голограмм *He-Ne* лазером с интенсивностью $I_0 \sim 10^{-3}$ Вт/см² (при таких значениях I_0 константа $k_1 \sim 10^{-5}$ с⁻¹) в плёнках ТН – ПВС, пластифицированных глицерином. Пластифицирование полимерной матрицы увеличивает сегментальную подвижность макромолекул, вследствие чего реакция регенерации исходных молекул красителя из семихинона может протекать менее эффективно. Это приводит к уменьшению константы k_2 , а фотообесцвечивание красителя подчиняется кинетическому закону для реакций первого порядка.

На рисунке 1 представлена зависимость $\sqrt{\eta} = f(t)$ для плёнки ТН – ПВС – глицерин, с содержанием глицерина 9,5 % (по массе). Достаточно малая концентрация тионина ($C_{кр} = 2 \cdot 10^{-4}$ г/мл) необходима как для получения

оптически тонкого слоя с требуемой толщиной (30 – 50 мкм), так и для избежания влияния на кинетику записи голограммы ассоциатов красителя.

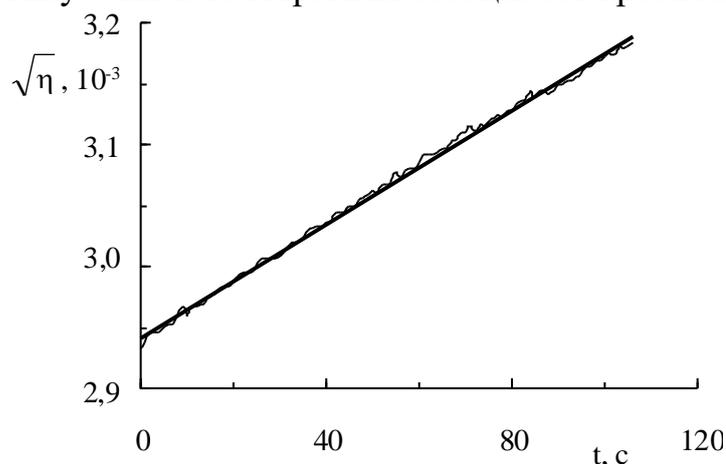


Рисунок 1 - Кинетическая кривая записи голограммы в плёнке ТН – ПВС – глицерин. $C_{кр} = 2 \times 10^{-3}$ г/мл, $C(C_3H_5(OH)_3) = 9,5$ % (по массе), $I_0 = 3,7 \times 10^{-3}$ Вт/см²

Как видно из рисунка 1, в данных координатах зависимость $\sqrt{\eta} = f(t)$ описывается прямой линией. Наличие в уравнении прямой свободного члена обусловлено примесью динамической голограммы на триплетных состояниях красителя и рассеянного света. Однако, вследствие того, что за время записи фотохимической голограммы концентрация красителя изменяется незначительно, вклад триплетной голограммы будет неизменен во всем исследуемом диапазоне времени. Отсутствие фазовой составляющей контролировалось зондированием вне полосы поглощения красителя.

Линейный вид зависимости $\sqrt{\eta} = f(t)$ подтверждает предложенный ранее механизм и позволяет определить квантовый выход реакции образования протонированного семихинона тионина в условиях оптически тонкого слоя. Полученное значение квантового выхода $\Phi_{крН} = (4,9 \pm 0,1) \times 10^{-5}$ коррелирует с результатом, рассчитанным из фотометрических данных.

Установлено, что фотохимические голограммы, записанные *He-Ne* лазером в плёнках Кр-ПВС-глицерин, самопроизвольно стираются после прекращения записи. Время, за которое происходит исчезновение голографической решётки, зависит от количества пластификатора в образце.

Список литературы

1. Теренин, А.Н. Фотоника молекул красителей / А.Н. Теренин.- Ленинград.: Наука, 1967.- 616 с.
2. Кричевский, Г.Е. Фотохимические превращения красителей и светостабилизация окрашенных материалов / Г.Е. Кричевский.- Москва: Химия, 1986.- 248 с.
3. Lantukh, Yu. D. Holographic Investigation of DNA Activated by Organic Dyes /Yu. D. Lantukh, G. A. Ketsle, S.N. Letuta, S.N. Pashkevitch, E. K. Alidzhanov, I.V. Ipatov // Proceedings of SPIE.- 2004.- V. 5447.- P. 375-380.

4. Ганжерли, Н.М. Толстослойный бихромированный желатин для голографии, чувствительный в красной области спектра / Н.М. Ганжерли, Ю.Н. Денисюк, С.П. Коноп, И.А. Маурер // Письма в Журнал Технической Физики.- 2000.- Т. 26.- вып. 16.- С. 22-29.
5. Capolla, N. Real time bleaching of methylene blue or thionine sensitized gelatin / N. Capolla, R. Lessard // Applied Optics.- 1991.- V. 30.- N 10.- P. 1196-1200.
6. Гришина, А. Д. Механизм фотообесцвечивания метиленового голубого в полимерных пленках / А.Д. Гришина // Высокомолекуляр. соединения; Крат. сообщ.- 1977.- Т. 19.- № 3.- С. 411-417.
7. Выговский, Ю.Н. Желатин – глицериновые «красные» регистрирующие системы с метиленовым голубым / Ю.Н. Выговский, П.А. Драбатулин, А.Г. Коноп, С.П. Коноп, А.Н. Малов // Компьютерная оптика.- 1998.- № 18.- С.133-138.
8. Razdobreev, D.A. Investigation of thionine photobleaching under *He-Ne* laser irradiation / D.A. Razdobreev, Yu.D. Lantukh, A.V. Stryapkov // Proceedings of SPIE.- 2004.- № 5447.- P. 380-385.
9. Lantukh, Yu.D. Holographic recording in solid solutions of methylene blue / Yu. D. Lantukh, S.N. Letuta, S.N. Pashkevitch, D.A. Razdobreev // Proceedings of SPIE.- 2001.- № 4644.- P. 516-522.

К ВОПРОСУ О МЕТОДИКЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ОСНОВ СФЕРИЧЕСКОЙ АСТРОНОМИИ НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТОВ ВЫСОТЫ СОЛНЦА НАД ГОРИЗОНТОМ

Макаров В.Н.

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

Аннотация: В настоящей работе приведен один из способов расчета высоты Солнца над горизонтом. Выполнен анализ методики расчета и показано ее применимость для обучения основам сферической астрономии студентов-физиков.

Ключевые слова: методика преподавания астрономии, сферическая астрономия, высота солнца над горизонтом

Настоящая статья представляет собой анализ преподавательской деятельности предмета «Основы астрономии» для студентов-физиков в Оренбургском государственном университете. Известно, что астрономические знания способствуют воспитанию у студентов-физиков современного естественнонаучного мировоззрения. Астрономия включает в себя огромный и разноплановый материал, адаптация которого к педвузовскому уровню, как правило не бывает успешной [1]. На физическом факультете Оренбургского государственного факультета обучаются студенты-физики по направлению подготовки бакалавров: 03.03.02 Физика, 03.03.03 Радиофизика, 12.03.04 Биотехнические системы и технологии. Одной из областей астрономии, которая может быть актуальна для всех направлений подготовки бакалавров – это сферическая астрономия.

Рассмотрим в качестве примера задачу, входящую в расчетно-графическое задание для студентов-физиков Оренбургского государственного университета: «Определите максимальную высоту Солнца над горизонтом в Оренбурге в день вашего рождения». Стоит отметить, что данная постановка задачи вызывает у студентов-физиков несомненный интерес. Методики решения этой задачи была рассмотрены во многих учебниках и учебных пособиях, например, [2]. Рассмотрим один из способов решения подобных задач. Как известно, в первом приближении максимальная высота Солнца над горизонтом в течении года меняется по синусоидальному закону [2]. Однако, функцию синуса можно аппроксимировать набором прямых отрезков. Этот способ дает возможность использовать в расчетах фиксированную величину изменения склонения Солнца на отдельных сегментах года (таблица 1).

Таблица 1 – Скорость изменения склонения на отдельных сегментах года

Даты	$\Delta\delta/\text{сутки}$
19 февраля – 20 апреля (19.02 – 20.04)	+24'

21.03 – день весеннего равноденствия	
21 апреля – 22 мая (21.04 – 22.05)	+18'
23 мая – 22 июня (23.05 – 23.06) 23.06 – день летнего солнцестояния	+ 6'
24 июня – 22 июля (23.06 – 22.07)	- 6'
23 июля – 21 августа (23.07 – 21.08)	-18'
22 августа – 23 октября (22.08 – 23.10) 23.09 – день осеннего равноденствия	-24'
24 октября – 22 ноября (24.10 – 22.11)	-18'
23 ноября – 22 декабря (23.11 – 22.12)	-6'
23 декабря – 21 января (23.12 – 21.01) 23.12 – день зимнего солнцестояния	+ 6'
22 января – 18 февраля (22.01 – 18.02)	+ 18'

Таблица 1 была сформирована на основе экстраполяции графика, приведенного на рисунке 1. Очень важным является демонстрация этого графика студентам при описании методики расчета.

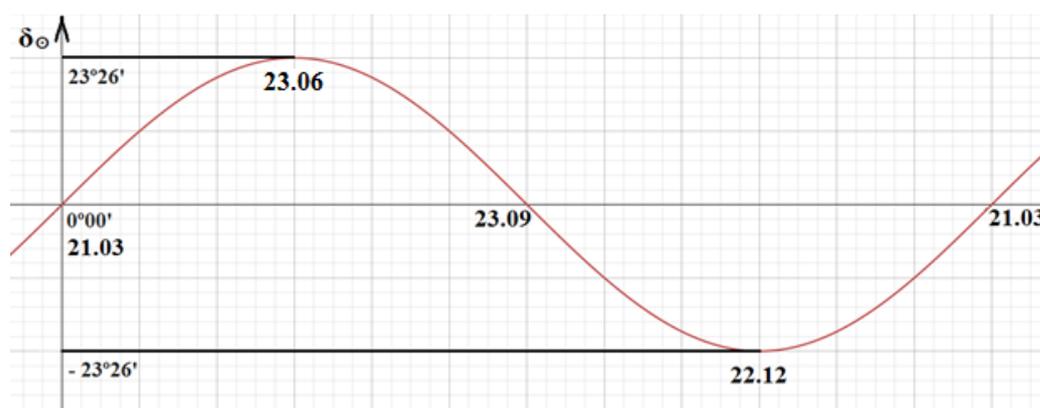


Рисунок 1 – График, иллюстрирующий неравномерную скорость изменения склонения Солнца

Приведенная методика расчета предполагает следующие астрофизические приближения:

- дни равноденствий и солнцестояний не меняются;
- орбита Земли идеально круглая;

- Земля представляет собой идеальный шар;
- В году всегда 365 дней.

Из-за приведенных астрофизических приближений было принято решение сместить даты равноденствий и солнцестояний (таблица 1) и оставить их статичными. Рассмотрим несколько частных случаев решения подобных задач.

Пример 1. Определите высоту Солнца в Оренбурге 21.03, 23.09, 23.06, 22.12?

Перечисленные в примере даты являются ключевыми, относительно которых ведутся более сложные расчеты.

- 21.03, 23.09 – весеннее и осеннее равноденствие, соответственно;
- 23.06, 22.12 – летнее и зимнее солнцестояние, соответственно.

1. Определяем широту, на которой расположен Оренбург: $\varphi = 51^{\circ}46'$.

2. Для 21.03 и 23.09 склонение Солнца равно нулю, т.е. $\delta_{\odot} = 0^{\circ}00'$. Для 23.06 (в день летнего солнцестояние) величина склонения Солнца **максимальна** и численно равна эклиптике, т.е. $\delta_{\odot} = 23^{\circ}26'$. Для 22.12 (в день зимнего солнцестояние) величина склонения Солнца **минимальна** и численно равна отрицательному значению эклиптике, т.е. $\delta_{\odot} = -23^{\circ}26'$.

3. Определяется высота Солнца, используя формулу: $h = \delta_{\odot} + (90^{\circ} - \varphi)$.

Тогда для 21.03, 23.09: $h = 0^{\circ}00' + (90^{\circ} - 51^{\circ}46') = 38^{\circ}14'$.

Пример 2. Определите высоту Солнца в Оренбурге 28 декабря.

1. Определим широту, на которой расположен Оренбурга: $\varphi = 51^{\circ}46'$.

2. Определяем ближайшую в ключевую дату к рассматриваемой. Для 28.12 – это 22.12.

3. Определяем количество дней между этими датами. Для рассматриваемого примера – это 6 дней.

4. Обращаемся к таблице 1.

Для рассматриваемого периода скорости изменения склонения (22.12 – 28.12) подходит сегмент года из таблицы 1: 23.12 – 21.01. То есть скорость изменения склонения в этот период составляет $\Delta\delta/\text{сутки} = +6'$.

5. Определим изменения склонения за период 22.12 – 28.12:

$$\Delta\delta = \Delta\delta/\text{сутки} \cdot \text{кол-во дней} = 6' \cdot 6 = 36'$$

6. Определим склонение Солнца в 28.12. Для этого прибавим к склонению Солнца в 22.12 величину изменения склонения:

$$\delta_{\odot}(28.12) = \delta_{\odot}(22.12) + \Delta\delta = -23^{\circ}26' + 36' = -22^{\circ}50'$$

На данном этапе необходимо точно показать студентам, увеличивается ли склонение в рассматриваемый период относительно ключевой даты, или уменьшается. На основании этого нужно выполнять суммирование или вычитание. Для упрощения этого действия можно воспользоваться графиком на рисунке 1.

7. Определим высоту Солнца 28.12 в Оренбурге:

$$h = -22^{\circ}50' + (90^{\circ} - 51^{\circ}46') = 15^{\circ}24' \text{ (рисунок 4)}$$

Пример 3. Определите высоту Солнца в Оренбурге 13 мая.

1. Определим широту, на которой расположен Оренбурга: $\varphi = 51^{\circ}46'$.

2. Определяем ближайшую в ключевую дату к рассматриваемой. Для 13.05 – это 23.06.

3. Определяем количество дней между этими датами. Для рассматриваемого примера – это 40 дней.

Причем, для рассматриваемого периода изменения склонения (13.05 – 23.06) подходит 2 сегмента года из таблицы 1: 21.04 – 22.05 (на этот период приходится 9 дней: 13.05 – 22.05) и 23.05 – 23.06 (на этот период приходится 32 день: 23.05 – 23.06).

Для первого сегмента $\Delta\delta_1/\text{сутки} = 18'$, для второго $\Delta\delta_2/\text{сутки} = 6'$.

4. Определим изменения склонения за период 13.05 – 23.06:

$$\Delta\delta = \Delta\delta_1/\text{сутки} \cdot \text{кол-во дней} + \Delta\delta_2/\text{сутки} \cdot \text{кол-во дней} = 5^{\circ}54'$$

5. Определим склонение Солнца в 13.05. Для этого вычтем от склонения Солнца в 23.06 величину изменения склонения:

$$\delta_{\odot}(13.05) = \delta_{\odot}(23.06) - \Delta\delta = 23^{\circ}26' - 5^{\circ}54' = 17^{\circ}32'$$

6. Определим высоту Солнца 13.05 в Оренбурге:

$$h = 17^{\circ}32' + (90^{\circ} - 51^{\circ}46') = 55^{\circ}46'$$

Для верификации результатов использовалась программа Stellarium. Stellarium - это свободный планетарий для компьютера с открытым исходным кодом. Данное ПО часто используется при преподавании астрономии [3].

Для верификации результатов воспользуемся информацией о высоте и склонении Солнца в рассматриваемые даты (таблица 2).

Таблица 2 – сравнение высоты солнца для программы ОВС и Stellarium для широты $51^{\circ}46'$ (г. Оренбург)

Дата	Высота Солнца (ОВС)	Высота Солнца (Stellarium)	Относительная ошибка, % (округлено до целых)
21.03	38°14'	38°37'	1
23.06	61°41'	61°39'	0
23.09	38°14'	38°2'	1
22.12	14°48'	14°51'	0
28.12	15°24'	15°2'	2
11.10	31°2'	31°6'	0
30.09	35°26'	35°19'	0
25.04	51°44'	51°33'	0
13.05	55°46'	56°43'	1

Относительная ошибка не превышает 2%.

Стоит отметить, что рассматриваемый метод расчета высоты Солнца над горизонтом имеет **ошибку метода**.

Пример 4. Определите высоту Солнца в Оренбурге 22 марта.

1. Определим широту, на которой расположен Оренбурга: $\varphi = 51^{\circ}46'$.

2. Определяем ближайшую в ключевую дату к рассматриваемой. Для 22.03 – это 21.03. $\delta_{\odot}(21.03) = 0^{\circ}00'$.

Однако, в данном примере дополнительно рассмотрим еще одну ключевую дату – 23.06. $\delta_{\odot}(23.06) = 23^{\circ}26'$.

3. Определяем количество дней между этими датами. Для рассматриваемого примера – это 1 день (21.03 – 22.03) и 93 дня (22.03 – 23.06).

Определим скорость изменения склонения за период 21.03 – 22.03: $\Delta\delta_1/\text{сутки} = + 24'$. Тогда $\Delta\delta_1 = 24'$. Для периода (22.03 – 23.06) - изменения склонения подходит 3 сегмента года из таблицы 1:

(22.03 – 20.04) – 29 дней: $\Delta\delta_2/\text{сутки} = + 24'$;

(21.04 – 22.05) – 32 дней: $\Delta\delta_3/\text{сутки} = + 18'$;

(23.05 – 23.06) – 32 дней: $\Delta\delta_4/\text{сутки} = + 6'$.

Тогда $\Delta\delta_2 = 11^{\circ}36'$; $\Delta\delta_3 = 9^{\circ}36'$; $\Delta\delta_4 = 3^{\circ}12'$.

$\Delta\delta = \Delta\delta_2 + \Delta\delta_3 + \Delta\delta_4 = 24^{\circ}24'$.

4. Определим склонение Солнца в 22.03.

$\delta_{\odot}(22.03)_1 = \delta_{\odot}(21.03) + \Delta\delta_1 = 0^{\circ}00' + 24' = 24'$;

$\delta_{\odot}(22.03)_2 = \delta_{\odot}(23.06) - \Delta\delta = 23^{\circ}26' - 24^{\circ}24' = - 58'$.

5. Определим высоту Солнца 22.03 в Оренбурге:

$h_1 = 24' + (90^{\circ} - 51^{\circ}46') = 38^{\circ}38'$;

$h_2 = - 58' + (90^{\circ} - 51^{\circ}46') = 37^{\circ}16'$.

Высота Солнца 22.03 над горизонтом в программе Stellarium: $h = 38^{\circ}55'$.

Для h_1 – относительная ошибка около 1%, а для h_2 – около 4%. Следовательно, очень важно при использовании рассматриваемой методики, ориентироваться на ближайшую дату.

Построим график (рисунок 2), показывающий изменение высоты Солнца над горизонтом в течении всего года для фиксированной широты ($\varphi = 51^{\circ}46'$). Характерные пики на графики указывают на наличии ошибки метода, которая, как было показано ранее, имеет низкую относительную ошибку.

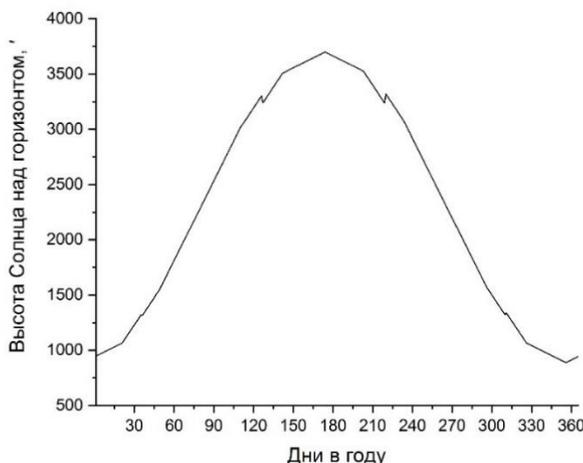


Рисунок 2 – Изменение высоты Солнца над горизонтом в течении года

Построим поверхность, показывающая изменение высоты Солнца над горизонтом в течении всего года (рисунок 3). Как видно из рисунка 3 наличие ошибки метода характерны при расчетах на любых широтах, однако, она незначительна.

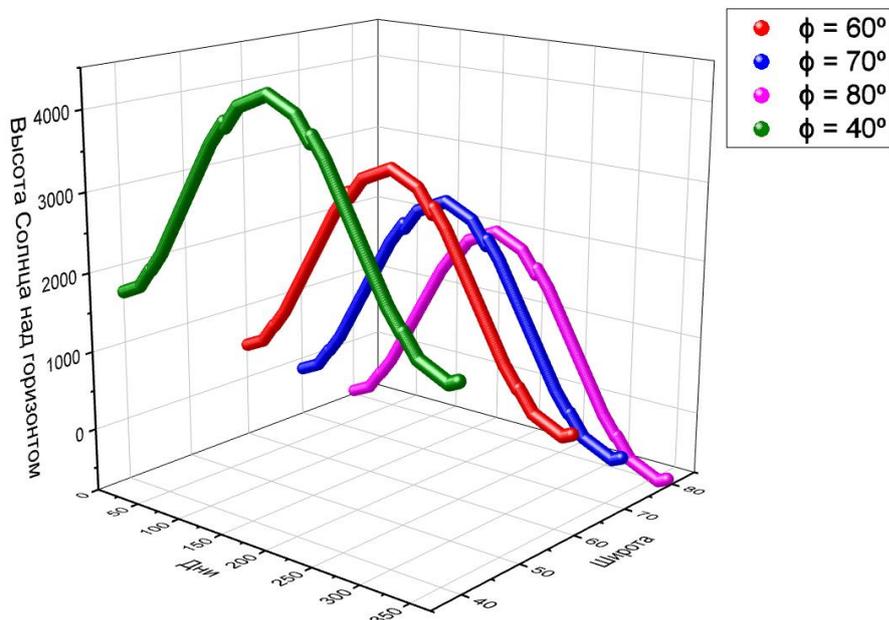


Рисунок 3 – Изменение высоты Солнца над горизонтом в течении года с учетом изменения широт

По результатам полученных результатов была зарегистрирована прикладная программа "Программа для расчета высоты Солнца над горизонтом" (регистрационный номер 2915 от 01.12.2021) в университетском фонде электронных ресурсов ОГУ.

Таким образом в тезисе приведен разбор методики расчета высоты Солнца над горизонтом и показано его применимость для обучения основам сферической астрономии студентов-физиков.

Список литературы

1. Жуков Л.В. Теоретические основы методики астрономической подготовки учителя физики: Автореф... дис.док. пед.наук. – Санкт-Петербург.: 2000. – 38 с.
2. Жаров, В.Е. Сферическая астрономия. — Фрязино: Век 2, 2006. — 480 с.
3. Клыков, Д.Ю. Использование виртуального планетария Stellarium при изучении систем небесных координат / Д.Ю. Клыков, Е.В. Кондакова // материалы V Международной научно-практической конференции, посвященной 70-летию со дня рождения профессора Ю.Н. Меренкова «Системы управления, технические системы: устойчивость, стабилизация, пути и методы исследования». – С. 177-180. – 2019.

ОСОБЕННОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ДЕРИВАТОГРАФА «THERMOSCAN-2» ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ГЛИНИСТЫХ МИНЕРАЛАХ

Макаров В.Н., Серёгин М.М.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Оренбургский государственный университет»,
ООО «Люмэкс-Центрум», г. Москва

Аннотация: Приведен анализ особенностей использования дериватографа «Thermoscan-2» для исследования структурных превращений в глинистых минералах (каолинита, монтмориллонита, полиминеральной глины). Рассмотрены дериватограммы глинистых минералов, режимы нагрева, потеря массы образцов.

Ключевые слова: дериватография, Thermoscan-2, глинистые минералы

Введение

Настоящая работа представляет собой анализ особенностей использования дериватографа «Thermoscan-2» при исследовании структурных превращений в глинистых минералах, а именно – каолинита, монтмориллонита и полиминеральной глины. Дериватограф «Thermoscan-2» предназначен для оценки теплоты фазовых переходов и других процессов, связанных с выделением или поглощением тепла, а также для определения температуры и величины потери массы образца в процессе нагрева. Данная публикация является логическим продолжением работы [1]. Основными особенностями дериватографа «Thermoscan-2» являются высокая чувствительность к режиму нагрева и слабая чувствительность при измерении потери массы образцов при нагреве.

Дериватограммы глинистых минералов

Дериватограф «Thermoscan-2» способен работать в температурных диапазонах от 25 до 1000 °С. Для некоторых глинистых минералов является актуальным исследование физико-химических эффектов выше 1000 °С (например, каолинит), однако, для других образцов глин повышение температуры свыше 900 °С – невозможно из-за спекания образца (например, полиминеральная глина) с кварцевым сосудом, кроме того, при температурах выше 800 °С резко сокращается срок службы термопар. Поэтому, для получения дериватограмм глинистых минералов на «Thermoscan-2» оптимально проводить измерения в диапазонах от 25 до 900 °С. На рисунке 1 представлены дериватограммы разных глинистых минералов, полученные со скоростью нагрева 5 °С/мин. Эффективный диаметр частиц $d \leq 160$ мкм.

