

СЕКЦИЯ 17

«ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ И ФИЗИКО- ТЕХНИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ»

СОДЕРЖАНИЕ

КОНЦЕПЦИЯ ФРАКТАЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА КЛАСТЕРАМИ КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ Алиджанов Э.К., канд.физ.- мат. наук, доцент, Лантух Ю.Д., канд.физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд.хим.наук.....	2865
СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОГРАММ ДЛЯ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ Бакаев А.А., Мазур О.С., Даминов А.И.	2874
МЕТОДЫ ПОСТОБРАБОТКИ ИЗДЕЛИЙ, СОЗДАННЫХ ПРИ ПОМОЩИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ Бакаев А.А., Савышина В.А., Головнева О.А.....	2878
РОЛЬ АКТИВНОСТИ ЛИЧНОСТИ В ПРОЦЕССЕ ЕЕ РАЗВИТИЯ Белокопытова О.Г., канд.пед.наук.....	2883
ПРОИСХОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМОВ В БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент, Арифуллин М.Р., Садыков А.Р.....	2886
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА И КЛЕТОЧНЫМИ СИСТЕМАМИ Бутаева Л.А.	2890
МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ Зверьков Е.А., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент.....	2898
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО- ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ ПО КИНЕТИКЕ НАВЕДЕННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ Летута С.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, Ишемгулов А.Т., канд. физ.-мат. наук, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	2901
ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ ДАТЧИКИ И ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ С ЭЛЕКТРОПИТАНИЕМ ПЕРЕДАЮЩЕЙ ЧАСТИ ОТ ПРИЕМНОЙ Кишин И.Г., д-р техн. наук, профессор.....	2906
ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОБУЧЕНИЯ МАГИСТРА МЕТОДИКЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ В ВУЗЕ Кучеренко М.А., канд. пед. наук, Огерчук А.А., канд. пед. наук	2914
МАГНИТНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ДВУСЛОЙНОГО ЦИЛИНДРА С КРУГОВЫМ СЕЧЕНИЕМ МИКРОМЕТРОВОГО РАДИУСА В ГАРМОНИЧЕСКИ ИЗМЕНЯЮЩЕМСЯ ПОПЕРЕЧНОМ ПОЛЕ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор.....	2920
ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНДУКЦИОННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ СЛОИСТОЙ БИМЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИКРОЧАСТИЦЫ ВО ВНЕШНЕМ КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ ПОЛЕ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор	2926

АННИГИЛЯЦИЯ ТРИПЛЕТНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ДИАМАГНИТНОГО МИКРОПРОВОДА В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ Алимбеков И.Р., Неясов П.П., Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент	2933
ИНДУЦИРОВАННЫЕ КИСЛОРОДОМ РЕАКЦИИ ТУШЕНИЯ И КРОСС- АННИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРОВОДЯЩЕЙ МИКРОЧАСТИЦЫ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Алимбеков И.Р., Пеньков С.А.	2941
ПЛАЗМОННАЯ РЕГУЛИРОВКА ИНТЕНСИВНОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ МОЛЕКУЛ В ОПУШЕЧНОМ СЛОЕ АДсорбированных ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗАРЯЖЕННОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Кручинин Н.Ю., канд. физ.-мат. наук, доцент Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент, Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент.....	2948
СПИН-СЕЛЕКТИВНОЕ ТУШЕНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ Т-ЦЕНТРОВ МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ НА ПОВЕРХНОСТИ ЛЮМИНЕСЦИРУЮЩЕЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Пеньков С.А., Неясов П.П.	2956
ИНДУЦИРОВАННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ КРАСИТЕЛЯ В МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПЛЕНКЕ ХИТОЗАНА Лантух Ю.Д., канд. физ.- мат. наук, доцент, Летута С.Н., доктор физ.-мат. наук, профессор, Алиджанов Э.К., канд. физ.-мат. наук, доцент, Раздобреев Д.А., канд. хим. наук.....	2964
ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА ДИСПЕРСНЫХ СПЛАВОВ ОДНООСНЫХ ВЫСОКОАНИЗОТРОПНЫХ МАГНЕТИКОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ Манаков Н.А., д-р физ.-мат. наук, профессор Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук.....	2969
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДУГ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ В АТМОСФЕРНЫХ РАДУГАХ Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук Яшин А.Г., рендер-разработчик	2975
РОЛЬ И ОБРАЗ МОЛОДОГО УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ В СОВРЕМЕННОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ Мушин Ф.Ю.	2979
СКОРОСТЬ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ОТ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ К СЛОИСТОЙ НАНОЧАСТИЦЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент.....	2984
«ЗЕЛЕНЫЙ» СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ Никитина А.С., Баранова А.П., Хадиева Э.Р., Блиялкина Д.К.	2991
ПРОБЛЕМЫ ИЗУЧЕНИЯ ДИНАМИКИ ВРАЩАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА В СТАРШИХ КЛАССАХ СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ	