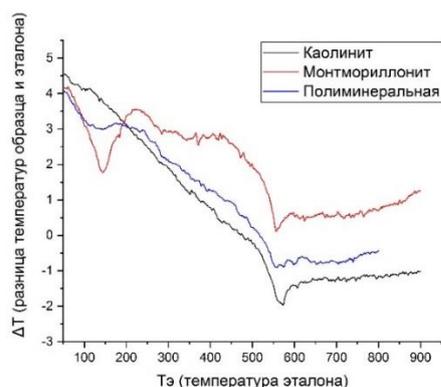


Рисунок 1 - Дериватограммы глинистых минералов (каолинит, монтмориллонит, полиминеральная глина). Скорость нагрева 5 °С/мин; температурный диапазон – от 80 до 900 °С.

На полученных дериватограммах можно проследить процессы разложения веществ, дегидратации как межслоевой воды, так и кристаллизационной. Процессы дегидратации в интервале от 100 до 400 °С, вероятно, сопровождается разложением органики и кальцитов, входящих в состав образцов.

Данное утверждение было подтверждено результатами ИК-спектроскопии. На рисунке 2 приведен ИК-спектр полиминеральной глины до и после дифференциально термического анализа (ДТА). В качестве ИК-Фурье спектрометра использовался Инфралюм ФТ-08 с оптической системой из бромата калия производства ООО «Люмэкс-Маркетинг».

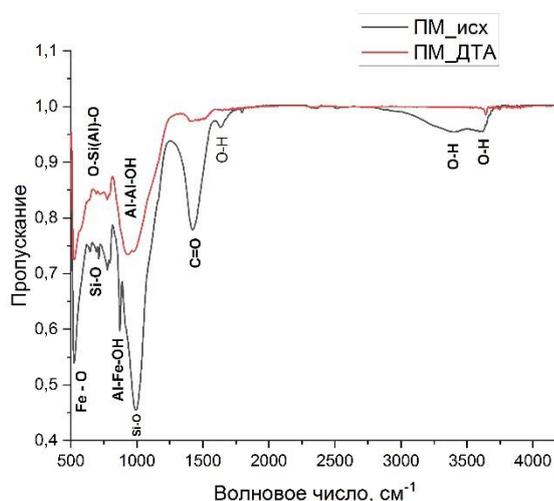


Рисунок 2 – ИК-спектр полиминеральной глины до и после дифференциально термического анализа (ДТА). ПМ_исх – линия спектра исходного образца (до термообработки); ПМ_ДТА - линия спектра после дифференциально термического анализа

Режимы нагрева

Режимы нагрева в дериватографе «Thermoscan-2» варьируются по скорости: от 0,5 до 20 °С/мин. Наиболее востребованными скоростями нагрева при работе с глинистыми минералами являются 5, 10 и 20 °С/мин. На рисунке 3 в

качестве примера приведены дериватограммы каолининовой глины, полученные при трех режимах нагрева.

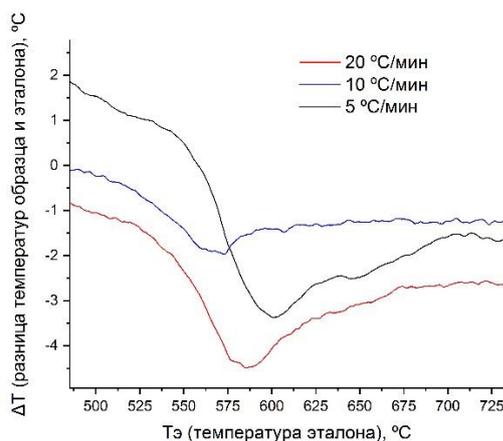


Рисунок 3 – Дериватограммы каолинита для при разных режимах нагрева: 5, 10 и 20 °C/мин. Эффективный диаметр частиц $d \leq 160$ мкм.

Для режимов 5 и 20 °C/мин качественные зависимости кривых близки, но время получения результатов значительно различается. В паспорте прибора отмечено, что более длительное проведение эксперимента резко сокращает срок службы термопар. Оптимальным по затрате времени на эксперимент при сохранении качества результатов, по мнению авторов, является режим нагрева 10 °C/мин.

Еще одной особенностью дериватографа «Thermoscan-2» является его высокая инерционность. Это проявляется в том, что образец и эталон в интервале температур около от 25 до 100 °C нагреваются нелинейно. Уменьшить влияние этого эффекта возможно при снижении скорости съемки.

Потеря массы образцов глинистых минералов

Измерение величины потери массы образца глинистого минерала в процессе нагрева на дериватографе «Thermoscan-2» представляется весьма затруднительным, а иногда невозможным. Точность определения изменения массы образца составляет 0,02 грамма, при этом масса самого образца глинистого минерала, как правило, около 0,5 грамма. Так как потеря массы глинистых образцов составляет около от 6 до 12 % можно судить лишь о качественном изменении массы. На рисунке 4 приведен типичный график потери массы образца глинистого минерала, полученный на дериватографе «Thermoscan-2».

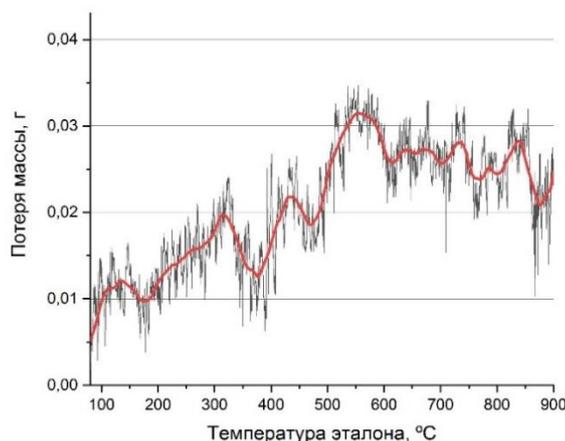


Рисунок 4 – Типичный график потери массы образца каолинита. Красной кривой обозначен график потери массы после процедуры сглаживания

Как видно из графика, масса может не только уменьшаться, но и увеличиваться. Этот эффект обусловлен систематической ошибкой прибора, связанной с конвекцией образующегося газа (пара) через пустоты между твердыми частицами дисперсной системы [2]. Поэтому измерение потери массы образца на дериватографе «Thermoscan-2» следует проводить на материалах с заведомо высокой влажностью.

Авторами работы был замечен эффект, при котором часть порошковой пробы покидала («выбрасывалась») из кварцевого измерительного сосуда (рисунок 5). Вероятность такого эффекта возрастала с уменьшением дисперсности частиц пробы.



Рисунок 5 – Эффект «выброса» части образца монтмориллонита из измерительного сосуда. Эффективный диаметр частиц $d \leq 40$ мкм

Следует отметить, что рассматриваемый эффект наблюдался в образцах, с эффективным диаметром частиц $d \leq 40$ мкм. Эффект «выброса» образца глинистого минерала объяснялся тем, что при температурах 500-600 °C начиналось интенсивное выделение газа (пара) и продуктов разложения через пустоты между

твердыми частицами. При низкой теплопроводности (характерной для глинистых минералов) это приводит к разрушению образца, сопровождающейся его «выбросом» из капилляра. Исключить этот эффект можно, формируя технологическое отверстие (углубление) в образце (около 1 см) для свободного выхода газов.

Вывод

Авторами настоящей работы установлено, что дериватограф «Thermoscan-2» пригоден для исследования структурных превращений в глинистых минералах, однако, имеет ряд особенностей и ограничений, которые необходимо учитывать при работе с данным лабораторным оборудованием.

Благодарность

Авторы благодарят декана физического факультета кандидата физико-математических наук Четверикову Анну Геннадьевну за ценные указания и обсуждения. Также авторы благодарят компанию ООО «Люмэкс-Центрум» за возможность работать на спектрометре ИнфраЛюм ФТ-08.

Список литературы

1. Каныгина, О.Н. Использование метода дериватографии при выполнении НИРС / Каныгина О.Н., Четверикова А.Г., Алпысбаева Г.Ж., Савинов В.В. // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. – С. 2194-2199. – 2020.
2. Хабас, Т.А. Термогравиметрический метод анализа силикатных материалов. Методические указания / Т.А. Хабас, Кулинич Е.А., Егорова Е.Ю.// – Томск: Изд. ТПУ, 2007. – 20 с.

ОБЗОР СОВРЕМЕННОГО МЕДИЦИНСКОГО ОБОРУДОВАНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ

**Новохатская П.А., Жальбаева К.М.,
Баранова О.В., канд. биол. наук, доцент**

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

В настоящее время функциональная диагностика стала одной из активно развивающихся областей современной медицины. Функциональная диагностика позволяет своевременно выявить нарушения в функционировании организма и, тем самым, предотвратить дальнейшее развитие заболевания. Важно проводить манипуляции на технологически качественном оборудовании, разработанном с учетом возрастающих требований к функциональной диагностике [1].

В настоящее время функциональная диагностика включает в себя обширную группу приборов и аппаратов, с помощью которых осуществляется восприятие информации (обнаружение, измерение, регистрация, запоминание) и обработка биоэлектрических, биомагнитных, тепловых, оптических, тактильных, люминесцентных, биохимических, радиационных сигналов.

Классификация методов функциональной диагностики в зависимости от области исследования представлена в таблице 1.

Таблица 1 – Классификация методов функциональной диагностики

Функциональная диагностика (область исследования – методы)			
Сердечно-сосудистая система	Кровообращение	Нервная и мышечная система	Внешнее дыхание
<p>1) Электрокардиография Это метод регистрации электрической активности миокарда, распространяющейся в сердечной мышце в течение сердечного цикла. Графическое изображение электрической активности миокарда называется электрокардиограммой (ЭКГ). Для получения ЭКГ применяют электрокардиографы.</p>	<p>Реография Это метод исследования кровенаполнения органов и тканей или отдельных участков тела на основе регистрации изменений их электрического сопротивления. Получение реограммы осуществляется с помощью реографов.</p>	<p>Энцефалография Это метод электрофизиологического объективного исследования функционального состояния головного мозга, основанный на графической регистрации его биопотенциалов. Для получения нужной информации о деятельности головного мозга применяются приборы: а) электроэнцефалографы (8-, 16-, 32-канальные); б) анализаторы биопотенциалов; в) электроэнцефалоскопы.</p>	<p>Спирография Это метод определения объемной скорости потребления кислорода и параметров внешнего дыхания (частота, минутный объем вентиляции и др.). Получение результатов осуществляется с помощью спирографов.</p>

Продолжение таблицы 1

<p>2) Векторкардиография как метод регистрации электрической активности сердца, в частности, величины и направления электрического поля сердца в течение сердечного цикла. Получение векторкардиограмм осуществляется с помощью векторэлектрокардиографов и векторэлектрокардиоскопов.</p>		<p>Электромиография Это метод измерения функционального состояния скелетных мышц, основанный на регистрации возникающих в них электрических потенциалов. С помощью прибора - электромиографа изучаются рефлекторные реакции двигательных систем организма, периферического нейромоторного аппарата, а также проводится функциональная диагностика периферических нервов и мышц.</p>	<p>Пульмонография - акустический метод локального исследования легких, заключающийся в регистрации изменения амплитуды колебаний различных участков легкого в процессе дыхания.</p>
<p>3) Фонокардиография - это метод регистрации звуков (тоны, шумы), возникающих в результате деятельности сердца. Применяется для определения нарушений работы сердца, в том числе пороков клапанов. Фонокардиограммы получают с применением приборов фонокардиографов, узи-аппараты.</p>			<p>Приборы для ФД легких подразделяют на три группы, в том числе: 1) для интегрального исследования легких: метатест, бронхомета-тест, барометатест, спирограф, оксиспирограф, пневмотахометр; 2) для газоаналитических исследований — газоанализаторы; 3) для локальных исследований: фонопульмограф, фоно-пульмоскоп.</p>

<p>4) Тонометрия - метод измерения и регистрации артериального давления (АД). Измерение АД осуществляется с помощью приборов - сфигмоманометров или тонометров.</p>			
-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--	--	--

В рамках данного исследования был проведен обзор некоторых современных медицинских аппаратов для функциональной диагностики.

Первым рассмотрим тонометр внутриглазного давления ТВГД-02.

Тонометр внутриглазного давления ТВГД-02 предназначен для измерения истинного и тонометрического давления через веко без использования анестетиков у взрослых и детей в диапазоне от 5 до 60 мм рт. ст. Тонометр может использоваться как в лечебных учреждениях, так и в домашних условиях [2].

Технические характеристики:

- 1) габаритные размеры не более 176x26x20 мм;
- 2) масса без элементов питания не более 80 г;
- 3) климатические условия эксплуатации тонометра: а) температура воздуха от +10 °С до +35 °С; б) относительная влажность воздуха до 80% при температуре +25 °С;
- 4) питание тонометра осуществляется от двух элементов питания типа АААА 1,5 В;
- 5) работоспособность тонометра обеспечивается при напряжении питания от (3,3 В) до (2,0 В);
- 6) при измерении давления в пределах от 5 до 26 мм рт. ст. абсолютная погрешность измерения составляет ± 2 мм рт. ст., при измерении давления от 26 до 60 мм рт. ст. относительная погрешность составляет 10% от измеряемого значения;
- 7) максимальный ток потребления в выключенном состоянии тонометра 60 мкА, во включенном состоянии в режиме «Ожидание» измерения 4 мА, в режиме измерения 60 мА;
- 8) время одного измерения не более 2 с;
- 9) наружные поверхности тонометра устойчивы к дезинфекции химическим методом любым дезраствором, разрешенным к применению в медицинской практике для изделий из пластмасс и металлов от инфекции вида дерматофития;
- 10) средний срок службы тонометра не менее 5 лет.

Следующие приборы для обзора – это ультразвуковые аппараты DC-8 от Mindray и Aixplorer.

На сегодняшний день DC-8 - самый мощный ультразвуковой аппарат экспертного класса от Mindray [3].

Технологии от Mindray:

- 1) 3Т – новая технология датчиков. Уникальная технология от Mindray, увеличивающая диапазон частот и эффективность передачи сигнала, что

позволяет значительно снизить уровень шумов и увеличить разрешающую способность;

2) iFlow – новейшая технология, улучшающая качество визуализации мелких сосудов разветвленных кровеносных путей. Технология создана на основе нашего эксклюзивного алгоритма обработки изображений Mindray;

3) iClear – технология, повышающая контрастное разрешение за счет подавления зернистости, облегчает распознавание и визуализацию патологических структур. Доступна, в том числе, для 3D/4D режимов;

4) iBeam – технология пространственного компаундинга - для создания единого изображения повышенного качества с улучшенным контрастным разрешением используется сканирование под различными углами;

5) iWorks - интеллектуальная технология позволяет меньше отвлекаться на нажатие кнопок и сосредоточить внимание на пациенте;

Ультразвуковой аппарат Aixplorer использует современную технологию эластографию сдвиговой волны [4]. Ультразвуковой аппарат с функцией эластографии. Позволяет обнаружить фиброзные изменения, провести дифференциальную диагностику доброкачественных и злокачественных новообразований поверхностно расположенных органов.

Технические характеристики аппарата:

- 1) плоский жидкокристаллический монитор с диагональю 21";
- 2) контроль снимков в миниформате;
- 3) записи в истории болезни пациентов;
- 4) программный пакет SonicResearch;
- 5) 21,5-дюймовый ЖК-монитор 1920x1080;
- 6) полностью цифровое широкополосное формирование УЗ луча;
- 7) процессор - Intel i7 Octo Core (8-ми ядерный);
- 8) оперативная память - 12 Гб;
- 9) диапазон измерений упругости тканей - 800 кПа;
- 10) полный динамический диапазон - 200 дБ;
- 11) общее число цифровых каналов – 65000;
- 12) длина кинопетли - 1000 кадров.

В заключении обзора рассмотрим современный гастроскоп EVIS EXERA III GIF-N190. [5].

Модель GIF-N190 предоставляет высококачественные HD-изображения при диаметре вводимой части всего 9,2 мм и является системой с оптимальной комбинацией качества изображения и маневренности.

Узкоспектральная визуализация (NBI) обеспечивает значительно большее видимое расстояние по сравнению с предыдущими поколениями.

Эндоскопы EVIS EXERA предлагают высочайший уровень качества эндоскопического изображения и обеспечивают превосходную передачу цветов и равномерную яркость эндоскопического изображения. Это играет решающую роль при постановке диагноза. Благодаря улучшенной обработке сигнала, эндоскопы обладают значительно сниженным уровнем образования ореолов и шума.

Встроенный канал для подачи воды не только помогает установить источник кровотока во время гемостаза, но также полезен при сложных лечебных процедурах, поскольку всегда обеспечивает хорошую видимость.

Коннектор обеспечивает подключение к источнику света одним движением и устраняет необходимость в отдельном подключении видеокабеля к видеопроцессору. Это экономит время при установке и демонтаже. Разъем полностью пригоден для работы под водой, что устраняет необходимость в водозащитном колпачке.

Эргономичная конструкция блока управления улучшает маневренность колоноскопа, а также обладает легкодоступными элементами управления и программируемыми пользователем настройками.

Исходя из всего вышесказанного, можно сделать вывод, что правильная постановка диагноза, а также своевременное выявление заболевания в большей степени зависят от качества используемой аппаратуры. Именно поэтому необходимо постоянно улучшать старые приборы или создавать новые.

Список литературы

1. Функциональная диагностика в медицине [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://chekhovsc.ru/blog/chto-takoe-funktsionalnaya-diagnostika>
2. Тонмометр внутривидного давления (ТВДГ-01) [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://satellit-tsc.ru/f/tvgd-01.pdf>
3. Ультразвуковой аппарат DC-8 Mindray [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://etalon-medical.ru/f/manual_dc_8.pdf
4. Ультразвуковой аппарат Aixplorer [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://www.tiamed.ru/catalog/apparaty-dlya-elastografii/aixplorer/>
5. Гастроскоп EVIS EXERA III GIF-N190 [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.olympus-ural.ru/files/CV-180.pdf>

СОВРЕМЕННЫЕ СИСТЕМЫ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ КОСМОНАВТОВ. ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ СИСТЕМ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ КОСМОНАВТОВ

Новохатская П.А., Жальбаева К.М., Макаров В.Н.

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

Аннотация: В настоящее время системы жизнеобеспечения (СЖО), по сравнению с предыдущими годами, стали активно развиваться. Однако до сих пор ученые и исследователи не создали систему, которая идеально подошла бы для каждого корабля, базы или станции. В связи с этим в настоящее время активно продолжается исследование способов и методов усовершенствования системы жизнеобеспечения.

Цель работы заключается в исследовании систем жизнеобеспечения на сегодняшний день, а также в исследовании перспектив их развития в будущем. Проводится анализ проблем, с которыми сталкиваются исследователи и конструкторы при создании систем, и сами люди, использующие их. Описаны возможные перспективы развития систем жизнеобеспечения в будущем.

Ключевые слова: система жизнеобеспечения, космонавты, космос, исследования, безопасность, станция, космический корабль, база, биотехнологии.

Введение

В настоящее время большую актуальность получили исследования в области космонавтики. Полученные знания о космосе внесли огромный вклад в развитие человеческой цивилизации; во многих профессиональных областях произошли значительные улучшения. Однако даже в настоящее время многое, что находится в космическом пространстве, недоступно для получения информации вследствие отсутствия необходимых технологий, поэтому космонавтика и в будущем будет областью, в которой проводятся многочисленные исследования.

Для того чтобы люди могли и дальше осваивать космическое пространство, необходимо постоянно развивать уже имеющиеся технологии, создавать оборудование, использовать новейшие материалы и источники энергии. Вопрос безопасности и сохранности космонавтов, космических станций, баз и кораблей по-прежнему находится на первом месте по важности. Именно с вопроса безопасности и начинается изучение возможностей человеческого организма, его работоспособности во время пилотируемых полетов в космос.

Основные классификации систем жизнеобеспечения

Для решения вопроса безопасности была создана специальная система жизнеобеспечения космонавтов (СЖО). Система жизнеобеспечения – это группа устройств, которая позволяет человеку выживать в космосе и поддерживать жизнь экипажа корабля. Данную систему можно назвать биотехнической, так как она сочетает в себе как биообъекты (микроорганизмы, растения, некоторые виды животных организмов), так и технику (ИВЛ (искусственная вентиляция легких),

скафандры, источники питания, систему коммуникации, датчики, фильтры и т.д.). Устройства, входящие в систему, создают необходимые условия (температуру, газовую среду, давление, санитарно-гигиеническое обеспечение и т.д.) для того, чтобы в космосе экипаж чувствовал себя комфортно.

СЖО подразделяются на *индивидуальные* (скафандры) и *коллективные* (для космических пилотируемых систем). Скафандр необходим для выхода человека в открытый космос. Он защищает его от воздействия космической радиации, перепадов температур, потенциально вредных веществ, а также препятствует тому, чтобы наружу выходили воздух и тепло. Обычно скафандра хватает на несколько часов. Коллективные СЖО поддерживают необходимые условия для существования непосредственно на самом корабле или же на космической станции. Их хватает на несколько лет.

СЖО можно отнести к составной части космического аппарата. Внешний облик и, соответственно, дизайн данной системы может быть разным. Он зависит от конструкции космического аппарата. Также СЖО может совмещаться и с другими системами, а также модулями. В основной состав СЖО обычно входят такие элементы, как:

1) система регулировки и поддержания газового состава (система кислородообеспечения). Данная система обеспечивает подачу кислорода и поддержания постоянного парциального давления.

2) система очистки атмосферы. Обеспечивает удаление углекислого газа, вредных примесей, предотвращает загазованность помещения. Эту систему также можно объединять с системой кислородообеспечения;

3) система водоснабжения. Эта система предназначена для того чтобы обеспечивать экипаж водой. На данный момент нет идеальной системы водоснабжения. Сложность состоит в долгосрочном пребывании людей в космическом пространстве;

4) система питания экипажа. Необходимо, чтобы человек получал белки, жиры и углеводы в достаточном количестве. В космосе это особенно важно, потому что идет дополнительная нагрузка на организм;

5) система удаления отходов. Необходимо проводить сбор и изоляцию как жидких, так и твердых отходов. Также есть системы, которые обеспечивают минерализацию данных отходов и их транспортировку за пределы космического корабля;

6) средства регулирования давления внутри корабля, базы или станции;

7) средства санитарно-бытового обеспечения. Они включают средства личной гигиены, комплекты постельного белья, различные средства для влажной уборки и т.д.;

8) средства медико-биологического обеспечения. К данным средствам можно отнести все предметы медицинского контроля, медикаменты, а также тренажеры для поддержания тонуса организма. [1]

На данный момент существуют три основных типа систем жизнеобеспечения космических экипажей – это открытая, полужакрытая и закрытая СЖО.

Открытая СЖО. Жизненно необходимые вещи и продукты в космосе заготавливаются заранее, еще до полета, а удаление продуктов жизнедеятельности происходит уже во время пребывания в космосе. К основному оборудованию открытой СЖО можно отнести, в основном, различные контейнеры, цистерны, баллоны, вентиляторы, технику, удаляющую отходы и регулирующую кислород. Количество оборудования изменяется в зависимости от времени полета и количества людей, которые будут входить в экипаж корабля. Продолжительность полетов использующих, открытую СЖО составляет 2-3 недели, в силу ограниченности запасов.

Полузакрытая СЖО. В полузакрытой системе продукты питания и питьевая вода также заготавливаются на все время полета. Запас кислорода незначительный. Отходы здесь удалить нельзя. Полузакрытую систему жизнеобеспечения можно использовать на миссиях, которые длятся не более двух месяцев.

Закрытая СЖО. Ее задача состоит в том, чтобы во время полетов было как можно меньше отходов. Запас продуктов на борту ограничен, пища и вода должны многократно возобновляться для повторного использования. Для того чтобы закрытая СЖО функционировала как следует, необходимо правильно реализовать ее дизайн еще на начальной стадии установки, а также определить, как будет в дальнейшем осуществляться переработка отходов и общий контроль над системой. К тому же следует учитывать и размеры самого корабля или станции, чтобы вес СЖО не превышал дозволенный. В закрытую СЖО также можно включить какие-либо приборы для оптимизации переработки отходов, то есть имеется возможность модернизации.

Помимо представленной классификации СЖО, существует также замкнутая и строго замкнутая система кругооборота всех необходимых для жизни экипажа веществ. [2]

Система жизнеобеспечения называется **замкнутой**, если в ней осуществляется регенерация отходов жизнедеятельности, а также отходов, возникающих вследствие протекающих в системе физико-химических процессов, прежде всего технологических.

Система называется **строго замкнутой**, или **полностью замкнутой**, если ее работа не зависит от внешнего мира, за исключением энергообмена. Замкнутые СЖО на данный момент активно применяются и используются. Это и есть, по сути, космические корабли небольших размеров.

Самой важной задачей при создании какой-либо СЖО является способ экономии продуктов, взятых с собой с Земли (так как своевременные и качественные поставки в космос не всегда удается осуществлять), а также поддержание необходимой для существования атмосферы. Если космический корабль довольно небольшого размера, то изменения в атмосфере могут занять всего несколько дней, и эти изменения для экипажа не всегда могут быть направлены в положительную сторону.

Примеры систем жизнеобеспечения

Ранее системы жизнеобеспечения были «разомкнутыми», т.е. они почти полностью полагались на поддержку со стороны Земли. Запасы воды и еды были

ограниченными, так как это все набиралось во время подготовки к полету, а отходы жизнедеятельности выбрасывались в открытый космос. Это использовалось на таких кораблях как: Аполлон, Меркурий, Джемини, Прогресс-1, Союз-1, Мир и.т.д. Однако уже тогда шла разработка более усовершенствованных систем, которые будут использоваться в будущем.

Сейчас самая современная система жизнеобеспечения присутствует на космической станции МКС (она является международной) и Тяньгун-2 (китайская космическая станция). [7]

В МКС установлен специальный модуль «Транквилити». В нем находится непосредственно сама система жизнеобеспечения, которая перерабатывает жидкие отходы в воду для технического использования, а также производит кислород для полноценного дыхания. Помимо этого, в модуле находится санузел, система очистки воздуха и система поддержания и регулировки газового состава. Это – не единственный модуль, установленный на данной станции, но практически самый важный из них.

В Тяньгун-2 система жизнеобеспечения состоит из двух отсеков: более крупного - для проведения непосредственно научных экспериментов и проживания, и отсека меньшего диаметра, в котором размещены основные двигатели, солнечные батареи и запасы топлива.

Основные требования к комплексу систем жизнеобеспечения

На основании опыта предыдущих разработок, было выяснено, что современная СЖО должна разрабатываться в первую очередь как надежный комплекс, состоящий из нескольких систем, который может управляться как вручную, так и автоматически.

При разработке СЖО необходимо учитывать:

- основной массовый баланс системы, соотношение габаритов системы с кораблем, станцией или базой;
- всевозможные внешние и внутренние факторы, влияющие на данную систему;
- возможность расширения функционала и многозадачности СЖО;
- возможность замены отдельных частей системы;
- взаимодействие комплекса с другими системами космического объекта;
- возможность свободного технического обслуживания СЖО;
- безопасное взаимодействие экипажа с системой;
- максимально быстрое устранение непредвиденных поломок в системе.

Еще одним основным критерием при создании системы жизнеобеспечения является минимизация всех продуктов и материалов. Для этого необходимо учитывать такие показатели, как:

- максимальную переработку отходов жизнедеятельности экипажа;
- максимальное уменьшение объема используемых продуктов;
- максимальное уменьшение агрегатов, запасных частей, не затрагивающее при этом безопасность и надежность экипажа. [6]

Перспективы развития систем жизнеобеспечения

Что же планируется делать с СЖО в дальнейшем? Предполагается, что данная система будет кардинально отличаться от той, что используется сейчас. Особенно будут не похожи СЖО для освоения дальнего космоса и СЖО для освоения орбитальных околоземных объектов. Это потому что придется находить новые расходные материалы, создавать приборы, узлы, которые будут полностью подходить к окружающей обстановке. Рассматривается также возможность использования инопланетных ресурсов, может быть что-то в качестве замены земного топлива. [3]

На данный момент считается, что главной необходимостью на будущих СЖО станут оранжерейные модули (рисунок 1), чтобы они могли обеспечить космонавтов необходимым количеством продуктов. Там будут выращиваться различные виды растений, трав, чтобы космонавты смогли обеспечивать себя всеми необходимыми витаминами и минералами.

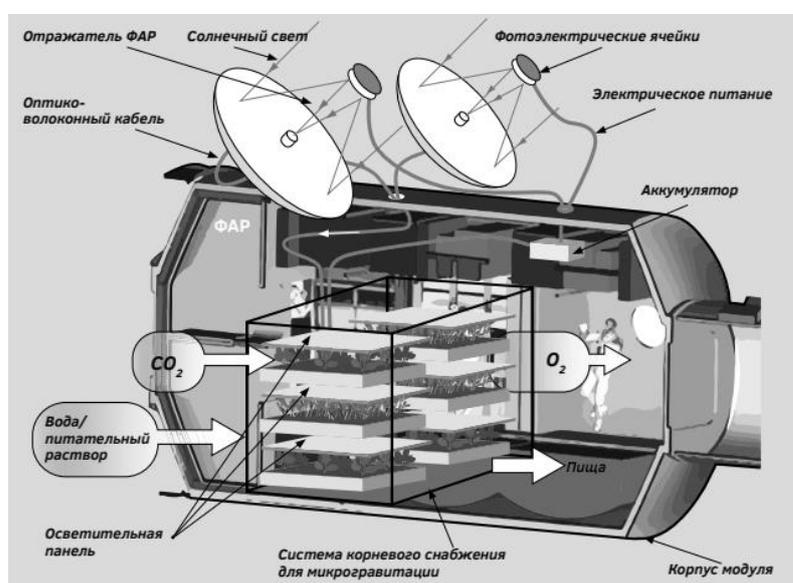


Рисунок 1 – Оранжерейный модуль

Если говорить о предстоящем полете на Марс, то здесь нужны реалистичные оценки текущих и прогнозируемых технических возможностей. Проблемы последней категории включают долгосрочную стабильность и надежность систем жизнеобеспечения, которые способны к огромному путешествию и достаточно надежны, чтобы обеспечить их непрерывную работу в течение всего полета. Многие из вопросов основаны на достаточно хорошо изученных данных: потребности человека в пище, кислороде и воде [4]. Однако другие вопросы менее четко определены, такие как требования, которые будут предъявляться к системе личной чистоты и гигиены, предотвращения или уменьшения токсинов окружающей среды, а также психологических реакций на окружающую среду и на питание. Еще слишком рано принимать окончательные решения о характеристиках долговременной системы жизнеобеспечения, необходимой для полета на Марс. Вполне вероятно, что система жизнеобеспечения для транзита и базы на Марсе будет использовать совокупность физических, химических и биологических процессов. [5]

Помимо предполагаемых оранжерейных модулей, которые могут быть источником энергии СЖО космических кораблей, бесплатным источником может служить Солнце. Солнечная энергия является альтернативой добычи энергии в межпланетном пространстве. Преимущество солнечной энергии заключается в том, что данный ресурс возобновляемый, доступный, надежный, способный неограниченно и постоянно снабжать космические корабли энергией. Положительным моментом является, что в процессе производства, солнечная энергия не выделяет вредных веществ, отрицательно сказывающихся на состоянии космонавтов.

Однако для нормального функционирования значительных биологических СЖО, рассмотренный источник энергии имеет ряд затруднений. Трудность состоит в постоянном сборе энергии, ее запасании, а так же в фиксации, вводе солнечной энергии в космический аппарат и сбросе тепловой энергии в межпланетное пространство.

Однако использование представленного источника энергии поспособствовали возмещению энергозатрат космического корабля.

Продолжая изучать технологии получения солнечной энергии, обеспечивающие космические корабли позволит инженерам создать будущие станции даже на Луне и Марсе.

Создание космических экологических, биолого-технических систем жизнеобеспечения потребует не меньших усилий, как в области фундаментальных академических исследований, так и прикладных инженерноконструкторских работ.

Заключение

Разработка представленных выше источников обеспечения космических кораблей энергией могут поспособствовать не только их надежному оснащению, но и успешному освоению космоса в целом.

В будущем, добившись, наличия необходимого количества энергии на борту летательных аппаратов биологические и технические системы СЖО найдут надлежащее применение в рамках освоения космоса.

Физико-химические ресурсы, используемые в СЖО, могут существовать на Луне, при условии активного осваивания.

Безусловно, немалые усилия нужно приложить для создания космических, экологических, биотехнических систем жизнеобеспечения космонавтов.

СЖО космических объектов, созданная на основе современных медико-биологических разработок, заложит фундамент для комфортных и безопасных условий на борту, и обеспечат надежность работы космонавтов.

Для дальнейшего прогресса космонавтики необходимо получить действенное решение первостепенной проблемы создания искусственных экосистем, включающих человека и вещество, базирующихся на замкнутом биологическом круговороте. Решение данной проблемы может иметь огромное значение еще и в области защиты и охраны окружающей среды, освоения и применения новых биотехнологий и комплексов на борту.

Создание успешных комплексов СЖО, приносящих выгоду и пользу в результате перспективной миссии, потребует более мощной модернизации и усовершенствования не только аппаратуры, но и технологий, а также позволит произвести снижение основных затрат корабля. Все это дает возможность увеличения надежности функционирования космических кораблей, баз, станций.

Список литературы

1. Бдайцев М.А. Жизнеобеспечение людей в космических кораблях и космических сооружениях [Электронный ресурс]. /М.А.Бдайцев. – Режим доступа: <https://school-science.ru/6/19/38664>

2. Волкова Т. Космические технологии для решения земных проблем [Электронный ресурс]: многопредмет. науч. журн. - / Волкова Т., Шилин Н. — Электрон.журн. - Москва : АВОК-ПРЕСС, 2017.-. - Режим доступа к журн.: zvt.abok.ru/articles/375/Kosmicheskie_tehnologii_dlya_resheniya_zemnih_problem

3. Григорьев А.И., Сычев В.Н. Системы жизнеобеспечения космонавтов на основе биосферных механизмов // Вестник РАН. 2004. Т. 74. № 8. С. 675 – 689.

4. Национальное управление по аэронавтике и исследованию космического пространства (NASA) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.nasa.gov/content/life-support-systems>

5. D. R. Bourke. Mars life support systems [Электронный ресурс]: / D. R. Bourke. – Электрон. журн. - USA: South Pasadena, 2006.-. - Режим доступа к журн.: https://www.researchgate.net/publication/237448720_Mars_life_support_systems

6. Сияк Е.Ю. Системы жизнеобеспечения обитаемых космических объектов [Электронный ресурс]. /Е.Ю.Сияк. – Режим доступа: aktovaja_rech_ju.e-sinjaka-sistemy_zhizneobespeche.pdf (ucoz.ru)

7. Гузенберг А.С. Выбор комплекса жизнеобеспечения для экипажей долговременных космических станций [Электронный ресурс]. / Гузенберг А.С. Железняков А.Г., Романов С.Ю., Телегин А.А., Юргин А.В. – Режим доступа: <https://www.energia.ru/ktt/archive/2015/01-2015/01-06.pdf>

ФОРМИРОВАНИЕ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ СТУДЕНТОВ ИНЖЕНЕРНЫХ НАПРАВЛЕНИЙ ПОДГОТОВКИ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ

Огерчук А.А., канд. пед. наук,

Анисина И.Н., канд. техн. наук, доцент,

Пискарьева Т.И., канд. техн. наук

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

В современной системе высшего образования в России приоритетным является компетентностный подход. На его основании были разработаны и введены в практику высшего профессионального образования федеральные государственные образовательные стандарты высшего профессионального образования третьего поколения (ФГОС ВПО). Процесс обучения с внедрением ФГОС ВПО потребовал серьезных изменений и в содержании образования, и в осуществлении учебного процесса. Основной целью на всех этапах обучения становится овладение выпускниками компетенций: универсальных общепрофессиональных и профессиональных.

Физика как учебный предмет естественнонаучного цикла является базой для изучения смежных и специальных дисциплин для студентов инженерных направлений подготовки, и играет важную роль в формировании не только общепрофессиональной компетенции (ОПК-1, ОПК-2), но и закладывает основу формирования элементов профессиональных компетенций (ПК-1, ПК-2). Однако, последнее время наблюдается тенденция сокращения времени, отведенного на изучение курса физики, снижение уровня подготовки первокурсников и отмена обязательной сдачи ЕГЭ по физике при поступлении на инженерные направления подготовки, что требует внесения существенного изменения в методику преподавания физики.

Анализ профессиональных стандартов, учебных планов и рабочих программ инженерных направлений подготовки и собственный опыт преподавательской деятельности в Оренбургском государственном университете показал недостаточную профессиональную направленность курса общей физики.

Рабочие программы по физике для специальности «Наземные транспортно-технологические средства» и направления подготовки «Строительство» согласно новому федеральному стандарту (ФГОС 3++) содержат одинаковые требования к результатам обучения дисциплине, то есть формирование общепрофессиональной компетенции (ОПК-1), индикаторы достижения этой компетенции и планируемые результаты обучения по дисциплине, а также содержание разделов дисциплины. Однако, основной целью формирования общепрофессиональных компетенций (ОПК-1) является способность будущих специалистов ставить и решать инженерные и научно-технические задачи в сфере своей профессиональной деятельности, а значит должны иметь профессиональную направленность. По нашему мнению, решить эту проблему при изучении курса

общей физики возможно с обязательным решением задач профессиональной направленности на практических занятиях.

Приведем примеры задач профессиональной направленности из разделов курса общей физики (таблица 1), решение которых позволяет сформировать компоненты общепрофессиональной компетенции (ОПК-1) для двух инженерных направлений подготовки.

Таблица 1 – Примеры задач профессиональной направленности [3-5]

Направление подготовки	Наземные транспортно-технологические средства	Строительство
Механика	Вращение от двигателя к ведущим колесам автомобиля передается через ряд устройств, одно из которых, называемое сцеплением, позволяет в случае необходимости отключить двигатель от остальных устройств. Сцепление состоит из двух одинаковых фрикционных накладок, прижимаемых друг к другу сильными пружинами. В автомобиле фрикционные накладки имеют форму колец с внутренним диаметром $d_1 = 142$ мм и наружным диаметром $d_2 = 203$ мм с коэффициентом трения накладки по накладке $k = 0,35$. Найти наименьшую силу, с которой нужно прижимать накладки, чтобы передать вращающий момент $M = 100$ Н·м.	Определить натяжение троса при поднятии из воды железобетонной плиты объемом $2,4 \text{ м}^3$ с ускорением $0,5 \text{ м/с}^2$. Лобовое сопротивление не учитывать. Считать плотность железобетона 2200 кг/м^3 .
Молекулярная физика и основы термодинамики	Горючая смесь в цилиндре двигателя, имеющая температуру $t_1 = 100 \text{ }^\circ\text{C}$ и давление $p_1 = 0,09 \text{ МПа}$, подвергается сжатию по политропе с показателем $n = 1,33$. Определить конечное давление и степень сжатия в момент,	Какое количество теплоты Q , теряет за время $\tau = 1$ мин комната с площадью пола $S = 20 \text{ м}^2$ и высотой $h = 3$ м через четыре кирпичные стены? Температура в комнате $t_1 = 15 \text{ }^\circ\text{C}$, температура наружного

	когда температура достигнет 400 °С.	воздуха $t_2 = -20$ °С. Теплопроводность кирпича $\lambda = 0,84$ Вт/(м·К). Толщина стен $d = 50$ см. Потерями тепла через пол и потолок пренебречь.
Электростатика и электродинамика	Определить разность потенциалов, возникающую на концах вертикальной автомобильной антенны длиной 1,2 м при движении автомобиля с востока на запад в магнитном поле Земли со скоростью 20 м/с. Горизонтальная составляющая земного магнитного поля $B_0 = 20$ мкТл.	Громоотвод строительной бытовки заканчивается заземлением в виде шара, закопанного на несколько метров в землю. Вычислить сопротивление R такого заземления, если удельное сопротивление земли $\rho = 20$ Ом·м и диаметр шара $d = 15$ см
Геометрическая и волновая оптика.	По прямой дороге идет обычная автомашинa с включенными фарами (рассматриваемыми как точечные источники). Расстояние между фарами автомобиля 120 см. На каком расстоянии от наблюдателя должна находиться машина, чтобы он был уверен, что видит два источника света, а не один? Примите диаметр зрачка глаза равным 0,5 см, а эффективную длину света, испускаемого фарами, равной 5500 Å.	Над центром круглого стола радиуса $R = 1,0$ м подвешен светильник в виде плоского горизонтального диска площадью $S = 100$ см ² . Яркость светильника не зависит от направления и равна $L = 1,6 \cdot 10^4$ кд/м ² . На какой высоте от поверхности стола надо поместить светильник, чтобы освещенность периферийных точек стола была максимальной? Какова будет эта освещенность?

Решение задач профессиональной направленности – это не только эффективное средство усвоения физики, но и основной инструмент формирования общепрофессиональных компетенций обучающихся. Физика как учебный предмет естественнонаучного цикла является базой для изучения смежных и специальных дисциплин инженерных направлений подготовки, а, следовательно, сформированные навыки по решению задач профессиональной направленности в дальнейшем помогут студентам лучше разбираться в физических закономерностях, что способствует глубокой фундаментальной и профессионально направленной подготовки студентов.

Список литературы

1. Приказ Министерства науки и высшего образования РФ от 8 февраля 2021 г. № 83 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования – бакалавриат по направлениям подготовки».
2. Огерчук, А. А. Формирование ключевых и общепрофессиональных компетенций обучающихся при решении задач по физике / А. А. Огерчук // Вестник Оренбургского государственного университета, 2020. – № 4 (227). – С. 75-80.
3. Савельев, И.В. Сборник вопросов и задач по общей физике: Учеб. пособие. – 2-е изд., перераб. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1988. – 288 с.
4. Иродов, И.Е. Задачи по общей физике : учебное пособие для вузов / И.Е. Иродов. – 9-е изд. (эл.). – М. – БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. – 431 с.
5. Волькенштейн, В. С. Сборник задач по общему курсу физики : для студентов техн. вузов / В. С. Волькенштейн. – 3-е изд., испр. и доп. – СПб. : Книжный мир, 2007. – 328 с.

МЕХАНИЗМ И КИНЕТИКА МИКРОВОЛНОВОГО НАГРЕВА ОКСИДА ТИТАНА

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»

В секторе производства материалов энергоэффективность, устойчивость и экономическая жизнеспособность приобретают все большее значение для промышленности и общества в последние годы. Микроволновые (МВ) методы могут помочь достичь этих критериев, обеспечивая быструю обработку, повышенную энергоэффективность и снижение стоимости оборудования. Методы МВ-нагрева предлагают более быстрые, простые и экономичные процессы, часто позволяющие получать продукты с высоким выходом и высокой чистотой.

Микроволновый нагрев является очень эффективным методом обработки керамических материалов. Он широко используется в промышленности и на кухне. Основное преимущество микроволнового нагрева заключается в нагреве в объеме образцов, а не в обычных нагревательных печах с поверхностным нагревом. Обычно считают, что микроволновый нагрев происходит за счет дипольного поглощения электрической составляющей микроволнового поля $\vec{E}(\omega t)$.

Нелинейные эффекты часто наблюдались при микроволновой обработке керамических оксидов. На рисунке 1 показана разница в кинетике нагрева стехиометрического TiO_2 и нестехиометрического оксида титана TiO_{2-x} .

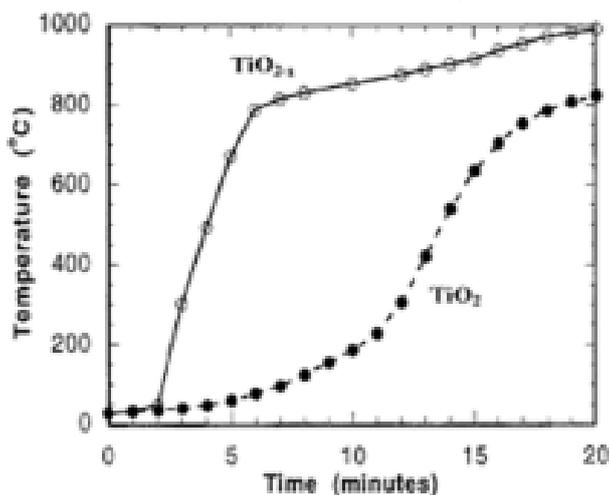


Рисунок 1 – Кинетика нагрева нестехиометрического TiO_{2-x} и стехиометрического TiO_2 оксида титана в СВЧ-полях.

Нагрев TiO_{2-x} происходит линейно и быстро до температуры 800 °C, стехиометрический TiO_2 в том же СВЧ поле нагревается медленнее и нелинейно. Цель данной работы – предложить механизм нелинейного нагрева оксида титана в СВЧ поле.

Считается, что основным механизмом СВЧ-нагрева образцов является поглощение энергии электрическими дипольными моментами вещества. Этот механизм не предполагает нелинейной возрастающей зависимости температуры образца от времени нагрева.

Поэтому в данной работе предполагается, что микроволновый нагрев TiO_2 происходит не за счет электрического дипольного поглощения, а за счет тепла электронов проводимости, количество которых увеличивается с повышением температуры.

В самом общем случае кинетика микроволнового нагрева описывается следующим уравнением

$$dT/dt = P/c, \quad (1)$$

где P – мощность, поглощаемая образцом, c – теплоемкость образца. Мощность электрического тока $j = \sigma \mathcal{E}$, индуцируемого электрической компонентой СВЧ-поля,

$$P = j^2 / \sigma = (en\tau \mathcal{E}^2)$$

В этих формулах $\sigma = en\tau$ – электропроводность образца, e – заряд электрона, n – число электронов, τ – подвижность электронов. Если число электронов n постоянно, то и поглощаемая мощность P будет постоянна,

$$P = j^2 / \sigma = (en\tau \mathcal{E}^2)$$

В этом случае должна наблюдаться линейная зависимость ΔT (температуры) от времени:

$$\Delta T = (T - T_0) = \frac{(en\tau \mathcal{E}^2)}{c} \Delta t$$

В стехиометрическом широкозонном полупроводнике TiO_2 число электронов проводимости $n(T)$ зависит от температуры T в соответствии с законом Больцмана с энергией активации ΔE

$$n(T) = N \frac{e^{-E_1/kT}}{e^{-E_1/kT} + e^{-E_2/kT}} = \frac{N}{1 + e^{\Delta E/kT}}$$

В этом случае нагрев широкозонного полупроводника TiO_2 описывается нелинейным уравнением

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(e\tau N \mathcal{E}^2)}{c} \frac{1}{1 + e^{\Delta E/kT}},$$

которое удобно представит в следующем виде

$$(1 + e^{\Delta E/kT}) \frac{dT}{dt} = a,$$

где $a = (e\tau N \mathcal{E}^2)/c$. Решение этого уравнения при условии $\Delta E/kT \ll 1$

$$2\Delta T + \frac{\Delta E}{k} \ln\left(1 + \frac{\Delta T}{T_0}\right) = a\Delta t$$

в графической форме как зависимость $\Delta t = f(\Delta T)$ представлено на рис.

2.

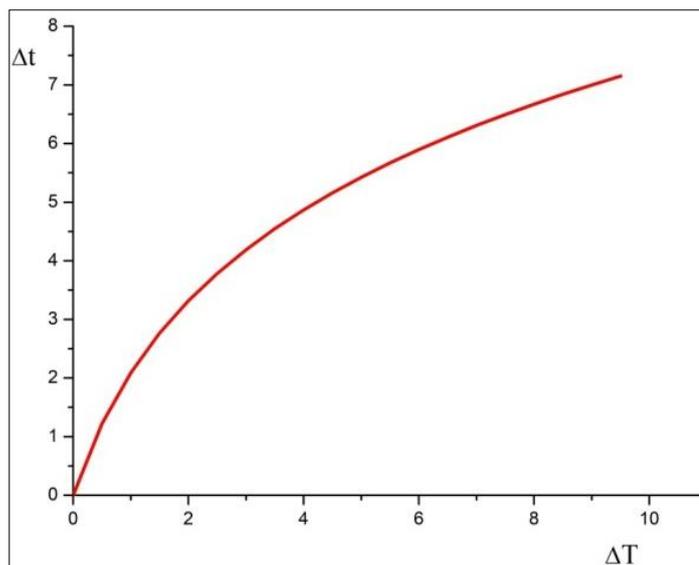


Рисунок 2. Графическое решение уравнения $\Delta t = f(\Delta T)$

Кинетика микроволнового нагрева широкозонного полупроводника TiO_2 , то есть зависимость температуры от времени нагрева $\Delta T = F(\Delta t)$, к сожалению, не имеет аналитического решения в простых элементарных функциях, однако может быть представлена как функция, обратная к функции $\Delta t = f(\Delta T)$. Эта функция представлена на рисунке 3.