Огерчук А.А., канд. пед. наук, Анисина И.Н., канд. техн. наук, доцент, Пискарёва Т.И., канд. техн. наук	2995
ЛАБОРАТОРНЫЙ СТЕНД ПО РАДИОЭЛЕКТРОНИКЕ «ДВУХТРАНЗИСТОРНЫЙ МУЛЬТИВИБРАТОР» Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент	2999
СПЕКТРОСКОПИЯ ЭПР ФЛОГОПИТА В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ Сокабаева С.С., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент	3006
ПРИМЕНЕНИЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ХИРУРГИИ И ТРАВМАТОЛОГИИ Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доцент, Дуля Н.М., Шайнурова И.И.....	3012
ПРОСТОЙ ДЕМОНСТРАЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ НА ЛЕКЦИЯХ ПО ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ Узенбаев Ф.Г., канд. тех. наук, доцент.....	3017
ГИСТЕРЕЗЕСНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК СПЛАВОВ РЗМ И ЖЕЛЕЗА С ВЫСОКОЙ МАГНИТОСТРИКЦИЕЙ Манаков Н.А., д-р физ.-мат.наук, профессор, Цветкова Е.В.....	3021
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ НУЛЕВОГО ЗАРЯДА ЮЖНОУРАЛЬСКОГО ПОЛИМИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ МЕТОДОМ ВЕСОВОГО ТИТРОВАНИЯ Кушнарёва О.П., Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент, Четверикова Д.К.,	3024
К ВОПРОСУ О СРАВНЕНИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО И ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИК-СПЕКТРОВ КАОЛИНИТА Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук	3027
ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ПЛАЗМОННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ В ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ Мушин Ф.Ю., Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент, Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор, Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент.....	3031
ПРИМЕНЕНИЕ И РАЗВИТИЕ СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ ВРАЧЕБНЫХ РЕШЕНИЙ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ Широков С.С.	3039
ФИЗИКА В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВИДАХ СПОРТА Якупов Г. С.....	3045
ФИЗИКА И ВОСПИТАНИЕ ПАТРИОТИЗМА Якупов Г. С.....	3053
ФОРМИРОВАНИЕ МОТИВАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ У СТУДЕНТОВ ТЕХНИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ ДЕМОНСТРАЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА Якупов Г. С.....	3057

КОНЦЕПЦИЯ ФРАКТАЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАССЕЯНИЯ СВЕТА КЛАСТЕРАМИ КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ

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»

Коллоиды и аэрозоли широко распространены в природе и играют важную роль в современных технологиях. Описание процесса агрегации (пептизации) сложная задача, поскольку агрегаты формируются случайным образом. Важным шагом в количественном описании процесса их формирования стало использование концепции фрактала [1].

Для математического описания агрегатов был введен количественный параметр – фрактальная размерность D . Согласно этой концепции количество мономеров размером a в агрегате размером R_g задается следующим выражением:

$$N=k_0(R_g/a)^D, \quad (1)$$

здесь k_0 - константа пропорциональности порядка единицы.

В коллоидах и аэрозолях кластеры встречаются с другими кластерами в результате диффузионного движения. Если вероятность их объединения близка к единице, имеет место процесс агрегации кластеров ограниченный диффузией (DLCA) [2]. В результате такого процесса формируются агрегаты с фрактальной размерностью D от 1.75 до 1.8. В модификациях коллоидных растворов, где агрегаты окружены двойным дипольным слоем, вероятность агрегации резко снижается. В этом случае реализуется режим агрегации ограниченной реакционной способностью (RLCA), что приводит к формированию кластеров с фрактальной размерностью D от 2.1 до 2.2 [3]. Наложение внешних воздействий при формировании или модификации кластеров может изменить их морфологию до других значений фрактальной размерности.

Одним из основных физических методов исследования коллоидных растворов является метод светорассеяния. Это наиболее надежный и абсолютный способ определения молекулярной массы коллоидных частиц, их размеров, формы, полидисперсности, термодинамических параметров межмолекулярного взаимодействия.

Описание особенностей рассеяния света коллоидными растворами можно проводить путем отслеживания разности фаз вторичных волн рассеянных мономерами, составляющими коллоидный агрегат [4]. На рисунке 1 приведена диаграмма, иллюстрирующая рассеяние света рассеивающим центром в направлении детектора. Волновой вектор вторичной волны k_s направлен под углом Θ к волновому вектору k_i падающей волны.

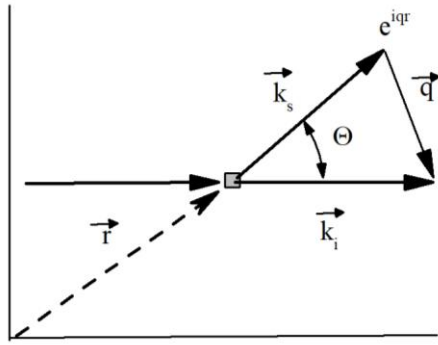


Рисунок 1- Диаграмма, иллюстрирующая рассеяние света рассеивающим центром в направлении детектора. Первичная световая волна с волновым вектором $\mathbf{k}_i$ распространяется слева. Вторичная световая волна характеризуется волновым вектором $\mathbf{k}_s$. Волновой вектор рассеяния $-\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$.

Первичная световая волна с волновым вектором $\mathbf{k}_i$ распространяется слева. Волновой вектор рассеяния $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ представляет собой разность между волновыми векторами падающей и рассеянной волны. При этом амплитуда падающей волны:

$$E_i(\vec{r}) \propto e^{i\mathbf{k}_i \vec{r}} \quad (2).$$

На детектор, положение которого задаётся радиус-вектором $\mathbf{R}$, падает волна $E_s(\vec{R}) \propto E(\vec{r}) e^{i\mathbf{k}_s(\mathbf{R}-\vec{r})}$. Используя выражение для первичной волны, вторичную волну можно представить в виде:

$$E_s(\vec{R}) \propto e^{i\mathbf{k}_i \vec{r}} e^{i\mathbf{k}_s(\mathbf{R}-\vec{r})}, \text{ или } E_s(\vec{R}) \propto e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s)\vec{r}} e^{i\mathbf{k}_s \mathbf{R}}, \text{ или } E_s(\vec{R}) \propto e^{i\mathbf{q} \vec{r}} e^{i\mathbf{k}_s \mathbf{R}}.$$

Из последнего следует, что амплитуда волны рассеянной в направлении детектора может быть представлена в виде - $E_s(\vec{R}) \propto e^{i\mathbf{q} \vec{r}}$, и характеризуется волновым вектором рассеяния $q = 4\pi\lambda^{-1} \sin(\theta/2)$.