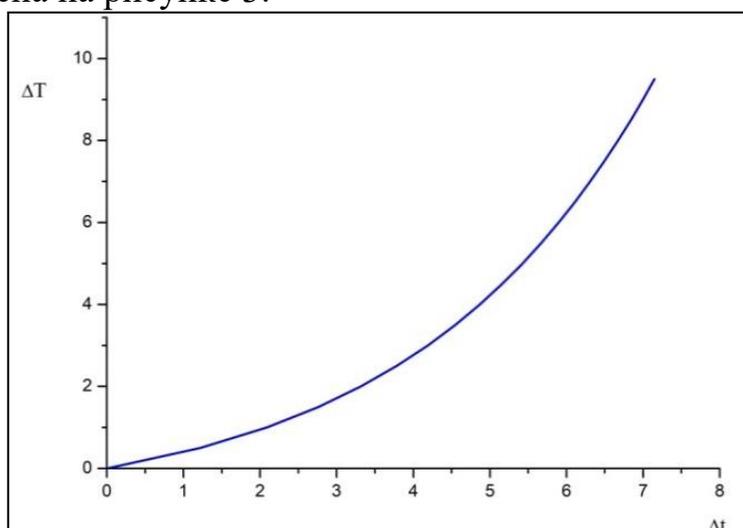


Рисунок 3. Кинетика микроволнового нагрева широкозонного полупроводника TiO_2 за счет джоулева тепла электронов проводимости.

Сравнение экспериментальных данных, представленных на рисунке 1, и теоретической зависимости кинетики нагрева широкозонного полупроводника, представленной на рисунке 3, свидетельствует в пользу гипотезы о нагреве за счет джоулева тепла электронов проводимости, количество которых

увеличивается с ростом температуры за счет их активируемого перехода из валентной зоны в зону проводимости. В реальных экспериментах максимальная температура нагрева ограничивается теплотерями, которые не учтены в данной работе.

Выводы

1. Микроволновый нагрев стехиометрического полупроводника TiO_2 происходит за счет джоулева нагрева электронами проводимости, а не за счет электрического дипольного поглощения.
2. Нелинейная кинетика полупроводникового TiO_2 обусловлена микроволновой активацией связанных и свободных электронов проводимости.
3. Тепловые потери будут ограничивать максимальную температуру нагрева TiO_2 .

Список литературы

1. *Kitchen, H. J.; Vallance, S. R.; Kennedy, J. L.; Tapia-Ruiz, N.; Carassiti, L.; Harrison, A.; Whittaker, A. G.; Drysdale, T. D.; Kingman, S. W.; Gregory, D. H. Modern Microwave Methods in Solid-State Inorganic Materials Chemistry: From Fundamentals to Manufacturing. Chem. Rev. 2014, 114, 1170– 1206, DOI: 10.1021/cr4002353*
2. *Stuerga, D. A. Gaillard, P. J. Microwave Power Electromag. Energy 1996, 31 (2), 101*

СЕНСИБИЛИЗИРОВАННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ КРАСИТЕЛЯ РОДАМИН 6G ПОД ВЛИЯНИЕМ НАНОСИСТЕМ ЛАНТАНОИДОВ С БЕТТА-ДИКЕТОНАМИ

Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент

Центр лазерной и информационной биофизики

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

Явление люминесценции молекул характеризуется распределением энергетических уровней в её структуре. При этом добавление каких-либо других молекул или наноструктур чаще всего приводит к тушению люминесценции, что говорит об изменении энергетической структуры молекулярных уровней и усилению релаксационных процессов энергии электронного возбуждения. Но существуют такие объекты, которые увеличивают излучательную способность молекул. Впервые сенсibilизированная флуоресценция люминофоров в наночастицах из дикетонатов металлов была обнаружена в 2008 году [1]. Вместе с тем, ранее наблюдалось аналогичное явление для систем, образованных смесью из дикетонатных комплексов люминесцирующих и не люминесцирующих лантанидов. Впервые усиление люминесценции комплексов Sm и Eu с β -дикетоном ТТА (теноилтрифторацетон) в присутствии комплексов Gd и Tb аналогичного состава в водно-спиртовых растворах было обнаружено в 1964 году [2]. Аналогичные эффекты для четырехлигандных комплексов 22 лантанидов с другими дикетонами (добензоилметан и бензоилацетон). Для стабилизации образующихся смесей комплексов лантанидов с НТА был использован ПАВ Triton X-100, в данных работах было достигнуто увеличение интенсивности люминесценции комплексов Eu на два порядка при добавлении в раствор комплексов Tb в двухсоткратном количестве. Данный эффект был интерпретирован как проявление межмолекулярного переноса энергии от триплетного уровня комплексов Tb на ионы Eu, находящиеся в соседнем комплексе. Эффект усиления комплексов Eu и Sm был показан для систем состава Ln(ТТА)₃(ТОРО)₂ и Ln(ТТА)₃phen, где ТОРО – триоктилфосфиноксид и phen – 1,10-фенантролин [3], в данной работе также указано на важность процесса триплет-триплетного переноса энергии от лигандов комплексов Gd и Tb на лиганды комплексов Eu с последующей сенсibilизацией люминесценции Eu.

При этом для наночастиц из комплексов Eu, допированных родамином 6G, наблюдалась сенсibilизированная флуоресценция последнего и уменьшение интенсивности люминесценции ионов Eu³⁺ при введении красителя в наночастицы. Однако синглетный возбужденный уровень родамина 6G расположен выше резонансного уровня европия, что делает невозможным перенос энергии от ионов Eu³⁺ на молекулы R6G. Таким образом, уменьшение интенсивности люминесценции Eu³⁺, вызванное добавлением R6G в наночастицы показывает, что миграция энергии синглетного возбуждения комплексов конкурирует с интеркомбинационной конверсией лигандов комплексов в триплетное состояние и

последующей триплет-триплетной миграцией к ионами европия. Впоследствии наблюдалось, что в наночастицы из дикетонатных комплексов трехвалентных металлов также могут входить нейтральные красители, такие как нильский красный [4]. Интенсивность сенсibilизированной флуоресценции красителя зависит от момента его добавления в раствор наночастиц. Величина сенсibilизированной флуоресценции была выше, когда наночастицы формировались в растворе, уже содержащем молекулы красителей. В том случае, когда краситель добавлялся в раствор уже сформированных наночастиц, интенсивность его сенсibilизированной флуоресценции была ниже, так как краситель адсорбировался на поверхности наночастиц, а не входил в их структуру [5].

Процесс переноса энергии электронного возбуждения между различными объектами в присутствии плазмонных наночастиц исследовался сотрудниками центра лазерной и информационной биофизики в большом количестве работ. В качестве примера можно посмотреть работы [6-8].

В эксперименте использовались две методики введения красителя родамин 6G в наноструктуры β -дикетонов с легким металлом скандий (Sc).

Первая: брали 15 мл. раствора Sc концентрации $2 \cdot 10^{-7}$ моль/литр, добавляли 15 мл. phen (1,10 фенантролин) концентрации $2 \cdot 10^{-7}$ моль/литр и 0,9мл NTA (2-нафтоилтрифторацетон) концентрации 10^{-3} моль/литр. Данная система перемешивалась в течение 10 минут на магнитной мешалке на частоте 350 оборотов/мин. Полученный раствор наночастиц разлили в 3 пробирки по 10мл и в каждую пробирку добавили по 1мл красителя R6G с концентрациями: 10^{-7} ; 10^{-6} ; 10^{-5} моль/литр.

Вторая: брали 5мл Sc концентрации $2 \cdot 10^{-7}$ М, добавляли 5мл phen концентрации $2 \cdot 10^{-7}$ М, добавляли краситель R6G с концентрациями, описанными выше получили 3 пробирки, с разными концентрациями R6G, и в каждую добавили по 0,3мл NTA концентрации 10^{-3} М. Перемешивали полученный раствор в течении 10 мин на магнитной мешалке, также при 350 оборотов/мин.

Спектры поглощения растворов снимались на спектрофотометре T70/T70+UV-VIS (Великобритания). Спектры люминесценции снимались на установке, созданной на базе монохроматора МДР 204. Излучение от источника света падает под углом 90° на кювету с образцом, расположенную внутри держателя. Сигнал люминесценции снимается с торца кюветы с раствором. Излучение, идущие от образца, передавалось через стекловолокно на входную щели монохроматора. Разложенная монохроматическая волна с выходной щели монохроматора поступает на фотоэлектронный умножитель (ФЭУ) и через аналогово-цифровой преобразователь поступала на ЭВМ. С помощью специального программного обеспечения получалось графическое изображение спектра на экране монитора и результаты измерений в виде таблицы данных. В результате обработки этих таблиц в программе OriginPro 7.0 строились графики.

Снимался спектр поглощения люминофора различной концентрации от времени создания комплексов лантаноидов и метода создания их создания. На рисунках 1 и 2 приведены типичные спектры поглощения красителя.

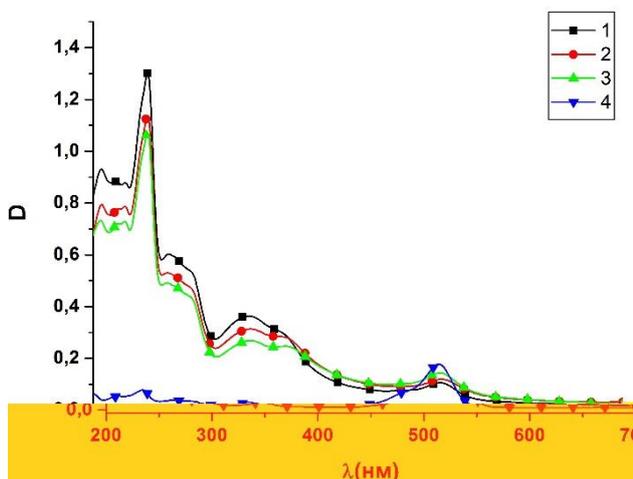


Рисунок 1– Спектр поглощения раствора R6G с концентрацией 10^{-6} М с β -дикетонами (1-метод)(час): 1– 0; 2 – 2; 3 – 24; 4 – R6G

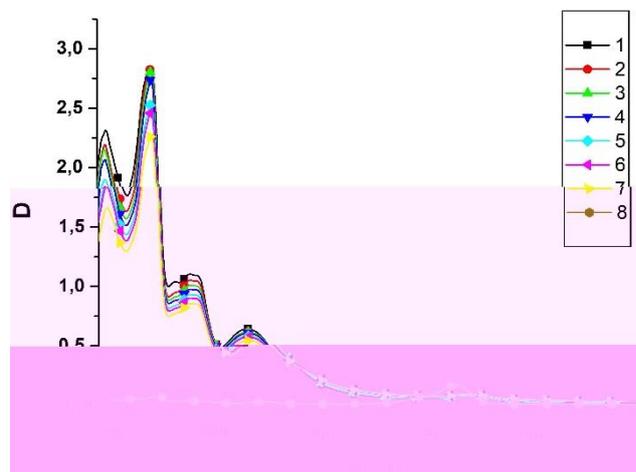


Рисунок 2-Спектр поглощения раствора R6G с концентрацией 10^{-6} М с β -дикетонами (2-метод) (час):1–0; 2–1; 3– 2; 4– 3; 5– 4; 6 – 5; 7 – 24; 8– R6G

Из приведенных графиков (Рисунок 1 и Рисунок 2) наблюдаем, что поглощение раствора красителя с наночастицами становится меньше, чем чистого люминофора.

Снятие спектров люминесценции родамина 6G концентрации 10^{-5} М и 10^{-6} М с β -дикетонами показало, что они имеют схожий характер поведения, независимо от способа их приготовления. Поэтому мы приведем графики люминесценции красителя для концентраций 10^{-6} М и 10^{-7} М.

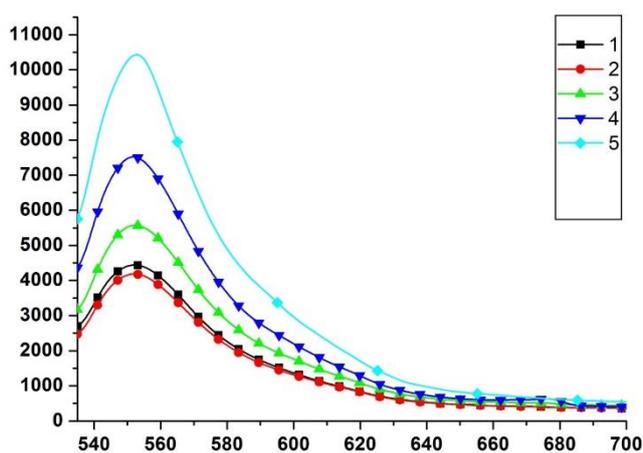


Рисунок 3– Спектр люминесценции раствора R6G с концентрацией 10^{-6} М с β -дикетонами (1-метод)(час): 1– 0; 2 – 1; 3 – 2; 4 – 24; 5- R6G

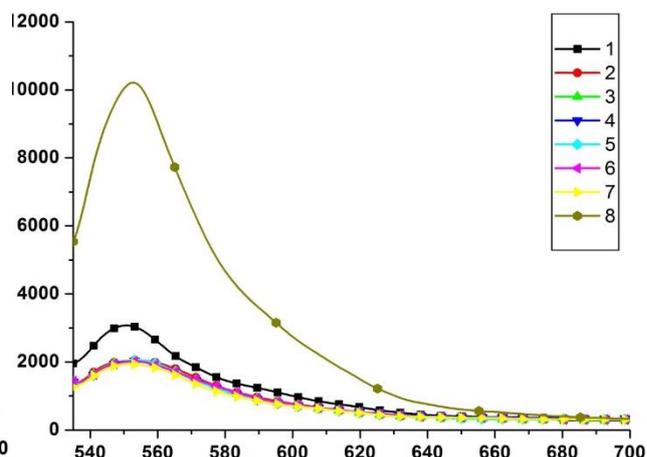


Рисунок 4-Спектр люминесценции раствора R6G с концентрацией 10^{-6} М (2-метод) (час): 1–0; 2–1; 3– 2; 4– 3; 5– 4; 6 – 5; 7 – 24; 8– R6G

Из рисунков 3-4 люминесценции красителя в присутствии β -дикетонов с лантаноидами можно сделать вывод, что краситель встраивается в наночастицы

и интенсивность люминесценции падает. По мере распада наночастиц происходит освобождение люминофора, и интенсивность люминесценции возрастает. При этом она так и не достигает интенсивности свечения свободного родамина 6G.

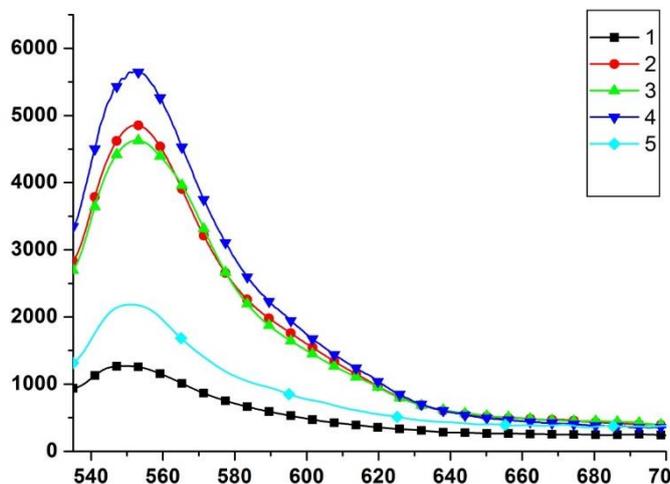


Рисунок 5– Спектр люминесценции раствора R6G с концентрацией 10^{-7} М с β -дикетонами (1-метод)(час): 1– 0; 2 – 1; 3 – 2; 4 – 24; 5- R6G

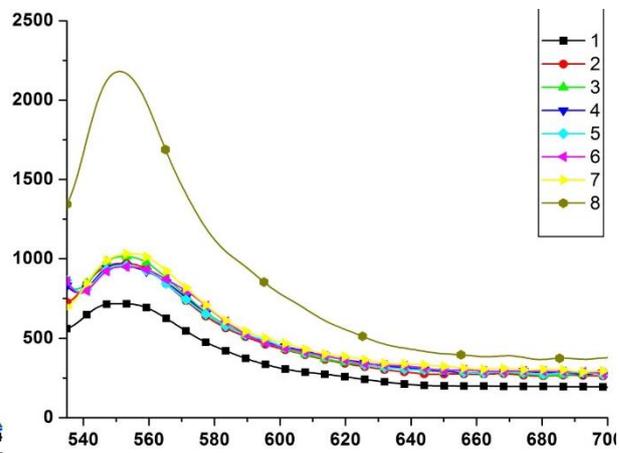


Рисунок 6-Спектр люминесценции раствора R6G с концентрацией 10^{-7} М (2-метод)(час): 1–0; 2–1; 3– 2; 4– 3; 5– 4; 6 – 5; 7 – 24; 8– R6G

На рисунке 5 видим, что максимум спектра приходится на 555 нм (кривая 5). Момент приготовления наночастиц – кривая 1. Спустя 1 час нахождения в растворе наночастиц наблюдаем, что люминесценция выросла в 4 раза (кривая 2), затем, спустя еще 1 час, интенсивность уменьшилась относительно кривой 2 на 5 % (кривая 3), ввиду очень малой концентрации красителя произошло до-страивание молекул R6G в комплекс. После того, как прошло 24 часа, интенсивность возросла на 19% (кривая 4) относительно кривой 3. Здесь наблюдаем эффект сенсibilизированной флуоресценции, где часть красителя вошло в комплексы, а часть не вошло.

На рисунке 6 максимум спектра приходится на 555 нм (кривая 8). Кривая 1 – это момент приготовления наночастиц. Спустя 1 час видим возгорание люминесценции, где интенсивность увеличивается на 25% относительно кривой 1 (кривая 2). Потом, спустя 2,3,4,5 часов, происходит еще до-страивание молекул красителя в наночастицы, что приводит к увеличению интенсивность свечения люминофора порядка 3-5 % относительно кривой 2 (кривые 3,4,5,6,7). Тут наблюдаем, что комплекс стабилизировался ввиду очень маленькой концентрации красителя R6G.

Для получения эффекта сенсibilизированной люминесценции красителя родамина 6G наночастицами β -дикетонов с лантаноидами необходимо подобрать концентрации необходимых компонентов, а также методы их объединения в комплексы.

Автор выражает благодарность профессор М.Г. Кучеренко за обсуждение поставленных в работе задач, а также профессор В.Л. Ермолаеву за предоставление материалов для проведения измерений.

Список литературы

1. Дударь, С.С. Перенос энергии от комплексов Eu (III) и Tb (III) к красителям в их смешанных наноструктурах. I / С.С. Дударь, Е.Б. Свешникова, В.Л. Ермолаев // Оптика и спектроскопия. – 2008. – Т. 104. – № 2. – С. 262-271.
2. Кононенко, Л.И. Экстракционно-флуориметрическое определение самария и европия в смеси окислов редких земель / Л.И. Кононенко, Н.С. Полуэктов, М.П. Никонова // Заводская лаборатория. – 1964. – Т. 30. – № 7. – С. 779-783.
3. Дударь, С.С. Сенсibilизация флуоресценции молекул красителей в наночастицах из комплексов металлов // С.С. Дударь, Е.Б. Свешникова, В.Л. Ермолаев // Оптика и спектроскопия. – 2010. – Т. 109. – № 4. – С. 605-617.
4. Свешникова, Е.Б. Люминесценция нильского красного как индикатор состава наночастиц из дикетонатных комплексов трехвалентных металлов / Е.Б. Свешникова, С.С. Дударь, В.Л. Ермолаев // Оптика и спектроскопия. – 2011. – Т. 110. – № 2. – С. 286-295.
5. Миронов, Л.Ю. Усиление флуоресценции красителей, внедренных в наночастицы из дикетонатов Lu, Eu, Al и Sc различного состава и концентрации / Л.Ю. Миронов, Е.Б. Свешникова, В.Л. Ермолаев // Оптика и спектроскопия. – 2014. – Т. 117. – № 6. – С. 1023-1033.
6. Kucherenko, M.G. Intermolecular Nonradiative Energy Transfer in Clusters with Plasmonic Nanoparticles // M.G. Kucherenko, V.N. Stepanov, and N.Yo. Kruchinin // Optics and Spectroscopy. -2015. -Vol.118. -№ 1. -pp. 103-110. ISSN 0030-400X.
7. Kucherenko, M.G. Plasmon Activation and Luminescence Quenching of Solutions of Polyphenylene Vinylene (MEH-PPV) by Single-Walled and Double-Walled Carbon Nanotubes // M.G. Kucherenko, V.N. Stepanov, and N.Yo. Kruchinin // Optics and Spectroscopy. -2020. -Vol.128. -№ 8. -pp. 1298-1310. ISSN 0030-400X.
8. Кучеренко, М.Г. Экситонные процессы в полимерных цепях / М.Г. Кучеренко, В.Н. Степанов // Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2013. -207с. ISBN 978-5-4417-0177-8

БЛИЖНЕПОЛЬНАЯ ОПТИКА 2D-РЕШЕТОК ИЗ КОМПОЗИТНЫХ ОБОЛОЧЕЧНЫХ НАНОЧАСТИЦ И ЭФФЕКТЫ КОГЕРЕНТНОГО СПАЗИРОВАНИЯ

Степанов Д.А.

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

Представлено теоретическое исследование плазмонных решеточных структур из сферических нанокомпозитов с оптически активными включениями. Нанокомпозиты имеют core-shell структуру с металлическим кором и диэлектрической оболочкой. Наиболее распространенный и успешный подход для описания подобных структур был продемонстрирован с использованием двухуровневой модели Максвелла-Блоха, однако, такая модель не в состоянии явным образом учесть скорость дефазировки системы в режиме ультракоротких импульсов. Поскольку эффекты дефазировки могут оказывать влияние на процессы лазирования, имеет смысл рассматривать именно четырехуровневую атомную систему. Для того, чтобы симулировать физические процессы в рамках данной задачи в наиболее исчерпывающем виде, необходимо использовать полуклассический подход, в котором плазменная среда описывается уравнениями Максвелла, а оптически активная – уравнением Луивилля - фон Неймана [1].

Для численного решения уравнения Максвелла совместно с уравнением Луивилля использовался метод конечных разностей во временной области (FDTD) [3].

В выбранном подходе, в первую очередь, рассматривается классическая часть системы, представленная уравнениями Максвелла[1]:

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \nabla \times \vec{H} &= \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t},\end{aligned}$$

где \vec{P} – макроскопическая поляризуемость, зависящая от оптических параметров активной среды, ε – диэлектрическая проницаемость среды.

Для того, чтобы описать плазмонные моды системы, воспользуемся моделью Друде-Лоренца, в которой имеется следующее выражение для комплексной диэлектрической проницаемости компонентов нанокомпозита:

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\omega_{pD}^2}{j^2 \omega^2 + j\Gamma_D \omega} + \frac{\Delta \varepsilon_L \omega_{pL}^2}{j^2 \omega^2 + j\Gamma_L \omega + \omega_L^2},$$

где $\varepsilon_\infty = 1.1431$ – так называемый «высокочастотный порог проводимости», $\omega_{pD} = 1.3202 \cdot 10^{16}$ рад/с – плазменная частота, $\Gamma_D = 1.0805 \cdot 10^{14}$ рад/с – коэффициент затухания для металлической среды, $\omega_{pL} = 4.1684 \cdot 10^{15}$ рад/с – резонансная частота, $\Gamma_L = 4.4642 \cdot 10^{14}$ рад/с – спектральная ширина линии диэлектрического осциллятора, $\Delta\varepsilon_L = 3.4620$ – фактор изменения относительной диэлектрической проницаемости.