Оценка интенсивности светорассеяния может быть проведена путем соотнесения величины q^{-1} с размером агрегата. Представим “систему рассеивающих центров” как систему из N одинаковых точных излучателей (мономеров). Интенсивность рассеяния $I(q)$, пропорциональна квадрату амплитуды волны рассеяния, тогда:

$$I_q \propto |\sum_1^N e^{i\mathbf{q} \vec{r}_i}|^2. \quad (3)$$

С учетом пространственного распределения элементарных рассеивающих центров:

$$I_q \propto \sum_j^N \sum_i^N e^{i\mathbf{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (4).$$

Из вида последнего выражения можно сделать следующие выводы:

1. Если N рассеивающих центров находятся в пределах расстояния q^{-1} друг от друга, то фаза рассеянных волн будет по существу одинаковой. Следовательно, волны будут находиться в фазе, и складываться конструктивно. Тогда общая амплитуда рассеяния будет пропорциональна N , а общая интенсивность рассеяния будет пропорциональна N^2 .

2. Если N рассеивающих центров разделены расстояниями большими чем q^{-1} , фазы N рассеянных волн будут случайными. Следовательно, волны будут складываться случайным образом. Тогда общая интенсивность рассеяния будет пропорциональна N .

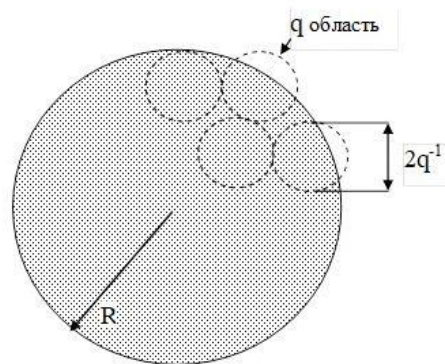


Рисунок 2 - Схема системы точечных рассеивающих центров в агрегате размера R . Также показаны q -области размером $2q^{-1}$

Заслуживает некоторого обсуждения теорема Эвальда–Осина о вымирании [5]. Суть в том, что однородные системы не рассеивают свет. Свет в системе регулярно и близко расположенных (расстояние $< \lambda$) рассеивателей распространяется только в прямом направлении со скоростью c/n , где n – показатель преломления системы. Только при наличии $\square$ флуктуации плотности рассеивателей будет наблюдаться ненулевой вклад в общее рассеяние света при ненулевых углах рассеяния.

Рассмотрим систему рассеивателей в d -мерной сферической области радиуса R . Пусть плотность рассеивателей будет однородной. Разместим их на регулярной решетке с периодом $2a$ как показано на рисунке 2. При этом значимые флуктуации плотности рассеивателей происходят на поверхности системы.

Весь объем сферической области R разобьем на воображаемые “ q -области” размером q^{-1} , как показано на рисунке 2. Для всех рассеивателей одной и той же “ q -области” рассеянные волны находятся в фазе так что:

$$I_q \propto N_q^2, \quad (5)$$

где N_q - количество рассеивателей в q -области.

Пусть n_q - количество q -областей размером q^{-1} , покрывающих поверхность агрегата. Волны рассеянные q -областями складываются случайным образом. Суммарная интенсивность рассеяния будет иметь вид:

$$I_q \propto n_q. \quad (6)$$

Комбинируя первое и второе соотношение получаем:

$$I_q \propto n_q N_q^2 \quad (7)$$

Теперь проанализируем последнее уравнение для произвольного q .

Если $q < R^{-1}$ тогда $n_q = 1$ and $N_q = N$ (число мономеров в кластере). Тогда интенсивность рассеяния:

$$I_q \propto N^2. \quad (8)$$

Наиболее общий случай $R^{-1} < q < a^{-1}$ допускает произвольные соотношения между размерами мономера и величиной поверхности агрегата. Введем параметры размерности объема D_m (обычно – 3) и размерности поверхности D_s (обычно – 2), для системы рассеивателей. Для фрактального агрегата, как правило, фрактальная размерность объема и поверхности совпадают $D = D_m = D_s$. Количество рассеивателей в q -области пропорционально их общему числу в агрегате N . Исходя из сравнения масштабов шкалы длины (q^{-1}) и размеров агрегата (системы рассеивателей) (R) получаем оценку количества рассеивателей в q -области:

$$N_q = N(q^{-1}/R)^{D_m}. \quad (9)$$

Аналогично количество q -областей на поверхности R области задается соотношением:

$$n_q \propto (R/q^{-1})^{D_s} \quad (10)$$

Применительно к уравнению (6) имеем:

$$I_q \propto n_q N_q^2 = (R/q^{-1})^{D_s} (N(q^{-1}/R)^{D_m})^2 = N^2 (qR)^{-2D_m+D_s}. \quad (11)$$