После подстановки в уравнение Максвелла для магнитного поля имеем:

$$\nabla \times H = j\varepsilon_0\varepsilon_\infty\omega E + \frac{\omega_{pD}^2}{j^2\omega^2 + j\Gamma_D\omega} j\omega E + \frac{\Delta\varepsilon_L\omega_{pL}^2}{j^2\omega^2 + j\Gamma_L\omega + \omega_L^2} j\omega E$$

Прибегая к алгебраическим упрощениям и применяя обратное преобразование Фурье к (3), перейдем из частотной области во временную и воспользуемся ADE-методом (Auxiliary Differential Equation) для FDTD-алгоритма[5]:

$$\begin{aligned} \nabla \times H &= \varepsilon_0\varepsilon_\infty \frac{\partial E}{\partial t} + J_D + \frac{\varepsilon_0\partial Q_L}{\partial t}, \\ \frac{\partial J_D}{\partial t} + J_D\Gamma_D &= \omega_{pD}^2\varepsilon_0 E, \\ \frac{\partial^2 Q_L}{\partial t^2} + \Gamma_L \frac{\partial Q_L}{\partial t} + \omega_L^2 Q_L &= \Delta\varepsilon_L\omega_{pL}^2 E. \end{aligned} \quad (4)$$

С учётом решений (5а-5б) произведем дискретизацию уравнения (4) по ортогональному базису параметров решетки Йи[2,3] и решим уравнение (4) внутри ADE FDTD-алгоритма:

$$\begin{aligned} E_x^{n+1} &= \frac{1}{\Omega_x} E_x^n + \frac{\Delta t}{\Omega_x\varepsilon_0\varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial H_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} - \frac{\partial H_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right] - \frac{\Delta t D}{2\Omega_x\varepsilon_0\varepsilon_\infty} - \frac{L}{\Omega_x\varepsilon_\infty}, \\ E_y^{n+1} &= \frac{1}{\Omega_y} E_y^n + \frac{\Delta t}{\Omega_y\varepsilon_0\varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial H_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z} - \frac{\partial H_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} \right] - \frac{\Delta t D}{2\Omega_y\varepsilon_0\varepsilon_\infty} - \frac{L}{\Omega_y\varepsilon_\infty}, \\ E_z^{n+1} &= \frac{1}{\Omega_z} E_z^n + \frac{\Delta t}{\Omega_z\varepsilon_0\varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial H_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} - \frac{\partial H_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} \right] - \frac{\Delta t D}{2\Omega_z\varepsilon_0\varepsilon_\infty} - \frac{L}{\Omega_z\varepsilon_\infty}, \\ H_x^{n+1} &= \frac{1}{\Omega_x} H_x^n + \frac{\Delta t}{\Omega_x\varepsilon_0\varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial E_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z} - \frac{\partial E_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} \right], \end{aligned}$$

$$H_y^{n+1} = \frac{1}{\Omega_y} H_y^n + \frac{\Delta t}{\Omega_y \varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial E_z^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} - \frac{\partial E_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial z} \right],$$

$$H_z^{n+1} = \frac{1}{\Omega_z} H_z^n + \frac{\Delta t}{\Omega_z \varepsilon_0 \varepsilon_\infty} \left[\frac{\partial E_x^{n+\frac{1}{2}}}{\partial y} - \frac{\partial E_y^{n+\frac{1}{2}}}{\partial x} \right],$$

$$D = \alpha_r J_{Dr}^n + \beta_r E_r^n + J_{Dr}^n,$$

$$L = \zeta_r E_r^n + \tau_r Q_{Lr}^n - \rho_r Q_{Lr}^{n-1} - Q_{Lr}^n,$$

$$J_{Dr}^{n+1} = \alpha_r J_{Dr}^n + \beta_r [E_r^{n+1} + E_r^n],$$

$$Q_{Lr}^{n+1} = \zeta_r (E_r^{n+1} + E_r^n) + \tau_r Q_{Lr}^n - \zeta_r Q_{Lr}^{n-1};$$

$$\alpha_r = \frac{\left(1 - \frac{\Delta t \Gamma_D}{2}\right)}{\left(1 + \frac{\Delta t \Gamma_D}{2}\right)}, \quad \rho_r = \frac{1}{\left(1 + \Delta t \Gamma_L + \frac{\Delta t^2}{2} \omega_L^2\right)}, \quad \Omega_r = \left(\frac{\zeta_x}{\varepsilon_\infty} + 1 + \frac{\Delta t \beta_x}{2 \varepsilon_0 \varepsilon_\infty}\right)$$

$$\beta_r = \frac{\frac{\Delta t \omega_{pD}^2 \varepsilon_0}{2}}{\left(1 + \frac{\Delta t \Gamma_D}{2}\right)}, \quad \zeta_r = \frac{\frac{\Delta t^2 \Delta \varepsilon_L \omega_{pL}^2}{2}}{\left(1 + \Delta t \Gamma_L + \frac{\Delta t^2}{2} \omega_L^2\right)}, \quad \tau_r = \frac{\left(2 + \Delta t \Gamma_L - \frac{\Delta t^2}{2} \omega_L^2\right)}{\left(1 + \Delta t \Gamma_L + \frac{\Delta t^2}{2} \omega_L^2\right)}$$

где $r=\{x,y,z\}$; $n=\{i,j,k\}$.

После программирования уравнений (6а-6е) и проведения FDTD-симуляции для сферического нанокompозита core-shell структуры, были получены следующие результаты для распределения поля в плазмонных модах на границе раздела среды металл-диэлектрик (Рисунок 2). Для квазидвумерной решетки была реализована модель сферических наночастиц из золотого кора радиусом 70 нм и диэлектрической оболочки из SiO₂. Спектр длин волн возбуждающего плоскополяризованного излучения составил 0.4-0.75 мкм, максимум поглощения наблюдался для длины волны 0.67 мкм.

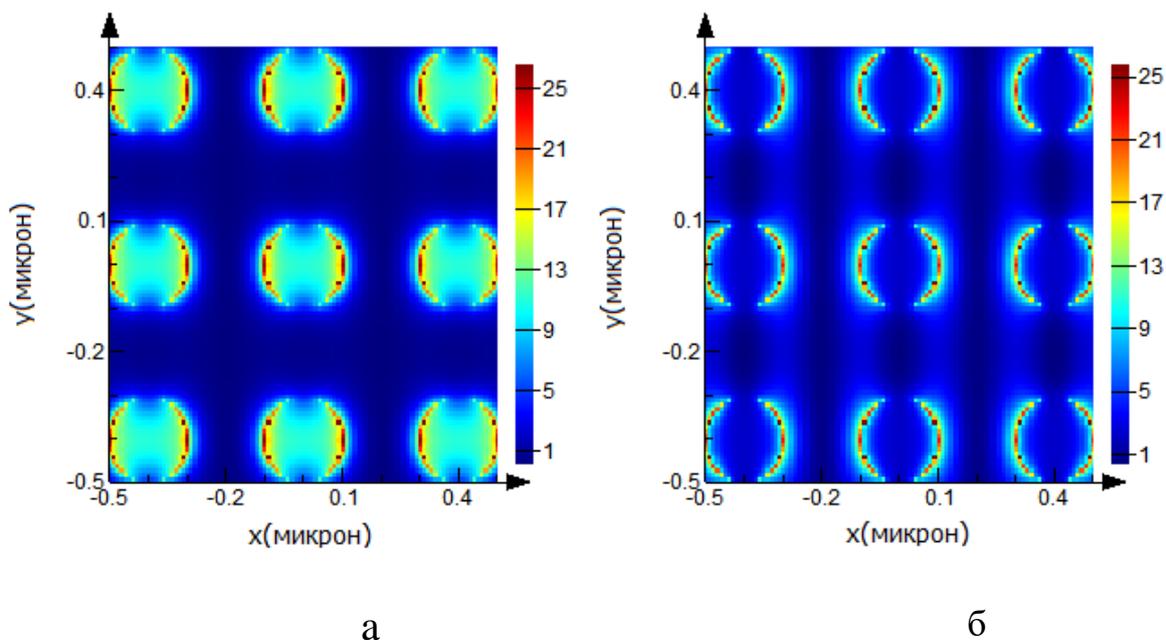


Рисунок 2 – Распределение поля плазмонной моды в плоскости поглощения (а) и в плоскости отражения(б) FDTD алгоритма.

Кроме того, с использованием данной физической модели была произведена симуляция слоистого нанокompозита с диэлектрическим кором из SiO₂ и плазмонной оболочкой из Au – рисунок 3.

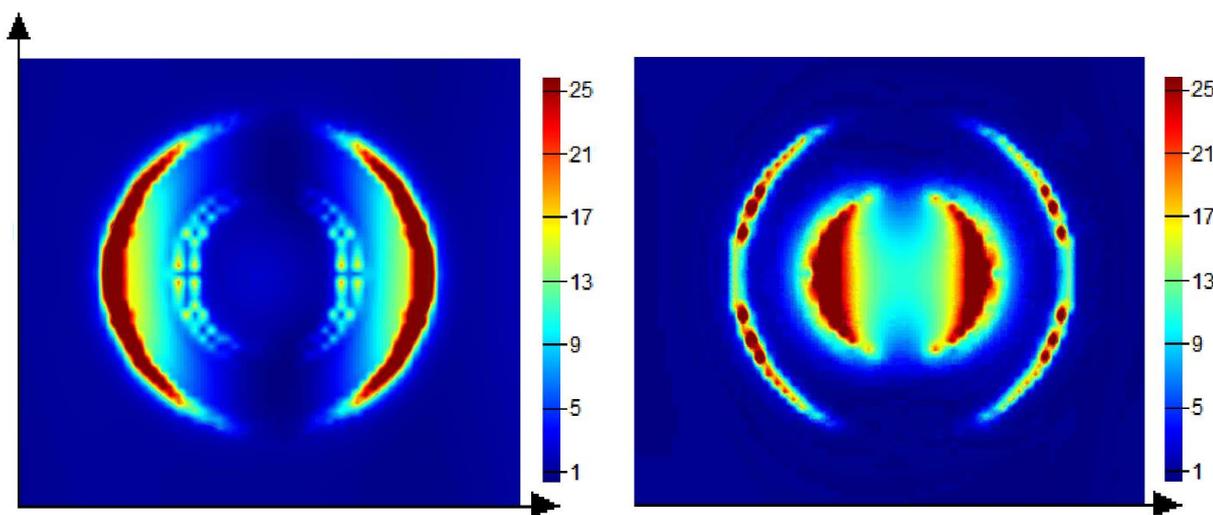


Рисунок 3 – Распределение поля плазмонной моды в оболочечной core-shell системе «dielectric core - plasmonic shell».

Полученные результаты соответствуют ситуации, когда в системе отсутствуют атомы красителя. Рассмотрим теперь случай, когда в пассивной среде находятся оптически активные молекулы Родамина. Чтобы учесть их влияние на электродинамику среды, перейдём к самосогласованному решению уравнений Максвелла-Луивилля. Определим эволюцию матрицы плотности для молекул в представлении Гейзенберга в приближении

вращающейся волны. В данном случае уравнение Гейзенберга для эволюции поляризации молекул во времени можно представить в форме уравнения классического электронного осциллятора[1,5]

$$\frac{d^2\vec{P}}{dt^2} + \Delta\omega \frac{d\vec{P}}{dt} + \omega^2\vec{P} = \kappa N \Delta\rho(t)\vec{E}(t),$$

где $\Delta\omega$ – ширина линии частотного перехода, N – плотность молекул в активной среде, $\Delta\rho(t)$ – разница населенности между двумя энергетическими уровнями, $\kappa = 6\pi\epsilon_0 c^3 / \omega^3 \tau$, и τ – время спонтанной эмиссии в переходах между уровнями.

В качестве следующего шага необходимо определить эволюцию всей матрицы плотности наночастицы. Полагая, что концентрация оптически активных включений достаточно низка для пренебрежения кулоновским взаимодействием, воспользуемся уравнением Луивилля-фон Неймана для оператора плотности $\hat{\rho}$ единичной молекулы:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}] - i\hbar \hat{\Gamma} \hat{\rho}. \quad (10)$$

Уравнение (3) приводит к системе из 16 уравнений движения (11а-11р) для элементов матрицы плотности, представляющих собой эволюцию полной матрицы плотности[1]:

$$\frac{d\rho_{00}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\Omega_{03}\rho_{30} - \Omega_{30}\rho_{03}) + \Delta_{30}\rho_{33} + \Delta_{10}\rho_{11}, \quad (11а)$$

$$\frac{d\rho_{01}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{03}\rho_{31} - \Omega_{21}\rho_{02} - \rho_{01}(\epsilon_1 - \epsilon_0)] - \gamma_{01}\rho_{01}, \quad (11б)$$

$$\frac{d\rho_{02}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{03}\rho_{32} - \Omega_{12}\rho_{01} - \rho_{02}(\epsilon_2 - \epsilon_0)] - \gamma_{02}\rho_{02}, \quad (11в)$$

$$\frac{d\rho_{03}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{03}(\rho_{33} - \rho_{00}) - \rho_{03}(\epsilon_3 - \epsilon_0)] - \gamma_{03}\rho_{03}, \quad (11г)$$

$$\frac{d\rho_{10}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{12}\rho_{20} - \Omega_{30}\rho_{13} - \rho_{10}(\epsilon_1 - \epsilon_0)] - \gamma_{10}\rho_{10}, \quad (11д)$$

$$\frac{d\rho_{11}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\Omega_{12}\rho_{21} - \Omega_{21}\rho_{12}) - \Delta_{10}\rho_{11} + \Delta_{21}\rho_{22}, \quad (11е)$$

$$\frac{d\rho_{12}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{12}(\rho_{22} - \rho_{11}) - \rho_{12}(\epsilon_2 - \epsilon_1)] - \gamma_{12}\rho_{12}, \quad (11ж)$$

$$\frac{d\rho_{13}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{12}\rho_{23} - \Omega_{03}\rho_{10} - \rho_{13}(\epsilon_3 - \epsilon_1)] - \gamma_{13}\rho_{13}, \quad (11з)$$

$$\frac{d\rho_{20}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{21}\rho_{10} - \Omega_{30}\rho_{23} - \rho_{20}(\epsilon_2 - \epsilon_0)] - \gamma_{20}\rho_{20}, \quad (11и)$$

$$\frac{d\rho_{21}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\rho_{21}(\epsilon_2 - \epsilon_1) - \Omega_{21}(\rho_{22} - \rho_{11})] - \gamma_{21}\rho_{21}, \quad (11к)$$

$$\frac{d\rho_{22}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\Omega_{21}\rho_{12} - \Omega_{12}\rho_{21}) - \Delta_{21}\rho_{22} + \Delta_{32}\rho_{33}, \quad (11л)$$

$$\frac{d\rho_{23}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{21}\rho_{13} - \Omega_{03}\rho_{20} - \rho_{23}(\epsilon_3 - \epsilon_2)] - \gamma_{23}\rho_{23}, \quad (11м)$$

$$\frac{d\rho_{30}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\rho_{30}(\epsilon_3 - \epsilon_0) - \Omega_{30}(\rho_{33} - \rho_{00})] - \gamma_{30}\rho_{30}, \quad (11н)$$

$$\frac{d\rho_{31}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{30}\rho_{01} - \Omega_{21}\rho_{32} + \rho_{31}(\varepsilon_3 - \varepsilon_1)] - \gamma_{31}\rho_{21}, \quad (11o)$$

$$\frac{d\rho_{32}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\Omega_{30}\rho_{02} - \Omega_{12}\rho_{31} + \rho_{32}(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)] - \gamma_{32}\rho_{22}, \quad (11п)$$

$$\frac{d\rho_{33}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\Omega_{30}\rho_{03} - \Omega_{03}\rho_{30}) - (\Delta_{30} + \Delta_{32})\rho_{33}, \quad (11р)$$

где Δ_{ij} – скорость затухания возбужденных состояний и γ_{ij} – скорость дефазировки между двумя энергетическими уровнями i и j .

Гамильтониан H в (3) включает в себя член $\vec{d} * \vec{E}(t)$, описывающий взаимодействие квантовой четырехуровневой системы атома красителя с электромагнитным полем. Схема рассматриваемых атомных уровней показана на рисунке 1.

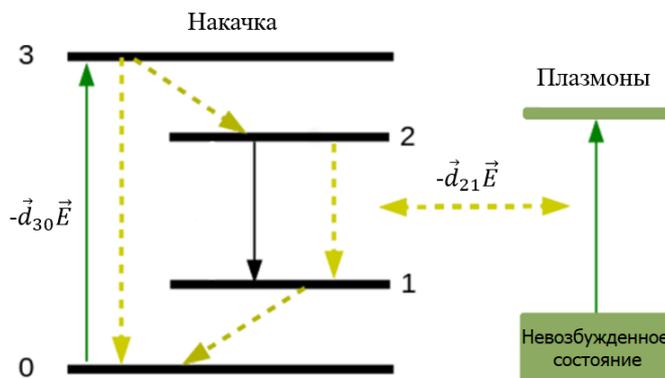


Рисунок 1 – Схема энергетических уровней атома красителя. Переход $(0 \rightarrow 3)$ соответствует накачке, $(2 \rightarrow 1)$ – усилению генерации.

Таким образом, исходя из распределения поля на рисунках 2 и 3, и анализа уравнений (11a-11p) можно предположить, что модель реализована корректно и физично. Следующим шагом в развитии модели будет учёт влияния оптически активной среды и совместное решение уравнений Максвелла-Луи-вилля в модифицированном FDTD-алгоритме, а также проведение ряда симуляций для подробного исследования эффектов когерентного спазирования в квазидвумерных решетках из оболочечных наночастиц в ультракоротком импульсном режиме генерации.

Исследование выполнено в русле научного направления ЦЛИБФ ОГУ «Плазмонные характеристики слоистых нанокompозитных частиц со структурой "ядро-оболочка", многочастичных кластеров и пространственных решеток на их основе» при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Автор выражает благодарность профессору М.Г. Кучеренко за ценные рекомендации и полезные комментарии.

Список литературы

1. Dhara J. Trivedi,1 Danqing Wang, Teri W. Odom, and George C. Schatz. Model for describing plasmonic nanolasers using Maxwell-Liouville equations with finite-difference time-domain calculations / Physical Review. 2017. A 96, 053825.
2. Allen Taflove, Susan C. Hagness. Computational Electrodynamics the Finite-Difference Time-Domain Method. Third Edition / ISBN 1-58053-832-0.
3. Allen Taflove, Ardavan Oskooi, Steven G. Johnson. Advances in FDTD Computational Electrodynamics Photonics and Nanotechnology / ISBN-13: 978-1-60807-170-8.
4. Iftikhar Ahmed, Eng Huat Khoo, Oka Kurniawan, Er Ping Li. Modeling and Simulation of Active Plasmonics with the FDTD method by using Solid State and Lorentz-Drude Dispersive Model / DOI: 10.1364/JOSAB.28.000352.
5. A.A. Al-Jabr, M.A. Alsunaidi. A General ADE-FDTD Algorithm for the Simulation of Different Dispersive Materials / PIERS Proceedings, Beijing, China, March 23–27, 2009
6. М. Г. Кучеренко, Т.М.Чмерева, А.А.Пискунов. Спектры динамической поляризуемости слоистых сферических нанокomпозитов в режиме спазера с вырожденным электронным газом металла оболочки (настоящий сборник).

МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ К ЭКЗАМЕНУ ПО ФИЗИКЕ В ОГУ

Узенбаев Ф.Г., канд. техн. наук, доцент, Якупов Г.С.

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

Целью экзамена по физике является контроль усвоения выпускниками всех разделов школьного курса физики:

1. Механики, которая включает в себя кинематику, динамику, статику, законы сохранения в механике, механические колебания и волны;
2. Молекулярной физики (молекулярно-кинетическая теория, термодинамика);
3. Электрических и магнитных явлений, включающих в себя основные представления об электрическом поле, постоянном токе, магнитном поле, электромагнитной индукции, электромагнитные колебания и волны, оптику, основы специальной теории относительности;
4. Квантовой физики, рассматривающей корпускулярно-волновой дуализм, физику атома и атомного ядра.

Для каждого из разделов предусмотрены задачи различного уровня сложности, которые можно условно разделить на базовые, повышенного уровня сложности и высокого уровня сложности.

Экзамен предполагает проверку и степень усвоения содержания школьной программы по физике и приобретенных умений и навыков:

- 1) уметь интерпретировать графики зависимостей физических величин, которые характеризуют различные физические процессы, уметь определять с помощью графических зависимостей различные физические величины;
- 2) используя формулы и законы вычислять значения физических величин;
- 3) уметь работать с векторными величинами, знать понятия составляющей вектора и проекции вектора;
- 4) уметь анализировать, как изменяются физические величины для колебательных процессов и явлений;
- 5) уметь осуществлять комплексный анализ физических процессов, представленных в виде таблиц или графиков.

Перечислим типы заданий, которые вызывают наибольшие затруднения:

- 1) задания связанные с определением силы давления столба жидкости, удельной теплоёмкости, удельных теплоты плавления и парообразования веществ используя график зависимости нагрева от полученного тепла, задачи на определение периода колебаний LC-контура, с применением формулы для изменения напряжения на обкладках конденсатора и на вычисление энергии магнитного поля катушки с током;
- 2) задачи на определение направления вектора полной магнитной индукции поля двух проводников с током, задания на использование первого закона

термодинамики для циклического процесса с использованием диаграммы pV и pT ;

- 3) задания, где необходимо провести комплексный анализ физических процессов.

Все экзаменационные варианты включают в себя по 20 заданий по различным темам школьного курса физики. Задания включали в себя задачи по механике, молекулярной физике и квантовой физике [1].

Самые высокие результаты были достигнуты для заданий по механике, средний процент выполнения по всем видам этих заданий составил 38,1%. Более низкий результат был достигнут при решении заданий по молекулярной физике и термодинамике – 30,2%, и самыми низкими оказались результаты для задач по квантовой физике – 26,1%.

Уровень освоения достигнут для трёх групп задач: на определение силы натяжения нити для тела, подвешенного на нити и опущенного в жидкость; на применение закона сохранения механической энергии (шарик на сжатой пружине подскакивает вверх) и на применение уравнения теплового баланса для нагревания и плавления части вещества.

В ходе анализа результатов выполнения экзаменационных заданий ОГУ по физике были выявлены традиционные «проблемные зоны», причиной которых является общепринятая практика изучения соответствующих тем и разделов. Эти проблемные зоны включают как общие вопросы курса физики (элементы статистики, более глубокое понимание механических проблем, чем электродинамика и квантовая физика), так и более мелкие конкретные проблемы (например, потенциал электростатического поля, соединения конденсаторов).

Детальный анализ содержания заданий и типичных ошибок, которые были допущены участниками экзамена, позволяет предложить учителям и учащимся рекомендации при планировании учебного процесса, а также принять меры по уменьшению частных проблем.

Кроме того, уровень подготовки по физике для выпускников разных учебных заведений может заметно отличаться, в связи с чем будут отличаться и результаты экзамена по физике. Поэтому при совершенствовании процесса обучения физике необходимо использование педагогических технологий, позволяющих обеспечить дифференцированный подход к обучению. К таким технологиям и методическим приёмам можно отнести перечисленные ниже педагогические методики.

Для учащихся выпускных классов с хорошей успеваемостью, основное внимание следует направить на решение задач разнообразного содержания и разного уровня сложности. По характеру выполняемых при решении действий, эти задачи можно разделить на три группы:

- 1) применение изученного алгоритма решения задачи;
- 2) использование комбинаций разнообразных изученных алгоритмов;
- 3) выработка своего алгоритма решения задания.

В зависимости от используемого контекста различают:

- 1) типичные учебные ситуации, с которыми сталкиваются учащиеся в процессе обучения;

- 2) измененные условия, в которых, требуется увидеть и обосновать выбор физической модели, ввести дополнительные обоснования в решении;
- 3) новые ситуации, предполагающие серьезную активность в анализе физических процессов и самостоятельный выбор физической модели для решения проблемы.

Составляя задания для поступающих в вуз необходимо начинать с заданий, требующих применения только что рассмотренных алгоритмов, при этом нежелательно полностью повторять условия предыдущих заданий. В задании требуется изменить не только числовые значения физических величин, но и использовать иные словесные обороты для описания аналогичной ситуации.

В этом случае управление алгоритмом осуществляется с полным учетом работы над состоянием и разумным выбором физической модели. Далее представляется возможность перейти к использованию алгоритма, изученного в модифицированной ситуации, затем к комбинации алгоритмов, изученных в типичной ситуации, и т. д. Таким образом, последовательность усложнения задач складывается из вариаций задач, различающихся как по сложности решения, так и по контексту [2].

Оценивая решения заданий в процессе обучения, можно выделить следующие элементы полностью правильного решения:

- 1) работа с условием задачи: запись «Дано», выполнение схематического рисунка, если это требуется для понимания физической ситуации представленной в задаче; описание физической модели, то есть указание того, какие явления или процессы учитываются, какие приёмы можно использовать для решения задачи, что можно опустить, чтобы ситуация соответствовала выбранной модели;
- 2) указание всех необходимых для решения задачи законов и формул; описание используемых физических величин, не вошедших в краткое условие;
- 3) выполнение математических преобразований и расчётов, получение ответа;
- 4) проверка полученного ответа на размерность и целесообразность значения.

Для больших по численности группы учащихся среднего уровня подготовки важным является изучение теоретического материала курса физики с пониманием основных законов и процессов и явлений. С такими группами требуется дополнительная работа с теоретическим материалом, решении большого количества разнообразных заданий, требующих анализа информации. В данном случае возможно использование технологии обучения в небольших группах численностью от 3 до 5 человек.

Использование технологии сотрудничества позволяет учащимся обмениваться мнениями, учиться и помогать друг другу. В случае возникновения каких-либо проблем при решении задачи учащиеся, входящие в такую группу, могут обсудить их, чтобы прийти к правильному ответу. В результате групповой работы у учащихся не только формируются предметные умения и навыки, но и развивается их коммуникативная компетентность, а также умение

формулировать проблему, умение слушать и слушать других, выражать свое мнение и уважать мнение других, способность достичь консенсуса.

Ведущая роль учителя при использовании групповой работы заключается в следующем: в четкой формулировке задач, которые должны быть поняты и поняты всеми членами группы; в своевременной помощи при возникновении затруднений, в грамотной организации оценки деятельности группы в целом и каждого участника, а также в организации рефлексии [2].