Количество элементарных рассеивателей в объеме и на поверхности агрегата задается следующим образом:

$$N = k_m (R/a)^{D_m} \quad (12)$$

$$N_s = k_s (R/a)^{D_s} \quad (13)$$

Учитывая последнее можно записать:

$$I_q \propto k_0 N_s (qa)^{-2D_m+D_s}, \quad (14)$$

где $k_0 = k_m^2/k_s$.

На рисунке 3 представлена зависимость интенсивности рассеяния света от величины вектора рассеяния (угла рассеяния). График разделен на три области.

В случае $q > a^{-1}$ все рассеиватели формируют волны, которые имеют случайные фазы, тогда – $I(q) \propto k_0 N_s$.

Если реализуется случай $R^{-1} < q < a^{-1}$ тогда –

$$I(q) \propto k_0 N_s (qa)^{-2D_m+D_s}.$$

При условии $q < R^{-1}$ для интенсивности рассеяния имеем –

$$I(q) \propto N^2.$$

С учетом (11) и (12) приведенные условия масштабирования можно представить в более функциональной форме:

$$1 \quad \begin{array}{l} q > a^{-1} \\ R^{-1} < q < a^{-1} \\ q < R^{-1} \end{array} \quad \begin{array}{l} I(q) \propto N^2 (R/a)^{-2D_m+D_s} \\ I(q) \propto N^2 (qR)^{-2D_m+D_s} \\ I(q) \propto N^2 \end{array} \quad \left| \begin{array}{l} \\ \\ 14' \end{array} \right.$$

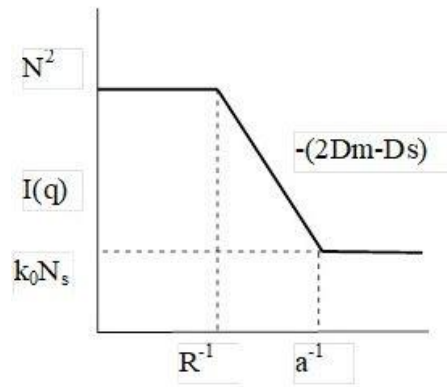


Рисунок 3 - График зависимости интенсивности рассеяния фрактальным агрегатом от волнового вектора q , в полулогарифмическом масштабе.

Приведенные результаты масштабирования являются общими и могут быть применены к ряду конкретных физических ситуаций.

а. Рассеяние на сферической частице.

Положим что: $a \rightarrow 0, D_m = d, D_s = d - 1$, где d – размерность трехмерного пространства. Если выполняется условие $R^{-1} < q < a^{-1}$, то согласно (14) $I(q) \propto N_s q^{-(d+1)}$. Для $d=3$ интенсивность рассеяния от величины q имеет вид: $I(q) \propto q^{-4}$. Результат, известный как закон Порода [6] (рисунок 4).

Для $qR < 1$ теория Релея предсказывает рассеяние, пропорциональное R^6 , что коррелирует с уравнением (7) с учетом того, что $N \sim R^3$.