Необходимо помнить, что при использовании работы в группах необходимо проводить оценивание работы как всей группы, так и индивидуальную работу каждого её участника. Оценка групповой деятельности значительно увеличивает индивидуальную ответственность за совместную работу. Индивидуальная оценка в процессе обучения должна сравнивать достижения учащегося с его предыдущими показателями, а не с достижениями других учащихся.

Процесс обучения становится более эффективным для всех групп учащихся, если используются активные методы самообучения. Основное внимание уделяется осведомленности учащихся о целях обучения. Ключевым моментом является качественная разработка учителем запланированных промежуточных результатов (тематических или по завершеному учебному блоку). Учащиеся должны знать эти запланированные результаты заранее, знать, чему научиться в следующие несколько часов, какие задачи нужно изучить, как их тестировать и оценивать.

Осведомленность о целях обучения увеличивает независимость, позволяет учащемуся понять, на какой стадии он находится в процессе обучения и как он может улучшить свои результаты. Открытие ближайших целей и задач обучения, четкие руководящие принципы в форме учебных задач, которые необходимо изучить для выполнения, и заранее определенные критерии оценки результатов являются ключом к развитию образовательной независимости, овладения навыками самообразования и образовательной успеваемости.

При этом следует помнить, что специалисты современных высокотехнологичных производств чаще всего работают на стыке различных естественных наук. Поэтому одним из приоритетных направлений преподавания физики является проектно-исследовательская деятельность. Эта деятельность имеет большое значение, поскольку помогает подчеркнуть прикладной характер теоретических знаний и практических навыков, полученных на традиционных уроках.

Список литературы

1. Узенбаев, Ф. Г. Физика [Текст] : подготовка к ЕГЭ и экзаменам в форме тестирования: учеб.пособие для поступающих / Ф. Г. Узенбаев; М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. агентство по образованию; Гос. образоват. учреждение высш. проф. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург : ГОУ ОГУ, 2008. - 104 с. : ил.

2. Узенбаев, Ф. Г. Технология сквозного изложения курса решения задач по динамике для учителей физики "условных специалистов", читаемого в Оренбургском государственном университете [Электронный ресурс] / Узенбаев Ф. Г. // Университетский комплекс как региональный центр развития образования, науки и культуры: материалы Всерос. науч.-метод. конф., 1-3 февр. 2017 г.,

Оренбург / М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет.образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Электрон.дан. - Оренбург : ОГУ,2017. - . - С. 1860-1862. . - 3 с.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПЛАТФОРМЫ MOODLE ПРИ ДИСТАНЦИОННОМ ИЗУЧЕНИИ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИКА» СТУДЕНТАМИ ОГУ

Цветкова Е.В.

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

В условиях вхождения общества в информационную эпоху, информационно-коммуникационные технологии постепенно охватывают все виды сферы жизни общества. Происходит ускоренный рост потока информации и знаний, их глобализация. Требуется новые подходы к образовательной деятельности, культуре мышления, соответствующий уровень владения знаниями и компетенциями. Сфера образования соответственно изменяется в условиях происходящих перемен. Этот процесс сопровождается изменением целей образования, характером познаний и трансформаций роли и места образования в современном обществе.

Модернизация современного образования одним из своих приоритетов выделяет информатизацию, главной задачей которой является создание единой информационно-образовательной среды (ИОС), как одного из условий достижения нового качества образования.

ИОС университета обеспечивает:

- информационно-методическую поддержку образовательного процесса;
- планирование образовательного процесса и его ресурсного обеспечения;
- мониторинг хода и результатов образовательного процесса;
- современные способы поиска, создания, сбора, анализа и обработки информации;
- дистанционное взаимодействие всех участников образовательного процесса (студентов и преподавателей).

Основная задача ИОС – адаптация образовательной среды к интересам и потребностям студентов в получении знаний по предмету, обеспечение сетевого взаимодействия между всеми субъектами образовательного процесса и применение информационно-коммуникационных технологий. Её отличительная черта – создание условий для выявления новых образовательных технологий, новых методов и форм учебной работы, увеличения разнообразия, широты и интенсивности применения информационно-коммуникационных технологий [1].

Несомненным преимуществом внедрения ИОС, является организация дистанционного обучения.

Дистанционное обучение – это совокупность информационных технологий, обеспечивающих предоставление обучаемым основного объёма изучаемого материала, интерактивное взаимодействие обучаемых и преподавателей в процессе обучения, возможность самостоятельной работы студентов при изучении учебного материала.

Дистанционные технологии сегодня выгодно дополняют и расширяют традиционные формы организации образовательного процесса. Дистанционное обучение с помощью компьютера проводится без отрыва от работы и практически без выездов с места проживания обучающихся [2].

Для реализации дистанционного обучения в ОГУ, была выбрана электронная образовательная платформа Moodle - аббревиатура от Modular Object-Oriented Dynamic Learning Environment (модульная объектно-ориентированная динамическая учебная среда), которая удовлетворяет учебным целям университета.

Функциональные возможности использования электронного курса Moodle в образовательном процессе в значительной степени определяется его дидактическими свойствами, такими как интерактивность, коммуникативность, возможность представления учебных материалов - текст, графика, анимация, аудио, видео, средствами мультимедиа, применением компьютерного моделирования для исследования образовательных объектов, а также автоматизация различных видов учебных работ.

Использование электронного курса Moodle в образовательном процессе в сочетании с системами управления обучением и управления образовательным контентом позволяет эффективно реализовать:

- организацию самостоятельной когнитивной деятельности учащихся;
- организацию индивидуальной образовательной поддержки учебной деятельности каждого студента преподавателем;
- организацию групповой учебной деятельности с применением средств информационно-коммуникационных технологий [3].

Функциональная структура электронного курса и входящих в его состав функциональных элементов соответствуют их назначению в образовательном процессе и уровню образования изучаемой дисциплины - Физика.

Технические требования к электронному курсу регламентируются оптимальной эксплуатацией. Организация диалогового взаимодействия студент - преподаватель включает тест по изучаемому предмету и рекомендации по недостаточно усвоенным и изученным разделам, поиск необходимой информации, выбор маршрута обучения по объему и уровню сложности. Тесты Moodle – отличный ресурс для каждого преподавателя. Можно создавать различные типы вопросов, случайным образом генерировать тесты из банка вопросов, давать несколько попыток прохождения теста.

Эргономические требования курса учитывают комплекс физиологических, психофизиологических и психологических особенностей студента, проявляющиеся в процессе использования электронного курса, обусловлены созданием дружественного интерфейса, обеспечением оптимального управления, включая развитую систему навигации и достаточную скорость извлечения информации. Рассматривая интерфейс как физическое динамическое устройство, взаимодействующее со студентом, с учетом эргономических требований выбраны размеры и тип шрифта, цветовое оформление, навигация по разделам [4].

Электронный курс Moodle: «Физика (19.03.03 Продукты питания животного происхождения очной формы обучения)» [5], предназначен для обучающихся по программам высшего образования по направлениям подготовки, входящим в образовательные области «Математические и естественные науки» и «Инженерное дело, технологии и технические науки». Представленный курс будет полезен для студентов, обучающихся дистанционно при изучении учебной дисциплины «Физика».

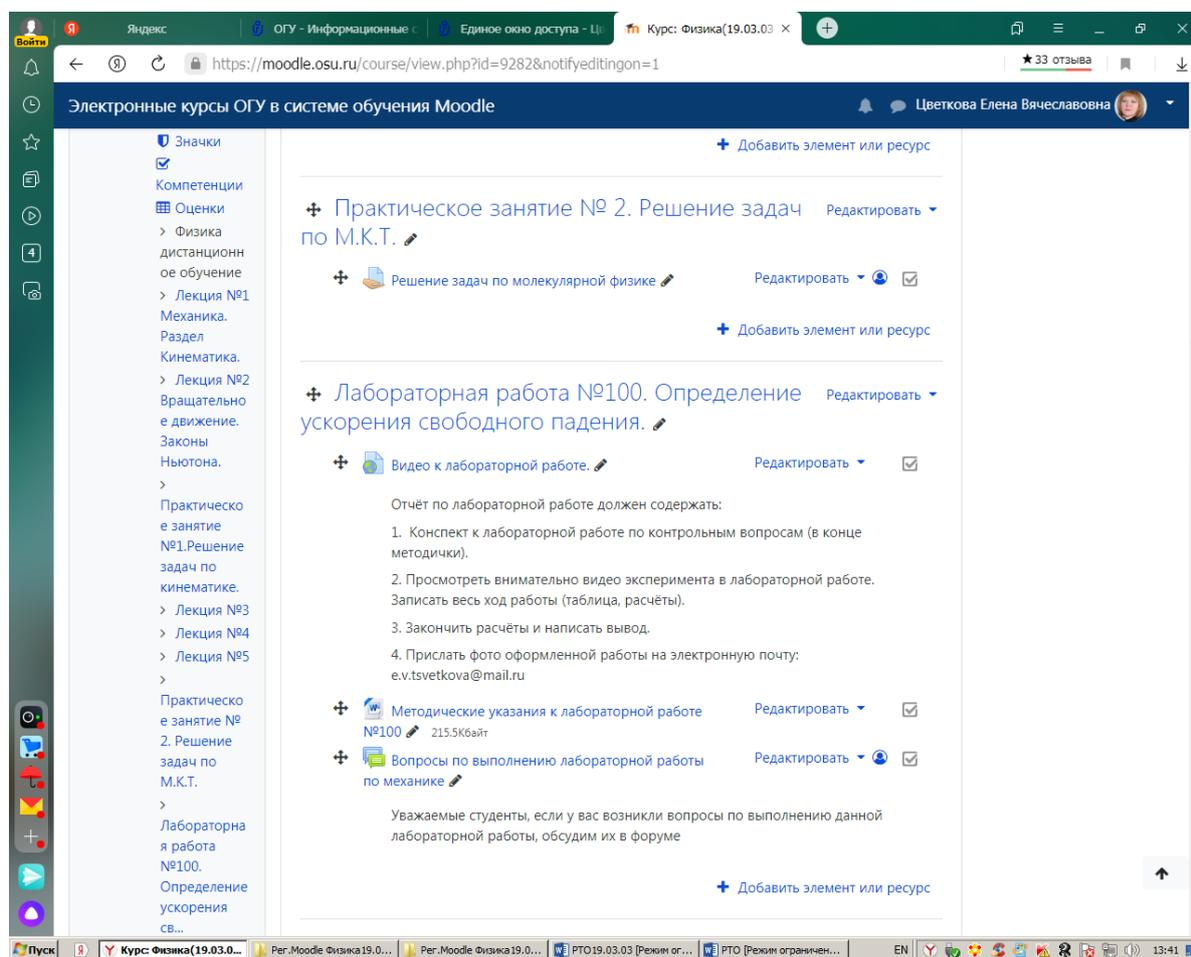


Рисунок 1 - Скриншот страницы курса

Электронный курс прошёл апробацию в учебном процессе. На курс подписаны группы студентов ФПБИ в которых сформирован журнал учебных достижений студентов и установлена обратная связь с преподавателем.

Структура электронного курса:

- мотивационный блок, включающий в себя формулировку целей и задач курса, рабочую программу, электронный учебник по физике, рекомендуемую литературу;
- учебный блок, разбит на 12 тематических модуля в соответствии с рабочей программой;
- теоретический материал в виде 19 лекций - презентаций;

- задание представлены в виде 8 практических занятий, настроенных через элемент курса «Задание» (в каждом тематическом блоке);
- элементы, обеспечивающие обратную связь – «Форум», «Чат»;
- элемент курса «Тест» для проведения рубежного и итогового контроля.

В банке 60 вопросов по дисциплине;

- глоссарий по курсу, включающий в себя более 30 понятий по дисциплине.

Результат анализа организации самостоятельной работы студентов ФПБИ в информационной образовательной среде позволил сделать вывод, что наличие дистанционного обучения на платформе Moodle может обеспечить качественное образование. Возможно, что данный вид обучения в дальнейшем будет цениться так же, как и классическое образование. Дистанционное образование открывает студентам доступ к нетрадиционным источникам информации, повышает эффективность самостоятельной работы студентов, дает новые возможности для обретения и закрепления различных профессиональных навыков. Можно сделать вывод, что появление дистанционного образования привело к изменению традиционной модели взаимодействия «преподаватель – студент». В учебный процесс добавились новые субъекты с новыми функциями – дистанционный преподаватель – тьютор, технический инструктор, координатор или администратор дистанционного образования. В настоящее время организационные и педагогические возможности реализуются в ОГУ с помощью практически всех доступных телекоммуникационных сервисов.

Список литературы

1. О создании системы дистанционного образования в РФ: решение коллегии Госкомвуза от 9 июня 1993 г. №9/1 // Консультант Плюс: Высшая Школа: Программа информационной поддержки российской науки и образования: Специальная подборка правовых документов и учебных материалов для студентов: учебное пособие. 2007. Вып.4

2. Андреев А.В., Андреева С.В, Доценко И.Б. Практика электронного обучения с использованием Moodle. – Таганрог: Издательство. ТТИ ЮФУ, 2008. – 243 с.

3. Бекетова М.В., Каткова Ю.А. Использование системы дистанционного обучения MOODLE в учебном процессе: методические указания для пользователей курсов, размещенных в системе СДО MOODLE – Самара: Издательство «Самарская академия государственного и муниципального управления», 2010.

4. Одинокая М.А. Учебный модуль на платформе MOODLE как средство организации внеаудиторной самостоятельной работы студента // Вопросы методики преподавания в вузе. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2015. – Вып. 4 (18). – С. 199–206.

5. Электронный курс Moodle: «Физика для 19.03.03 Продукты питания животного происхождения очной формы обучения». Режим доступа:

<https://moodle.osu.ru/course/view?id=12105>

ТРАНСДУКЦИЯ МЕТОДОВ КРИСТАЛЛОХИМИИ В ФИЗИКУ МАТЕРИАЛОВ

Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Четверикова Д.К.

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

Научные знания являются блестящим достижением человечества, но их получение в физике, химии и смежных науках по-прежнему не обходится без существенных затруднений. В настоящее время складываются условия, требующие формирования у молодых исследователей, студентов современных исследовательских компетенций на междисциплинарном уровне, в частности, при решении задач современного материаловедения. Любое исследование начинается и заканчивается некоторыми теориями. Что касается эксперимента, то он не проводится случайными произвольным образом. Ему предшествует дедукция, обеспечивающая проектирование эксперимента, а сам он предваряет индукцию [1].

Родственные связи трех наук (физика, химия, материаловедение) заложены в их сущностях: в физике важнейшее значение придается концепту взаимодействия, в химии - химической реакции, в материаловедении – свойство/применение. Изучение физико-химических трансдукций при обучении студентов-химиков физике, как показывает наша практика, чрезвычайно полезно и в теоретическом, и в прагматическом смыслах [2]. Современная физика материалов занимается всесторонними исследованиями самых разнообразных неравновесных систем, в том числе природных полиминеральных веществ.

Согласно учебному плану специальности «Фундаментальная и прикладная химия» студенты при освоении образовательной программы должны овладеть общепрофессиональными (ОПК-4) и профессиональными компетенциями (ПК-1 и ПК-7) [3]. Компетенция ОПК-4 отвечает за способность планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач. ПК – 1 отвечает за способность планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках; ПК – 7 – за способность использовать аналитические методы для исследования различных объектов.

Одним из универсальных и популярных видов природного минерального сырья, используемого в различных отраслях промышленности, является каолин. Месторождение каолинов, обнаруженное в Оренбургской области в 2018 году, предположительно, самое крупное в стране. Исследования по вовлечению сырьевых материалов из перспективного местного месторождения в промышленное производство области представляются весьма актуальными [4]. Поэтому перед студентом 2-го курса была поставлена задача рассчитать структурную формулу одного из природных филлосиликатов – каолинита. Химическая формула

является постоянной минерала и отражает его кристаллохимическую природу, физические свойства и потенциальные функциональные свойства будущего материала. Характеристика глины была проведена с применением методов гранулометрического, колориметрического, химического и рентгенофлуоресцентного, рентгенофазового и сорбционного анализов [5-6].

Считается, что в наиболее чистых (идеальных) каолинитах изоморфизм отсутствует и химическая формула имеет вид



Структура идеального каолинита представлена на рисунке 1. Однако в большинстве каолинитов выявлены изоморфные замещения: установлено, в тетраэдрах встречаются атомы титана, а в состав октаэдров может входить различное количество атомов железа, магния, цинка. Поэтому усредненная химическая формула каолинита выглядит следующим образом [8]:

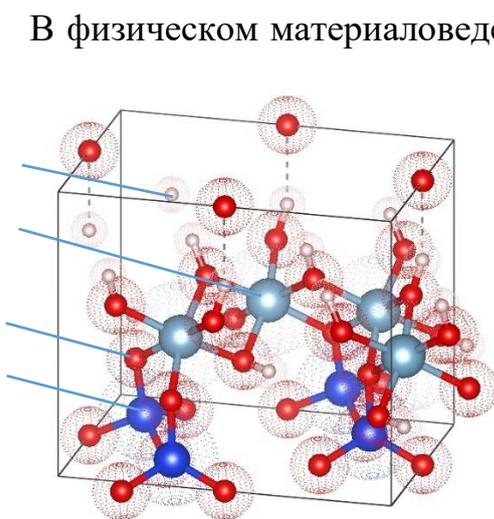


Рис. 1 – Элементарная ячейка каолинита без изоморфных замещений [7]

В физическом материаловедении природных минералов установлено, что их химический состав может меняться в широких пределах для различных проб даже одного минералогического состава. Поэтому химическая формула анализируемого образца должна быть написана так, чтобы в каждом отдельном случае можно было отразить как изменчивость и непостоянство химического состава, так и неизбежности его кристаллохимической структуры. Стоит отметить, что расчет формулы природных глинистых минералов является трудной задачей, т.к. кроме химического состава имеется лишь (как правило) полуколичественный минералогический.

Согласно [9], расчет структурных формул начинается с приведения исходного химического состава [4] глинистой мелкодисперсной фракции к 100%. В химический состав рассматриваемой каолинитовой глины входил оксид меди, который исключается из дальнейших расчетов (графа 1 в таблице 1). Катион меди входит в структуру межслоевого гидратного комплекса, а не в тетраэдрические и октаэдрические слои каолинита, поэтому в структурной формуле обычно не приводится. На следующем этапе на основании процентного содержания оксидов в химическом составе (графа 2) вычисляются их молекулярные количества (графа 4).

Таблица 1 - Расчет структурной формулы каолинита

Оксиды – химический состав	Содержание, %	Пересчет исходного состава к 100 %	Молекулярные количества	Ионные количества	Валентности	Числа ионов при суммарной валентности катионов 28
1	2	3	4	5	6	7
SiO ₂	36,02	43,906	0,732	0,732	2,927	3,84
Al ₂ O ₃	26,3	32,058	0,314	0,629	1,886	3,30
CaO	2,14	2,609	0,047	0,047	0,093	0,24
MgO	1,97	2,401	0,060	0,060	0,120	0,32
TiO ₂	1,97	2,401	0,030	0,030	0,120	0,16
Fe ₂ O ₃	1,69	2,060	0,013	0,026	0,077	0,14
ZnO	0,06	0,073	0,001	0,001	0,002	0,005
MnO	0,02	0,024	0,000	0,000	0,001	0,002
(Na ₂ O+K ₂ O)	4,45	5,424	0,035	0,139	0,278	0,73
H ₂ O ⁺	10,1	12,311	0,684	–	–	3,59

Далее необходимо учесть ионные количества катионов (графа 5), их валентность (графа 6). Полученные числа ионов из графы 7 распределяются между октаэдрическими (первые квадратные скобки, выделенные голубым цветом) и тетраэдрическими (вторые квадратные скобки, выделенные фиолетовым цветом) и межслойными положениями (красный цвет).

Согласно [8,9] число катионов Si при суммарной валентности катионов 28 (каолинит) колеблется от 3,81 до 3,96, но не более 4. В данном случае оно равно 3,84. Следовательно, часть катионов в силоксановом слое замещена атомами титана, на долю которых приходится 0,16 атома. На катион алюминия приходится только 3,3 атома (вместо 4), поэтому остальные позиции заняты атомами железа, магния и кальция. Содержание катионов цинка и марганца в этой пробе невелико (следовые количества), поэтому в структурной не указываются. В итоге, структурная формула каолинита одного из месторождений Оренбургской области принимает вид:



Сравнивая структурную формулу (3) с усредненной (2) и, тем более, с идеальной (1), можно понять, что каолинит данного месторождения сильно перегружен изоморфными замещениями и далек от совершенства.

В результате проведенной работы – трансдукции знаний и методов кристаллохимии в физическое материаловедение – завершено описание глинистого минерала, составлен «паспорт» природного сырья. Теперь, зная структуру минерала, можно прогнозировать ее трансформацию под различными воздействиями для придания функциональных свойств будущему материалу. У студента во время решения поставленных задач сформировались компетентностно-

ориентированные навыки; расширились и систематизировались знания по кристаллохимии филлосиликатов.

Список литературы

1. Канке В. А. Концептуальная трансдукция как метод социологии / А. В. Канке // Социологическая наука и социальная практика, - 2017. – т.5. - № 1. – С. 145-160.

2. Роль физико-химической трансдукции на примере реакции Белоусова Жаботинского в формировании ОПК студентов специальности «Аналитическая химия» / А. Г. Четверикова, Ф. Г. Узенбаев, Н. А. Чигринова, В. В. Абрамова // В сборнике: Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. Материалы Всероссийской научно-методической конференции. - 2016. - С. 3356-3361.

3. Приказ Министерства образования и науки РФ от 13 июля 2017 г. N 652 "Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования - специалитет по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия".

4. Каныгина О.Н. Каолиновая глина Оренбургской области как перспективное сырье для производства отечественного электротехнического фарфора / О.Н. Каныгина, М.М. Филяк, Г.Ж. Алпысбаева // В сборнике: Оренбургские горизонты: прошлое, настоящее, будущее. Сборник материалов Всероссийской научно-практической конференции, посвященной 275-летию Оренбургской губернии и 85-летию Оренбургской области. 2019. С. 317-320.

5. Каныгина О. Н. Физико-химические свойства филлосиликатов на примере каолиновой глины Оренбургской области / О. Н. Каныгина, А. Г. Четверикова, М. М. Филяк // В сборнике: Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры: материалы Всероссийской научно-методической конференции (с международным участием). Оренбург, 2021. - С. 2382-2388.

6. Microwave activation of phyllosilicate adsorption on kaolin clays / *Alpysbaeva G., Kanygina O., Chetverikova A., Chetverikova D.* // В сборнике: Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials. X Japanese-Russian Conference. Orenburg, 2021. - С. 66-69.

7. Макаров, В. Н. К вопросу о разрыве ковалентных связей элементарной ячейки каолинита в СВЧ-поле / В. Н. Макаров, М. М. Серегин, О. Н. Каныгина // Инженерный вестник Дона. – 2020. - №4. - С. 1-12.

8. Осипов В. И. Глины и их свойства. Состав, строение и формирование свойств / В. И. Осипов, В. Н. Соколов // М.: Геос, 2013. - 576 С.

9. Расчет структурной формулы глинистых минералов : методические указания к лабораторному практикуму и самостоятельной работе по дисциплине «Физико-химические основы технологии керамики и огнеупоров» / сост. Т.В. Вакалова, И.Б. Ревва. – Томск : Томский политехнический университет, 2007. – 20 с.

ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В СИСТЕМЕ «КВАНТОВАЯ ТОЧКА – ОБОЛОЧЕЧНАЯ НАНОЧАСТИЦА»

Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент,

Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Мушин Ф.Ю.

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

Проблеме трансформации энергии электронного возбуждения в структурах, содержащих плазмонные наночастицы (НЧ) и квантовые точки (КТ), уделяется достаточно много внимания в современных исследованиях. В последние годы появилось большое количество теоретических и экспериментальных работ, посвященных влиянию плазмонной НЧ на излучательные и безызлучательные переходы электрона в КТ [1-3], а также формированию гибридных плазмон-экситонных состояний [4-5].

В данной работе рассмотрено взаимодействие электронных возбуждений КТ с локализованными плазмонами сферической НЧ с диэлектрическим ядром и металлической оболочкой. Геометрия изучаемой системы представлена на рисунке 1. Все расчеты проведены для НЧ радиусом $R_2 = 5$ нм с серебряной оболочкой, для которой использованы параметры: энергия объемного плазмона $\hbar\omega_{pl} = 9,0$ эВ, высокочастотная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_\infty = 3,7$, время жизни локализованного плазмона $\tau_p = 25$ фс. Для КТ в режиме сильного конфайнмента брались характеристики CdSe: ширина запрещенной зоны $E_g = 1,7$ эВ, эффективные массы электрона и дырки $m_e = 0,13m_0$ и $m_h = 0,45m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, диэлектрическая постоянная $\epsilon_0 = 6$. В режиме слабого конфайнмента – параметры CuCl: радиус экситона Ванье-Мотта $R_{ex} = 0,7$ нм, $E_g = 3,3$ эВ, $m_e = 0,5m_0$ и $m_h = 1,6m_0$, $\epsilon_0 = 5,95$. Диэлектрическая постоянная среды, окружающей систему, $\epsilon_3 = 2$. Расстояние d между центрами НЧ и КТ составляло 15 нм.