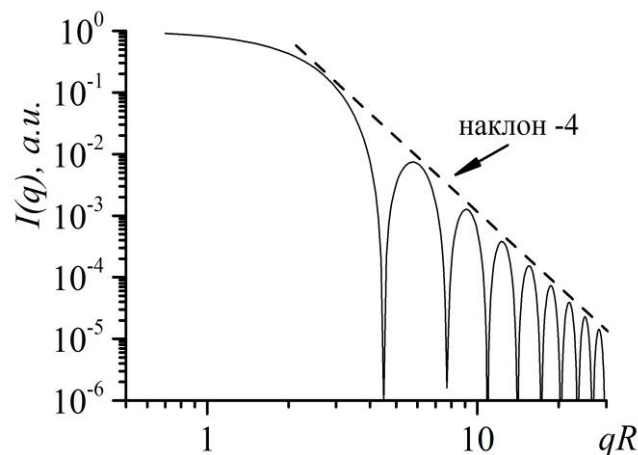


Рисунок 4 - Результат расчета угловой зависимости интенсивности рассеяния света на гладкой сплошной сфере радиуса R согласно RDG теории [7].

Если твердая сфера имеет фрактально шероховатую поверхность, тогда для $d=3$ её фрактальная размерность поверхности имеет промежуточное значение $3 > D_s > 2$ и показатель степени зависимости интенсивности рассеяния от q может иметь значение отличное от -4. Это совпадает с хорошо известным результатом, полученным в работе [7].

б. Рассеяние на фрактальном агрегате.

Во фрактальном агрегате, как правило, все мономеры локализованы на поверхности. Таким образом, фрактальная размерность агрегата ($D = D_m = D_s < d$) соответствует значению лежащему в области между 1 и 3.

Тогда, согласно соотношению (14'), имеем $I(q) \propto q^{-D}$ для $q > R^{-1}$. Это еще один хорошо известный результат, полученный в работе [8].

Поскольку первостепенное значение имеет структурный фактор фрактального агрегата $S(q)$, результаты подхода масштабирования можно представить следующим образом:

$$S_q = I(q)N^{-2} = 1qR_g < 1, \quad (15)$$

$$S_q = I(q)N^{-2} = C(qR_g)^{-D}qR_g > 1 \quad (16)$$

(здесь N^{-2} - нормировочный множитель, R_g - радиус инерции кластера).

Для фрактальных кластеров состоящих из N плотных сферических мономеров вид зависимости структурного фактора рассеяния от волнового вектора представлен на рисунке 5.

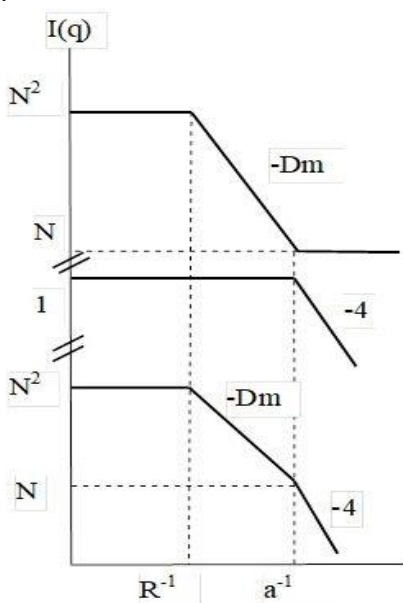


Рисунок 5 - Зависимость интенсивности рассеяния света на агрегате радиуса R с фрактальной размерностью D_m , состоящем из сферических мономеров радиуса a с гладкой поверхностью в полулогарифмическом масштабе. Верхняя кривая – фрактальный агрегат, состоящий из точечных частиц; вторая кривая – одиночные сферические частицы; нижняя кривая – фрактальный агрегат, состоящий из сферических частиц радиуса a .

Рассеяние света кластерами коллоидных растворов эндоэдральных фуллеренов.