Квантование плазмонов в сферической НЧ с диэлектрическим ядром и металлической оболочкой

В квазистатическом приближении потенциал электрического поля локализованного плазмона является решением уравнения Лапласа. Собственные частоты плазмонных колебаний в металлической оболочке сферической НЧ находятся из условий непрерывности потенциала и нормальной составляющей вектора электрической индукции на внутренней и внешней поверхностях оболочки. В случае диэлектрической функции металла $\epsilon_2(\omega) = \epsilon_\infty - \omega_p^2/\omega^2$, записанной в обобщенной модели Друде, получается следующее выражение для частот плазмонных колебаний [6]

$$\frac{\omega_{L\pm}^2}{\omega_p^2} = \frac{1}{2} \left(A_L + B_L \pm \sqrt{(A_L - B_L)^2 + \frac{4L(L+1)}{\Delta_L^2} (\epsilon_1 L + \epsilon_3(L+1))^2 (R_1 R_2)^{2L+1}} \right). \quad (1)$$

В формуле (1) введены следующие обозначения:

$$A_L = \frac{(L+1)}{\Delta_L} \left\{ (\varepsilon_\infty L + \varepsilon_3(L+1))R_2^{2L+1} - L(\varepsilon_\infty - \varepsilon_1)R_1^{2L+1} \right\},$$

$$B_L = \frac{L}{\Delta_L} \left\{ (\varepsilon_1 L + \varepsilon_\infty(L+1))R_2^{2L+1} - (\varepsilon_\infty - \varepsilon_3)(L+1)R_1^{2L+1} \right\},$$

$$\Delta_L = (\varepsilon_\infty L + \varepsilon_3(L+1))(\varepsilon_1 L + \varepsilon_\infty(L+1))R_2^{2L+1} - (\varepsilon_\infty - \varepsilon_1)(\varepsilon_\infty - \varepsilon_3)L(L+1)R_1^{2L+1},$$

где R_1 – внутренний радиус оболочки НЧ, R_2 – внешний радиус оболочки НЧ, ε_1 и ε_3 – диэлектрические постоянные ядра НЧ и среды, ее окружающей.

В пределе $R_1 \rightarrow 0$ выражения для частот $\omega_{L\pm}$ упрощаются и приобретают вид:

$$\omega_{L-}^2 = \omega_p^2 L / (\varepsilon_\infty L + \varepsilon_3(L+1)) \text{ и } \omega_{L+}^2 = \omega_p^2 / \varepsilon_\infty.$$

Частота ω_{L-} совпадает с частотой локализованных плазмонов в однородной сферической частице, частота ω_{L+} соответствует случаю $\varepsilon_2(\omega) = 0$ и в указанном пределе не имеет смысла. На рисунке 2 представлены графики зависимостей частот $\omega_{L\pm}$ от радиуса диэлектрического ядра НЧ, рассчитанные по формуле (1). Ветвь низкочастотных колебаний ω_{L-} спадает с ростом R_1 , ветвь высокочастотных колебаний ω_{L+} , наоборот, растет.

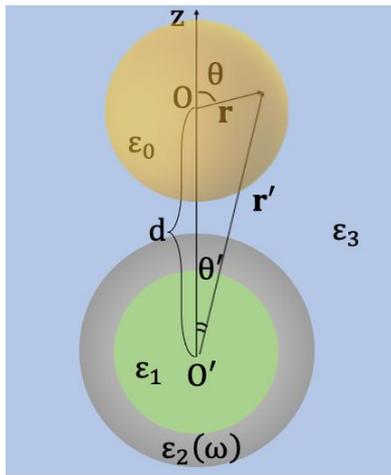


Рисунок 1 – КТ вблизи НЧ с диэлектрическим ядром и плазмонной оболочкой

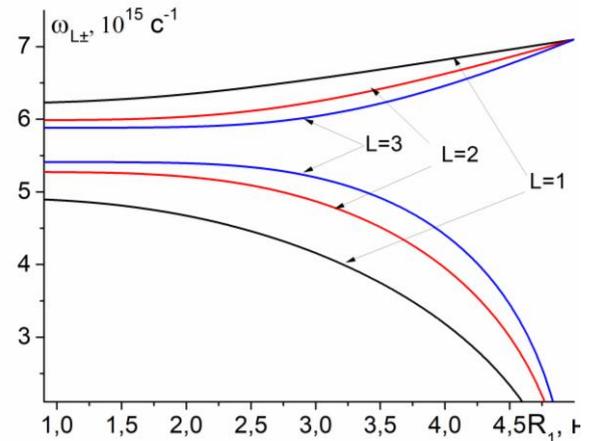


Рисунок 2 – Зависимость частот локализованных плазмонов от радиуса ядра НЧ с $\varepsilon_1 = 2$

Для квантования плазмонных колебаний в оболочечной НЧ необходимо вычислить среднюю по времени энергию электростатического поля плазмона мультипольности L

$$\bar{W}_{LMj} = \frac{1}{4\pi} \left\{ \varepsilon_1 \int_{r < R_1} \mathbf{E}_{LMj} \mathbf{E}_{LMj}^* d\mathbf{r} + \frac{d(\omega \varepsilon_2(\omega))}{d\omega} \bigg|_{\omega_{Lj}} \int_{R_1 < r < R_2} \mathbf{E}_{LMj} \mathbf{E}_{LMj}^* d\mathbf{r} + \varepsilon_3 \int_{r > R_2} \mathbf{E}_{LMj} \mathbf{E}_{LMj}^* d\mathbf{r} \right\}$$

,

где \mathbf{E}_{LMj} - независящая от времени часть напряженности электростатического поля плазмона $\mathbf{E}(r, \theta, \alpha, t) = \sum_{LMj} \left(\mathbf{E}_{LMj}(r, \theta, \alpha) e^{-i\omega_{Lj}t} + \mathbf{E}_{LMj}^*(r, \theta, \alpha) e^{i\omega_{Lj}t} \right)$ и

$j = "+", "-"$, а затем приравнять ее энергии кванта с частотой ω_{Lj} [7]. В результате вычисления средней энергии получается следующее выражение

$$\bar{W}_{LMj} = \frac{1}{8\pi} F_{Lj} (a_{LMj} a_{LMj}^* + a_{LMj}^* a_{LMj}),$$

где введено обозначение

$$F_{Lj} = \varepsilon_1 L R_1^{2L+1} + \left(\varepsilon_2(\omega_{Lj}) + 2 \frac{\omega_p^2}{\omega_{Lj}^2} \right) \left[K_{Lj}^2 L (R_2^{2L+1} - R_1^{2L+1}) + \right. \\ \left. + (N_{Lj} R_1^{2L+1})^2 (L+1) \left(\frac{1}{R_1^{2L+1}} - \frac{1}{R_2^{2L+1}} \right) \right] + \varepsilon_3 G_{Lj}^2 \frac{L+1}{R_2^{2L+1}},$$

$$K_{Lj} = \frac{\varepsilon_1 L + \varepsilon_2(\omega_{Lj})(L+1)}{\varepsilon_2(\omega_{Lj})(2L+1)}, \quad N_{Lj} = \frac{(\varepsilon_2(\omega_{Lj}) - \varepsilon_1)L}{\varepsilon_2(\omega_{Lj})(2L+1)},$$

$$G_{Lj} = K_{Lj} R_2^{2L+1} + N_{Lj} R_1^{2L+1}.$$

Приравняв среднюю энергию \bar{W}_{LMj} энергии кванта плазмонного поля мультипольности L $\hbar\omega_{Lj} (\hat{a}_{LMj} \hat{a}_{LMj}^* + \hat{a}_{LMj}^* \hat{a}_{LMj})/2$, записанной в формализме вторичного квантования, можно получить связь между коэффициентами a_{LMj} , a_{LMj}^* и соответствующими им операторами уничтожения \hat{a}_{LMj} и рождения \hat{a}_{LMj}^* локализованного плазмона

$$a_{LMj} = \sqrt{4\pi\hbar\omega_{Lj}/F_{Lj}} \hat{a}_{LMj} \quad \text{и} \quad a_{LMj}^* = \sqrt{4\pi\hbar\omega_{Lj}/F_{Lj}} \hat{a}_{LMj}^*.$$

Окончательно, выражение для оператора напряженности поля плазмона во вторичном квантовании записывается в виде:

$$\hat{\mathbf{E}}(r, \theta, \alpha, t) = - \sum_{LMj} \sqrt{\frac{4\pi\hbar\omega_{Lj}(2L+1)}{F_{Lj}}} \times \quad (2)$$

$$\times \begin{cases} \sqrt{L} r^{L-1} \left(\mathbf{Y}_{LM}^{L-1}(\theta, \alpha) \hat{A}_{LMj}(t) + \mathbf{Y}_{LM}^{L-1*}(\theta, \alpha) \hat{A}_{LMj}^+(t) \right), & r \leq R_1, \\ \left(K_{Lj} \sqrt{L} r^{L-1} \mathbf{Y}_{LM}^{L-1}(\theta, \alpha) + N_{Lj} R_1^{2L+1} \sqrt{(L+1)} \frac{\mathbf{Y}_{LM}^{L+1}(\theta, \alpha)}{r^{L+2}} \right) \hat{A}_{LMj}(t) + \text{э.с.}, & R_1 < r \leq R_2, \\ \frac{G_{Lj}}{r^{L+2}} \sqrt{L+1} \left(\mathbf{Y}_{LM}^{L+1}(\theta, \alpha) \hat{A}_{LMj}(t) + \mathbf{Y}_{LM}^{L+1*}(\theta, \alpha) \hat{A}_{LMj}^+(t) \right), & r > R_2. \end{cases}$$

В формуле (2) $\mathbf{Y}_{LM}^{L\pm 1}(\theta, \alpha)$ – шаровые векторы, «+ э.с.» означает добавление эрмитово сопряженного выражения, $\hat{A}_{LMj}(t) = \hat{a}_{LMj} e^{-i\omega_{Lj}t}$, $\hat{A}_{LMj}^+(t) = \hat{a}_{LMj}^+ e^{i\omega_{Lj}t}$

В пределе $R_1 \rightarrow 0$ выражения (2) дают операторы напряженности поля внутри и вне однородной металлической частицы [8].

Плазмон-экситонное взаимодействие в системе «наночастица – квантовая точка»

Оператор взаимодействия электрона квантовой точки с электрическим полем поверхностного плазмона записывается в виде

$$\hat{V} = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}'), \quad (3)$$

где e – заряд электрона, \mathbf{r} – радиус-вектор, определяющий положение электрона в КТ, $\mathbf{E}(\mathbf{r}')$ – напряженность поля плазмона НЧ в месте расположения электрона. Как видно из рисунка 1, координаты электрона КТ в системе с началом координат в центре НЧ связаны с координатами электрона в системе с началом в центре КТ простыми соотношениями

$$r' = \sqrt{r^2 + d^2 + 2rd \cos \theta}, \quad \sin \theta' = r \sin \theta / \sqrt{r^2 + d^2 + 2rd \cos \theta}, \quad \alpha' = \alpha.$$

Взаимодействие (3) приводит к меж- и внутризонным переходам электрона КТ, сопровождающимся рождением локализованного плазмона НЧ. Поскольку частоты внутризонных переходов сильно отличаются от частот плазмонных мод (1), вероятность таких переходов будет мала по сравнению с вероятностью переходов вследствие электрон-фононного взаимодействия. В результате этого высоко возбужденные энергетические состояния КТ быстро релаксируют до первого возбужденного $1s$ – состояния [9]. При определенных радиусах R_1 ядра НЧ энергия межзонного перехода электрона КТ совпадает с энергией $\hbar\omega_{L-}$ локализованного плазмона низкочастотной ветви, и вероятность безызлучательного переноса энергии от КТ к НЧ будет превосходить скорость излучательной рекомбинации электрона и дырки. В дальнейшем все вычисления будут проводиться для низкочастотных локализованных плазмонов, и в формулах (1) – (2) индекс j будет опускаться. Для перехода системы «КТ+НЧ» из начального состояния $|i\rangle = \Psi^c(\mathbf{r})|0_{LM}\rangle$, в котором электрон находится в зоне проводимости (с), и нет плазмона, в конечное состояние $|f\rangle = \Psi^v(\mathbf{r})|1_{LM}\rangle$, в котором электрон находится в валентной зоне (v), и рождается локализованный плазмон с квантовыми числами L и M , матричный элемент взаимодействия (3) можно представить следующим образом

$$V_{fi}^{vc}(LM) = -\beta \int_{V_{QD}} \Psi_{1s}^v(\mathbf{r}) e\mathbf{r}_{vc} \cdot \mathbf{E}_{LM}^*(\mathbf{r}') \Psi_{1s}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (4)$$

где $e\mathbf{r}_{vc}$ – дипольный матричный элемент перехода электрона из зоны проводимости в валентную зону (в расчетах использовалось значение $r_{vc} = 0,6$ нм), $\mathbf{E}_{LM}^*(\mathbf{r}')$ – компонента напряженности низкочастотного плазмонного поля (2) в области $r' > R_2$, соответствующая квантовым числам L и M , β – множитель, учитывающий отличие диэлектрической проницаемости КТ от проницаемости

окружающей среды. В качестве огибающей функции $\psi_{1s}^{c(v)}$ была выбрана волновая функция электрона в центрально-симметричной прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками [9].

В режиме слабого конфайнмента в КТ возможно образование экситонов Ванье-Мотта. В этом случае рождение локализованного плазмона может происходить при переходе КТ из экситонного состояния в основное, и матричный элемент оператора (3) в этом случае записывается в виде

$$V_{fi}^{ex}(LM) = -\beta \Phi_{1s}(0) \int_{V_{QD}} \psi_{1s}(\mathbf{r}) e_{\mathbf{r}_{vc}} \cdot \mathbf{E}_{LM}^*(\mathbf{r}') d\mathbf{r}, \quad (5)$$

где $\Phi_{1s}(0) = 1/\sqrt{\pi R_{ex}^3}$ – водородоподобная функция, вычисленная в начале координат и описывающая относительное движение электрона и дырки, R_{ex} – радиус экситона, $\psi_{1s}(\mathbf{r})$ – огибающая функция, описывающая движение экситона, как целого.

Интегралы в (4) и (5) вычисляются аналитически, причем результат интегрирования оказывается таким же, как в случае нахождения КТ в однородном поле, величина которого задается формулой (2) при $r' > R_2$ в центре КТ. В силу этого коэффициент, учитывающий изменение однородного внешнего поля внутри КТ, может быть взят в виде $\beta = 3\epsilon_3/(\epsilon_0 + 2\epsilon_3)$. Отметим, что это справедливо лишь для огибающих функций s -состояния.

Если энергия локализованного плазмона близка к энергии электронного перехода КТ, то возможно смешивание экситонного и плазмонного состояний, и волновая функция такого гибридного состояния имеет вид

$$\Psi = C_{LM} \psi_1 |0_{LM}\rangle + D_{LM} \psi_0 |1_{LM}\rangle,$$

где ψ_0 и ψ_1 – волновые функции основного и первого возбужденного состояния КТ, C_{LM} и D_{LM} – коэффициенты, определяющие вклад экситона и плазмона в гибридное состояние.

Решение задачи на собственные значения оператора Гамильтона в этом случае приводит к известному выражению для энергии гибридного состояния [6]

$$E_{LM}^{\pm} = \frac{1}{2} \left(E_{vc(ex)} + \hbar\omega_L \pm \sqrt{(E_{vc(ex)} - \hbar\omega_L)^2 + 4|V_{fi}^{vc(ex)}(LM)|^2} \right). \quad (6)$$

В формуле (6) $E_{vc(ex)}$ – энергия первого возбужденного состояния КТ в режиме сильного (vc) и слабого (ex) конфайнмента. На рисунке 3 представлены графики зависимостей от радиуса ядра НЧ следующих величин: энергии локализованного плазмона $\hbar\omega_L$, энергии экситонного перехода E_{ex} и энергий E_{LM}^{\pm} гибридных состояний при $L = 1$ и $M = 0$.

Коэффициенты C_{LM} и D_{LM} определяются по следующим формулам [6]

$$C_{LM}^{\pm} = \frac{V_{fi}^{vc(ex)}(LM)}{E_{LM}^{\pm} - E_{vc(ex)}} D_{LM}^{\pm}, \quad D_{LM}^{\pm} = \frac{E_{LM}^{\pm} - E_{vc(ex)}}{\sqrt{(E_{LM}^{\pm} - E_{vc(ex)})^2 + |V_{fi}^{vc(ex)}(LM)|^2}}.$$

Величина $g = 2|V_{fi}^{vc(ex)}(LM)|$, вычисленная при радиусе ядра НЧ $R_1 = R$, удовлетворяющем равенству $\hbar\omega_L(R) = E_{vc(ex)}$, есть расщепление Раби. Если величина расщепления Раби $g \sim 10$ мэВ, то плазмон-экситонное взаимодействие считается слабым (эффект Парсела), при $g \sim 100$ мэВ выделяют случай промежуточного взаимодействия, случай $g > 200$ мэВ относят к сильному плазмон-экситонному взаимодействию [7]. На рисунке 4 изображены зависимости расщепления Раби от радиуса R_0 КТ при разных значениях ϵ_1 . Как видно из рисунка, зависимость расщепления Раби от диэлектрической постоянной ядра частицы незначительная. А также при выбранных параметрах модели плазмон-экситонное взаимодействие можно считать слабым в обоих случаях: сильного и слабого конфайнмента.

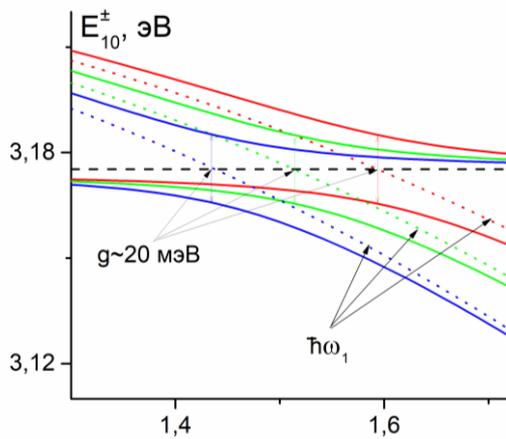


Рисунок 3 – Зависимость энергий гибридных состояний от радиуса ядра НЧ при $\epsilon_1 = 1,5; 2; 2,5$ (красные, зеленые и синие кривые, соответственно); радиус КТ $R_0 = 2$ нм

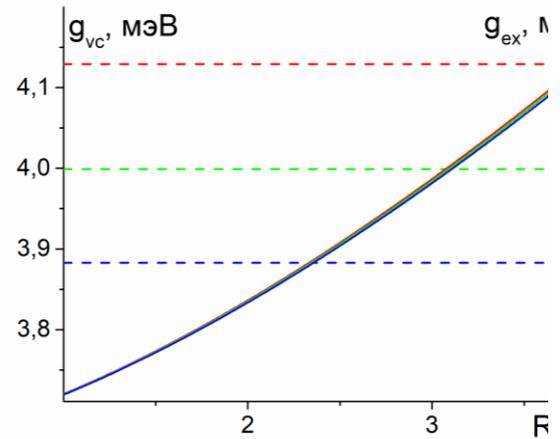


Рисунок 4 – Зависимость расщепления Раби от радиуса КТ в режиме слабого (сплошные кривые) и сильного (штриховые кривые) конфайнмента. Обозначение цветом такое же, как на рисунке 3

Влияние локализованных плазмонов на излучательные и безызлучательные процессы в КТ

В случае слабого плазмон-экситонного взаимодействия скорости излучательных и безызлучательных процессов в системе «КТ+НЧ» можно рассчитывать по золотому правилу Ферми. Так, скорость безызлучательного переноса энергии от возбужденной КТ к НЧ дается выражением

$$U_{vc(ex)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{LM} |V_{fi}^{vc(ex)}(LM)|^2 \delta(\hbar\omega_L - E_{vc(ex)}), \quad (7)$$

где $\delta(\hbar\omega_L - E_{vc(ex)})$ – дельта-функция, которая выражает закон сохранения энергии и в расчетах заменяется лоренцианом. На рисунке 5 представлены зависимости скоростей $U_{vc(ex)}$ от радиуса ядра НЧ.

Для определения скорости излучательного перехода в системе «КТ+НЧ» необходимо вычислить матричный элемент оператора дипольного момента этой системы между состояниями с волновой функцией

$|i\rangle = C_{1M}\psi_1|0_{1M}\rangle + D_{1M}\psi_0|1_{1M}\rangle$ и функцией невозбужденного состояния $|f\rangle = \psi_0|0_{LM}\rangle$. Т. к. оператор дипольного момента системы складывается из операторов дипольных моментов НЧ и КТ $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{p}}^{NP} + \hat{\mathbf{p}}^{OD}$, то для матричного элемента справедливо выражение $\mathbf{p}_{fi} = C_{1M}\mathbf{p}_{fi}^{OD} + D_{1M}\mathbf{p}_{fi}^{NP}$.

Для КТ в режиме сильного конфайнмента матричный элемент дипольного момента межзонного перехода электрона определяется формулой $\mathbf{p}_{fi}^{OD} = 3\varepsilon_3\mathbf{e}_{\mathbf{r}_{vc}}/(\varepsilon_0 + 2\varepsilon_3)$. Для КТ в режиме слабого конфайнмента матричный элемент дипольного момента экситонного перехода равен $\mathbf{p}_{fi}^{OD} = 6\varepsilon_3\mathbf{e}_{\mathbf{r}_{vc}}\sqrt{2R_0^3/\pi^2R_{ex}^3}/(\varepsilon_0 + 2\varepsilon_3)$ [10].

Вне НЧ потенциал электрического поля плазмона при $L = 1$ совпадает с потенциалом поля диполя, оператор дипольного момента которого в формализме вторичного квантования имеет вид

$$\hat{\mathbf{p}}_{NP}(t) = \varepsilon_3 \sqrt{\frac{3\hbar\omega_1}{F_1}} G_1 \sum_M (\hat{A}_{1M}(t)\mathbf{e}_M + \hat{A}_{1M}^+(t)\mathbf{e}^M),$$

где \mathbf{e}_M и \mathbf{e}^M - ковариантный и контравариантный циклические орты. Тогда матричный элемент дипольного момента перехода НЧ из состояния с одним локализованным плазмоном в состояние без плазмонов имеет вид $\mathbf{p}_{fi}^{NP} = \varepsilon_3\sqrt{3\hbar\omega_1/F_1}G_1\mathbf{e}_M$.

Из рисунка 3 видно, что при радиусе ядра частицы $R_1 < R$ энергия E_{1M}^- гибридного состояния близка к энергии электронного перехода в КТ, а при $R_1 > R$ к ней близка энергия E_{1M}^+ второго гибридного состояния. Поэтому при вычислении матричного элемента \mathbf{p}_{fi} дипольного момента системы в области $R_1 < R$ необходимо использовать коэффициенты C_{1M}^- и D_{1M}^- , тогда как в области $R_1 > R$ – коэффициенты C_{1M}^+ и D_{1M}^+ . Тем самым будет учтено изменение переходного дипольного момента КТ в присутствии НЧ. Кроме того, следуя работе [6], при расчете переходного дипольного момента системы необходимо ввести мнимую часть в частоту плазмона $\omega_L \rightarrow \omega_L - i/\tau_p$, чтобы учесть диссипацию энергии в металле.

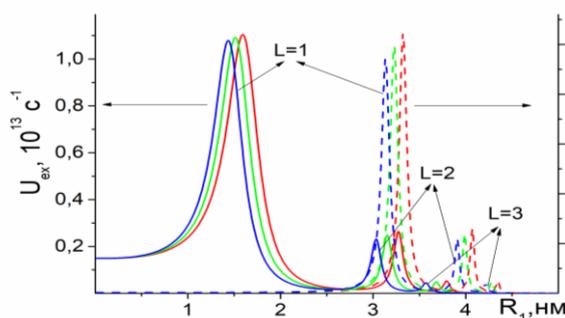


Рисунок 5 – Скорость переноса энергии от возбужденной КТ к НЧ

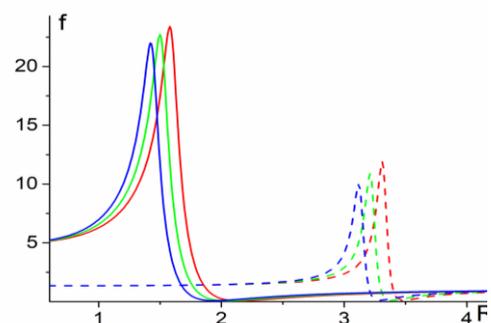


Рисунок 6 – Зависимость фактора f от радиуса ядра НЧ

Сплошные кривые – КТ с радиусом $R_0 = 2$ нм в режиме слабого, штриховые – сильного конфайнмента. Обозначение цветом такое же, как на рисунке 3

Знание \mathbf{p}_{fi} позволяет определить скорости оптических переходов в системе «КТ+ НЧ». Однако, чтобы продемонстрировать влияние НЧ на скорость спонтанного излучения КТ, достаточно рассмотреть фактор $f = |\mathbf{p}_{fi}|^2 / |\mathbf{p}_{fi}^{QD}|^2$. На рисунке 6 изображены зависимости фактора f от радиуса ядра НЧ для КТ в режиме слабого и сильного конфайнмента.

Таким образом, варьируя геометрические и электродинамические характеристики системы, можно обеспечивать режимы сильного и слабого плазмон-экситонного взаимодействия, что в свою очередь может оказаться полезным в различных прикладных задачах.

Список литературы

1. Govorov, A.O. Theory of plasmon-enhanced Förster energy transfer in optically excited semiconductor and metal nanoparticles / A.O. Govorov, J. Lee, N.A. Kotov // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 125308.
2. Vlasko-Vlasov, C.V. Spontaneous emission spectra and quantum light-matter interactions from a strongly coupled quantum dot metal-nanoparticle system / C.V. Vlasko-Vlasov, P.T. Kristensen, S. Hughes // *Phys. Rev. B.* – 2012. – V. 85. – P. 075303.
3. Kucherenko, M.G. Luminescence of a two-particle complex from a spherical quantum dot and plasmon nanoglobule in an external magnetic field / M.G. Kucherenko, V.M. Nalbandyan // *Optics and Spectroscopy.* – 2020. – Vol. 128. – Iss. 11. – P. 1910-1917.
4. Agostino, S.D. Strong coupling between a dipole emitter and localized plasmons: enhancement by sharp silver tips / S.D. Agostino, F. Alpeggiani, L.C. Andreani // *Opt. Express.* – 2013. – V. 21. – P. 27602.
5. Pelton, M. Strong coupling of emitters to single plasmonic nanoparticles: Exciton-induced transparency and Rabi splitting / M. Pelton, S.D. Storm, H. Leng // *Nanoscale.* – 2019. – V. 11. – P. 14540-14552.
6. Goliney, I.Yu. Effect of metal nanoparticles on energy spectra and optical properties of peripheral light-harvesting LH2 complexes from photosynthetic bacteria / I.Yu. Goliney, V.I. Sugakov, L. Valkunas, G.V. Vertsimakha // *Chem. Phys.* – 2012. – V. 404. – P. 116–122.
7. Андрианов, Е.С. Квантовая наноплазмоника: Учебное пособие / Е.С. Андрианов, А.П. Виноградов, А.В. Дорофеев, А.А. Зябловский, А.А. Лисянский, А.А. Пухов. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», – 2015. – 368 с.
8. Кучеренко, М.Г. Процессы с участием электронно-возбужденных молекул на поверхностях твердых адсорбентов: монография / М.Г. Кучеренко, Т.М. Чмерева. – Оренбург: ОГУ, – 2010. – 342 с.
9. Федоров, А.В. Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек / А.В. Федоров, И.Д. Рухленко, А.В. Баранов, С.Ю. Кручинин. – СПб: Наука, – 2011. – 188 с.

10. Агранович, В.М. Резонансный перенос энергии от полупроводниковой квантовой точки к органической матрице / В.М. Агранович, Д.М. Баско // Письма в ЖЭТФ. 1999. – Т.69. - вып.3. – С. 232-235.

КАЧЕСТВЕННЫЕ ЗАДАЧИ ПО ФИЗИКЕ КАК СПОСОБ БОРЬБЫ С "КЛИПОВЫМ МЫШЛЕНИЕМ" УЧАЩИХСЯ

Якупов Г. С.

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

В современном мире любая сфера человеческой деятельности тесно связана с информационно-коммуникационными технологиями. С одной стороны, эти технологии были созданы в своё время с целью облегчить деятельность человека, для того, чтобы у него оставалось больше свободного времени для саморазвития, но процесс проникновения высоких технологий в жизнь человека имеет и отрицательные последствия: большинство учащихся школ стали обладателями так называемого "клипового мышления" [1], причём со временем возраст мыслящих подобным образом учащихся снижается.

Переходы по всевозможным ссылкам в сети интернет, бессвязная череда рекламных роликов и сюжетов новостей, зачастую совершенно ненужных пользователю, превращают сознание человека обрывистым и фрагментарным. Подобная тенденция проникли в кинематограф и литературу, снимаются фильмы построенные по принципу клипа, пишутся произведения выдержанные в стиле общения в чате.

В 90-х годах прошлого столетия появился термин "клиповое мышление", который первоначально означал восприятие мира человеком посредством коротких ярких образов. Собственно слово "clip" в переводе с английского языка обозначает фрагмент, вырезку из текста или отрывок из видеоряда или фильма. В целом отдельные фрагменты видеоклипа либо слабо связаны между собой, либо не связаны вообще никак. При таком образе мышления жизнь воспринимается как видеоклип, как последовательность не связанных между собой событий.

Современная киноиндустрия создает продукцию для клипового мыслящего потребителя. Логическая связь между отдельными сценами очень слабая или отсутствует вообще. Публикации в прессе представлены короткими блоками информации, часто сменяющимися друг друга, где авторы просто обрисовывают лишь контуры рассматриваемых вопросов. Телевизионные каналы новостей также предлагают большое количество несвязанных между собой информационных блоков, между которыми вставлены рекламные ролики, также по тематике не относящиеся никак друг к другу. В итоге человек не осмыслив один информационный блок, сразу же переходит к другому.

Для человека обладающего клиповым мышлением, окружающий мир превращается в чехарду разрозненных фактов и обрывков информации. Постепенно такой человек привыкает к такому образу мыслить и не представляет себе иного стиля мышления. Кроме того, у потребителя информации возникает неосознанное желание находить броские заголовки, "вирусные" видеоролики, общаться в чатах и социальных сетях. Тем не менее "клиповое мышление" – это вынужденное явление в эпоху информационных технологий. Человек с клиповым

мышлением не может долго концентрироваться на той или иной информации, способность к анализу у него заметно снижена, усвоение новых знаний вызывает затруднения.

Возникает закономерный вопрос: как уйти от такого стиля мышления или как препятствовать его формированию? Детям среднего школьного возраста свойственно конкретно-образное мышление. Этой возрастной группе доступны понятия, базирующиеся на конкретных предметах, нежели понятия, связанные с чем-либо абстрактным. Что касается школьного курса физики, который начинается в 7 классе, то учащимся более понятным является индуктивный путь установления физического закона, а не дедуктивный. Именно поэтому качественные задачи по физике, тематика которых связана с хорошо известными им примерами, воспринимаются учащимися очень позитивно, в отличие от количественных задач. Следовательно, на первых этапах обучения физике, качественные задачи имеют большее значение, нежели количественные. Решая такие задачи учащиеся развивают мышление, речевую культуру, учатся выстраивать логические связи.

Качественной задачей является задача, решение которой требует построения цепочки логических рассуждений и при этом часто не требует математических вычислений. Прочный фундамент познавательный интерес будет иметь только тогда, когда всем участникам образовательного процесса понятна связь между учебным материалом и его применением в повседневной жизни. Учащиеся хотят понять (причём зачастую искренне) с какой целью изучаются те или иные явления природы, какова их связь с человеком и какое значение они имеют для него. Знания, полученные в школьном курсе физики, нужно уметь связывать с успехами научно-технического прогресса, поскольку использование этих знаний позволяет сделать жизнь человечества более комфортной.

Для того чтобы решать качественные задачи, учащийся должен правильно понимать сущность процессов и явлений, их взаимосвязь, должен уметь основываясь на законах физики предсказывать ход этих явлений, говоря иными словами, должен уметь мыслить физически.

Следовательно, решение качественных задач позволяет учителю понять, насколько глубокие теоретические знания учащихся и насколько хорошо они понимают изучаемый материал. Качественные задачи могут иметь очень разнообразное содержания, от технического до исторического или спортивного [2]. Такие задания не только расширяют кругозор учащихся, демонстрируя непосредственную связь физики с различными сферами деятельности человека, но и являются средством подготовки их к практической деятельности. Несомненно, решение качественных задач – один из важнейших приёмов разностороннего обучения учащихся.

Многие сборники задач по физике представляют её либо как науку абстрактную, оторванную от реальной жизни, либо, наоборот, как чисто техническую, совершенно не связанную с живой природой, а также другими естественными науками, такими как биология, химия, география и др. Именно по этой причине физика не интересна для учеников: интерес проявляется только тогда,

когда задача рассматривает реальные жизненные ситуации, знакомые каждому человеку.

Решая качественные задачи у школьника развивается навык наблюдательности, он начинает видеть явления физики в природе, в быту, в технике, а не только в кабинете физики, происходит развитие фантазии, раскрывается творческий потенциал личности учащегося. Такие задачи вызывают большой интерес у учащихся, учат концентрации внимания, также позволяют учителю разнообразить урок, не давать учащимся отвлекаться на темы, не связанные с изучаемым материалом.

Значение качественных задач в курсе физике было велико и раньше, а в последнее время их можно использовать еще и для профилактики развития у учащихся клипового мышления. Эти задачи способствуют более качественному усвоению изучаемого материала учащимися, приближают изучаемую теорию к реальной жизни, усиливая тем самым интерес к предмету, развивают наблюдательность.

Метод решения этих задач, заключающийся в построении логических умозаключений, основанных на физических законах, служит прекрасной школой мышления, вырабатывает четкое понимание сущности физических явлений и их закономерностей, учит учащихся применять знания на практике. Эти задачи прививают любознательность, желание узнать, почему так происходит, умение ставить проблему и, что не менее важно, решать её [2]. Задача учителя физики состоит в том, чтобы пробудить у учащихся интерес к получению нового знания и желание познавать окружающий его мир.

Список литературы

1. Якупов, Г. С. Профилактика развития клипового мышления у учащихся школ и студентов вузов [Электронный ресурс] / Г. С. Якупов // Оренбургские горизонты: прошлое, настоящее, будущее : сб. материалов Всерос. науч.-практ. конф., посвящ. 275-летию Оренбург. губернии и 85-летию Оренбург. обл., 21-22 нояб. 2019 г., Оренбург / Правительство Оренбург. обл., М-во образования Оренбург. обл., Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т"; гл. ред. А. С. Боровский. - Электрон. дан. - Оренбург : Фронтир, 2019. - . - С. 278-281. . - 4 с.

2. Якупов, Г. С. Сборник задач по физике со спортивным, биофизическим и техническим содержанием [Электронный ресурс] / Якупов Г. С. // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры : материалы Всерос. науч.-метод. конф. (с междунар. участием), 4-6 февр. 2015 г., Оренбург / М-во образования и науки Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. профессор образования "Оренбургский. гос. ун-т". - Электрон. дан.- Оренбург, 2015. - . - С. 1138-1140.

ПОНЯТИЕ МИКРООБЪЕКТА В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ

Якупов Г. С.

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

С понятием микрообъекта в школьном курсе физике знакомятся практически в самом начале его изучения. В дальнейшем этот термин используется в учебниках физики довольно часто и учащиеся зачастую представляют микрообъект, в частности электрон, просто как маленькую отрицательно заряженную частицу. На вопрос, чем микрообъект отличается от объектов, с которыми имеет дело классическая физика (макрообъекты), школьники часто отвечают, что отличие микрообъект от макрообъекта сводится к разнице в размерах и не более. Вопрос о том, что такое микрообъект в школьном курсе физики практически не затрагивается, хотя вопрос этот имеет большое значение.

В старших классах учащиеся знакомятся с представлением о корпускулярно-волновом дуализме, лежащим в основе квантовой механики. Тогда же уточняется, что электрон, как и любой другой микрообъект, нельзя рассматривать как классическую частицу, даже очень маленькую. Если бы он вращался вокруг ядра как классическая частица, то рано или поздно упал бы на него. Эти моменты учащимся более или менее понятны.

Труднее обстоит дело с образом волны. Зачастую здесь учащиеся представляют эти волны как некое подобие уже хорошо известных им из курса физики волн: механических или электромагнитных. В отдельных случаях представляют её как симбиоз частицы и волны. Можно упомянуть, что в своё время такие попытки смоделировать наглядное представление частицы и волны предпринимались. Большинство из таких попыток могут показаться вполне удачными благодаря своей наглядности. Однако, в действительности все они оказываются несостоятельными и учащимся нужно дать понять, что любая попытка буквального понимания корпускулярно-волнового дуализма является неверной.

Понимание корпускулярно-волнового дуализма заключается в способности микрообъекта проявлять свои различные свойства в зависимости от ситуации. В одних условиях у микрообъектов проявляются волновые свойства, в других – свойства частиц. Любое другое буквальное понимание этого дуализма в виде какой-нибудь наглядной модели будет неверным. Такова специфика микрообъекта и этим он принципиально отличается от тех объектов, с которыми учащиеся имеют дело в повседневной жизни.

Учащиеся должны понимать, что дуализм не исчерпывает все специфические особенности поведения микрообъекта. У микрообъекта есть еще спин, который чем-то напоминает собственный момент импульса. Но это "вращение", если его так можно назвать, очень необычно, оно является неотъемлемым свойством микрообъекта, его нельзя остановить или ускорить, кроме того, не имеет никакого смысла говорить о его угловой скорости. В разговоре о поведении микрообъекта со школьниками можно продвинуться еще дальше: все микрообъекты

можно разделить на две группы. Микрообъекты одной группы, например электроны, могут находиться в одном состоянии только одному и никакой другой микрообъект этого же типа не может попасть в это состояние. Далее можно объяснить учащимся, что это свойство электронов носит название принципа запрета Паули, хотя этот запрет справедлив не только для электронов, но и любых других микрообъектов с полуполным спином. Все эти микрообъекты объединяются в одну группу и носят название "фермионы".

Существует и другая группа микрообъектов, которые наоборот, могут находиться в одном и том же состоянии в любом количестве, при этом чем больше заселено данное состояние, тем больше вероятность обнаружить там микрообъект этой группы. К этой группе относятся все микрообъекты с нулевым спином или с целочисленным спином. Такие микрообъекты носят название "бозоны".

Описанное свойство микрообъектов исключительно важно не только для курса школьного физики, поскольку именно благодаря тому, что фермионы могут находиться в одном состоянии поодиночке, существует многообразие химических элементов, поскольку если допустить, что принцип Паули для электронов бы не выполнялся, то они бы все оказались на самом нижнем энергетическом уровне. Именно благодаря бозонам возможно реализовать индуцированное испускание излучения. Никакая наглядная модель не способна отобразить это свойство микрообъектов, но важно даже не это, а то, что у микрообъекта есть ещё одно интересное свойство. Поскольку в школьном курсе физике все такие большее внимание уделяется классическим представлениям, учащиеся в основной своей массе убеждены, что любой объект можно разделить на более мелкие части, а любой процесс можно также разбить на последовательность более коротких процессов [1].

Квантовая механика показала несостоятельность такого подхода по отношению к микрообъектам. Микрообъекты и явления в которых они участвуют, невозможно детализировать в пространстве и во времени. Поэтому необходимо признать, что микрообъект очень сложное физическое понятие, объект, который в зависимости от внешних условий проявляет разные стороны своей сущности. Все эти особенности поведения микрообъекта невозможно уместить в рамках какой-либо наглядной модели. Тем не менее чтобы у учащихся не возникала мысль о том, что микрообъект это нечто субъективное, в зависимости как на него "посмотреть", необходимо подчеркнуть, что он имеет ряд вполне определенных характеристик, таких как масса, электрический заряд, спин, хотя наглядной модели при этом не имеет. При этом учащиеся должны понимать, что квантовая механика отвергая всевозможные наглядные модели, тем не менее, не утрачивает свою материальную основу. Наглядной модели микрообъекта не существует, но это не является препятствием для того, чтобы использовать в квантовой механике модельные представления, разумеется, условные. Каждое такое модельное представление отражает какую-либо сторону сущности микрообъекта. Например, образ электронного облака электрона в атоме, или переходы электрона

между энергетическими уровнями, где он считается частицей, которая совершает перемещение по энергетической шкале.

Кроме указанного выше, квантовая физика применяет как условные модели так и математические абстракции причем и тот и другой подходы являются равноправными. В этом квантовая механика сильно отличается от классической физики: в ней математике отводилась куда более скромная роль, поскольку в классической физике большее значение придавалось наглядным представлениям. Учащимся нужно понимать, что все трудности с пониманием сущности микрообъекта связаны с тем, что на уровне явлений микромира нам не хватает понятий и образов для создания наглядных представлений, поскольку для наблюдения микрообъектов используются макроскопическими приборами, пытаясь применять понятия и образы, известные, которые в микромире применять нельзя [2].

Проблема интерпретации микрообъекта в школьном курсе физики не освещена достаточно широко. Обсуждая различные ситуации и процессы, участниками которых являются микрообъекты, важно сформировать понимание о том, что же представляют собой участники этих явлений. Без понимания необычных свойств и особенностей поведения микрообъектов, а также того, что все попытки применять к ним привычные представления не имеют смысла, невозможно формирование правильной научной картины мира [2].

Все наглядные модели микрообъекта когда-либо предложенные и существовавшие не что иное как попытка поместить квантово-механические идеи и рамки классической физики.

Список литературы

1. Иванов М. Г. Как понимать квантовую механику. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2012. — 516 с.
2. Компанеец А.С. Что такое квантовая механика. – М.: Наука, 1977.

ПРИНЦИП СООТВЕТСТВИЯ В ШКОЛЬНОМ КУРСЕ ФИЗИКИ

Якупов Г. С.

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

Развитие современного общества и предполагаемый переход к новым стандартам обучения в школе направлены прежде всего на достижение высокого уровня развития личности. Современные подходы к модернизации среднего образования направлены на развитие творческих способностей человека, самостоятельности в принятии сложных решений. В связи с этим особенно остро ставится проблема воспитания научного мышления. Современная методика преподавания физики в школе в качестве одного из наиболее важных своих целей ставит формирование у школьников формирование научного мировоззрения и научного стиля мышления.

Роль человека в природе и в обществе, установление его взаимосвязей с ними, формирование навыков восприятия и обработки информации тесно связаны с естественнонаучной картиной мира.

Определение же места и роли человека в природе, установление его взаимосвязей с ней, выработка у него навыков восприятия и использования информации, повышение общей информационной компетентности связаны прежде всего с формированием общенаучной и физической картин мира.

В 1900 г. М. Планк предлагает формулу для плотности энергии теплового излучения, переходящую в формулу Рэлея – Джинса, при условии, что $h\nu \ll kT$. Это по мнению Планка могло означать, что классическую теорию можно считать теорией, в которой постоянной h можно пренебречь. Именно тогда и был поставлен вопрос о том, как должны быть связаны между собой новая теория (в дальнейшем получившая название квантовая) и классическая.

Н. Бор пришёл к выводу, что процесс излучения не может быть описан с помощью классической электродинамики. Тем не менее классическая электродинамика позволяет достаточно хорошо описывать излучение в области малых частот. Далее им будет введён термин – "принцип соответствия". В одной из формулировок этот принцип звучит так: чтобы какая-нибудь новая научная теория могла считаться правильной, она должна в качестве частного случая содержать старую теорию. Многократно проверенные экспериментально старые теории при появлении новых не отбрасывают, как несостоятельные, они сохраняют своё значение для науки как предельное приближение новых теорий. В противном случае наука перестанет быть целостной, следовательно, в методологии науки такой принцип просто необходим [1].

В связи с этим учащимся можно напомнить о том что специальная и общая теория относительности также содержат в качестве предельного случая классическую механику, то есть принцип соответствия является универсальным для физики в целом. Возникновение новой теории, релятивистской механики, совершенно не означает, что классическая механика теряет свою ценность. Так,

движение макроскопических тел со скоростями $v \ll c$ всегда будет описываться классической механикой, поскольку в этой области скоростей релятивистская механика дает совершенно незначительные поправки, учёт которых просто не имеет смысла. Принцип Галилея – предельный случай специальной теории относительности при скоростях, много меньших скорости света. Волновую оптику также можно рассматривать как частный случай квантовой оптики. Побочных примеров для учащихся можно привести очень много.

Появившись на начальном этапе формирования квантовой физики принцип соответствия имел исключительно важное значение в её развитии и становлении как науки. С одной стороны, квантовая механика содержит классическую механику как частный случай, а с другой она нуждается в ней для самого своего обоснования. С точки зрения этого принципа можно рассматривать весь путь развития физики и всего естествознания.

В. Гейзенберг при создании своего варианта квантовой механики опирался на принцип соответствия, точно также поступал Э. Шредингер когда пытался получить уравнение, описывающее поведение микрообъектов: они пытались найти обобщение классической механики с новой физикой, которая создавалась в то время.

Одной из основных проблем с которой сталкивается в процессе своей работы любой исследователь – это проблема истины. После появления механики Ньютона стало принято описывать всё многообразие явлений природы с механистической точки зрения, позже абсолютно верной стала считаться электромагнитная картина мира. В итоге к концу XIX века в науке утвердилась мысль, что наступил предел в области физических исследований, когда дальнейшего заметного движения вперёд уже не предвидится, но ряд открытий, сделанных на рубеже XIX–XX веков привел к серьезному пересмотру существовавших на то время физических представлений и к зарождению нового раздела физики [2].

У учащихся может возникнуть ошибочное мнение о том, что периодически в науке одни теории заменяются другими, более правильными, нежели прежние. Важно чтобы они понимали что, развитие науки представляет собой не просто смену одних теорий другими – это процесс взаимного и последовательного обогащения, когда новое не просто отрицает старое, а оставляет в нём всё то полезное, что было накоплено ранее. Какими бы необычными не казались новые представления, всё равно, в совокупности со старыми теориями они образуют единое целое.

С учётом сказанного ранее можно сделать некоторые выводы по поводу преподавания физики в современной школе. Школьный курс должен ориентироваться в первую очередь на современные физические теории, этот курс не должен сводиться к простому накоплению фактов или представлять старый курс, дополненный новыми сведениями. Этот курс должен строиться на основе принципа соответствия – когда современные знания являются обобщением прежних знаний, а новое как дальнейшее углубление старого.

Современная физика вводится в школьную программу как некую сложную науку, окутанную тайной и от этого не понятную для большинства. Зачастую

изучение некоторых важных аспектов современной физики в школьной программе сводится к дополнительным параграфам в учебниках, отмеченных словами "для ознакомления" или "для самостоятельного изучения". Такой подход к изучению физики вряд ли можно назвать удачным.

В связи с отмеченными выше аспектами развития методики обучения физики в современной школе должен повышаться приоритет использования в школьном курсе фундаментальных физических принципов, в частности, принципа соответствия, имеющего непосредственное отношение к проблемам воспитания научного мировоззрения. Данный принцип наполнен важным для воспитания личности культурным и философским смыслом и содержит мощный гуманитарный потенциал для изучения физики в школе.

Принцип соответствия отражает тот факт, что любой объект природы или физическое явление может быть описано с помощью различных моделей с разной степенью точности, а все физические законы имеют свои границы применимости. Тем не менее в большинстве подходов это принцип по-прежнему используется в традиционном смысле, как просто некий ограничитель для законов применения классической механики, в связи с чем изучается на заключительном этапе изучения школьного курса физики с целью его обобщения. В связи с тем, что принцип соответствия рассматривается в курсе физики школы так поздно, не позволяет полностью раскрыть его методологический характер. В основном в школьный курс физики строится на изучении конкретных законов, в отрыве от современных идей, вследствие чего учащиеся в большинстве своём получают упрощенные представления об основных научных понятиях, что в итоге приводит к формальному усвоению материала, а также формированию неполной картины мира.

В настоящий момент в школьном курсе физике не реализовано в полной мере использование принципа соответствия как методологического принципа, данный принцип пока реализуется на уровне отдельных физических теорий (классической и релятивистской механики, квантовой и классической теорий излучения, волновой и геометрической оптики). А ведь данный принцип тесно связан с воспитанием научного мышления, поскольку систематическое его использование демонстрирует учащимся, что процесс научного познания представляет собой бесконечную последовательность смены уточняющих друг друга относительных истин.

Список литературы

1. Тарасов Л. В. Закономерности окружающего мира. В 3 кн. Кн 1. Случайность, необходимость, вероятность. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004 384 с. – ISBN 5-9221-0414-4/
2. Яворский Б.М. Основные вопросы современного школьного курса физики : Пособие для учителей. - М. : Просвещение, 1980. - 318 с.