Методом многоугольного статического светорассеяния исследовались коллоидные растворы эндоэдральных фуллеренов (Y@C82) в диметилформамиде. На рисунке 6 представлены графики зависимости логарифма интенсивности светорассеяния от волнового вектора рассеяния $q = 4\pi/\lambda \cdot \sin(\Theta/2)$ для растворов Y@C82 концентрации: $\blacksquare$ - $C_1 = 5.4 \cdot 10^{-5}$ г/мл, $\square$ - $C_2 = 5.1 \cdot 10^{-5}$ г/мл, $\bullet$ - $C_3 = 2.9 \cdot 10^{-5}$ г/мл, $\blacktriangle$ - $C_4 = 1.7 \cdot 10^{-5}$ г/мл. Ранее было установлено, что растворы такого типа

монодисперсные и содержат кластеры размером $R \sim 100$ нм[9]. Для волнового вектора рассеяния в диапазоне $R^{-1} < q < a^{-1}$, зависимость интенсивности от q имеет вид (16):

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

Из последнего следует, что зависимость логарифма интенсивности светорассеяния от волнового вектора рассеяния (q) аппроксимируются прямыми линиями, тангенс угла наклона которых определяется фрактальной размерностью кластеров исследуемого раствора. Из представленных на рисунке 6 экспериментальных результатов можно сделать вывод, что фрактальная размерность кластеров (D) в коллоидных растворах Y@C82 возрастает с увеличением его концентрации от 2.6 до 3.7.

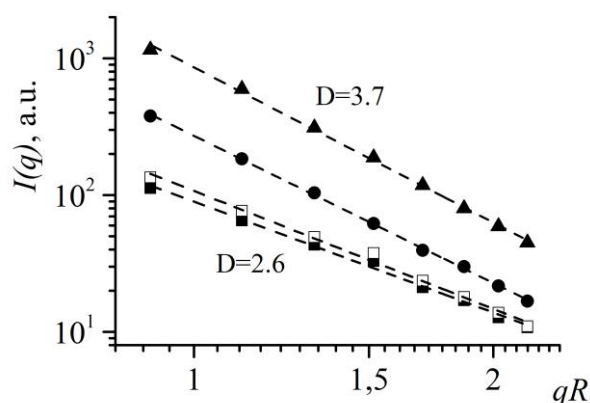


Рисунок 6 - Графики зависимости логарифма интенсивности светорассеяния от волнового вектора рассеяния $q = 4\pi/\lambda * \sin(\Theta/2)$ для ДМФ растворов эндоэдральных фуллеренов Y@C82 различной концентрации: ■ - $C = 5.4 \cdot 10^{-5}$ г/мл, □ - $C = 5.1 \cdot 10^{-5}$ г/мл, ● - $C = 2.9 \cdot 10^{-5}$ г/мл, ▲ - $C = 1.7 \cdot 10^{-5}$ г/мл.

Также нами исследовался процесс агрегации кластеров Y@C82 в растворе при изменении его ионной силы путем добавления в него небольшого количества (10^{-2} - 10^{-4} М) хлороводорода (HCl). Размеры кластеров эндоэдральных фуллеренов контролировались методом динамического светорассеяния. Было обнаружено, что увеличение среднего эффективного радиуса кластеров R_{ot} 100 до 200 нм сопровождается заметным увеличением интенсивности светорассеяния (рисунок 7).

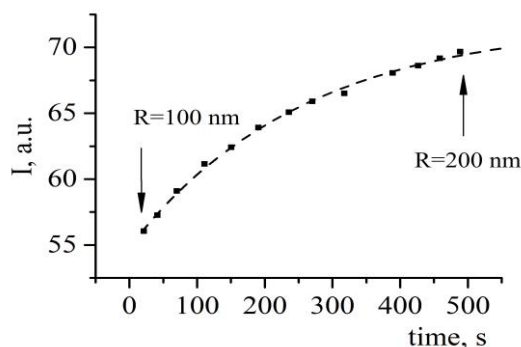


Рисунок 7 Кинетика изменения интенсивности светорассеяния в процессе агрегации раствора Y@C82. Размеры кластеров возрастают от 100 нм до 200 нм.

Следует отметить, что увеличение сигнала светорассеяния происходит в условиях неизменной массовой концентрации раствора. Качественно наблюдаемый эффект можно объяснить исходя из подхода масштабирования. В истинном растворе молекулы находятся друг от друга на большом расстоянии. Фазы рассеянных ими волн значительно смещены друг относительно друга и суммарная интенсивность светорассеяния пропорциональна концентрации молекул N_0 . В случае формирования коллоидных агрегатов радиуса (R) молекулы собираются в компактные ансамбли. Молекулы, находящиеся в пределах q – областей агрегата (рис.1), формируют систему когерентных вторичных волн, и суммарная интенсивность рассеяния становится пропорциональна квадрату числа молекул в q – области $N^2 = (R/a)^{2D}$. При этом интенсивность рассеяния фрактальным кластером радиуса (R) , согласно (14'), будет иметь вид:

$$I(q) \propto N^2 (qR)^{-D}.$$

Умножая полученное выражение на число сформированных кластеров $n_q = \frac{N_0}{(R/a)^D}$ (здесь a – размер молекулы фуллерена) получим выражение для интенсивности светорассеяния совокупностью фрактальных кластеров:

$$I(q) \propto \frac{N_0}{N} N^2 (qR)^{-D} = N_0 (R/a)^D (qR)^{-D} = \frac{N_0}{(aq)^D},$$

Из последнего выражения видно, что формирование кластеров радиуса $(R^{-1} < q < a^{-1})$ приводит к усилению сигнала светорассеяния в $(aq)^{-D}$ раз. В случае $aq < 1$ – имеет место усиление сигнала. Так в нашем случае для фуллеренов $a \sim 1$ нм, $q = 0,018$ нм⁻¹, $(aq)^{-2} \sim 10^3$. Кинетика изменения интенсивности светорассеяния кластерами Y@C82, вероятно, определяется характером кинетики их агрегации.

Список литературы

1. Mandelbrot, B. B. (1982). *Fractal Geometry of Nature*, W. H. Freeman, San Francisco, CA.
2. Meakin, P.. Formation of Fractal Clusters and Networks by Irreversible Diffusion-Limited Aggregation // *Phys. Rev. Lett.* (1983)51, pp.1119–1122.
3. Weitz, D. A., Huang, J. S., Lin, M. Y., and Sung, J. Limits of Fractal Dimension for Irreversible Kinetic Aggregation of Gold Colloids, // *Phys. Rev. Lett.* (1985). 54 pp.1416–1419.
4. C. M. Sorensen. Light Scattering by Fractal Aggregates: A Review // *Aerosol Science and Technology* (2001) 35, pp. 648–687
5. Born, M., and Wolf, E.. *Principles of Optics*, Pergamon, Oxford. (1975)
6. Porod, G. Die Röntgenkleinwinkelstreuung von dichtgepackten Kolloiden Systemen // *Kolloid* (1951) Z. 124 pp.83–114.
7. Martin, J. E., and Hurd, A. J. Scattering from Fractals, // *J. Appl. Cryst.* (1987) V20 pp.61–78.

8. Sorensen, C. M., and Roberts, G. C.. The Prefactor of Fractal Aggregates, // J. Colloid Interface Sci. (1997) V186 pp. 447–452.

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

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОГРАММ ДЛЯ 3D-МОДЕЛИРОВАНИЯ

Бакаев А.А., Мазур О.С., Даминов А.И.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

3D-моделирование это процесс формирования виртуальной модели объекта, которая позволяет с максимальной точностью продемонстрировать размер, форму, внешний вид и другие параметры этого объекта. Создать такую модель позволяют компьютерные программы. Моделирование помогает исследователю познать объект изучения, установить взаимосвязь с другими объектами и описать их взаимодействие в наиболее доступной форме.

На рынке существует множество программ для 3D-моделирования, для того чтобы выбрать оптимальную программу необходимо предварительно определиться с критериями, по которым будет происходить сравнение, то есть с требованиями, предъявляемыми к 3D-редакторам.

Одним из основных критериев для сравнения графических редакторов был выбран учет уровня подготовки пользователей. Программа должна иметь интуитивно понятный интерфейс, русификацию, дополнительные справочные материалы и всплывающие подсказки. Помимо этого, редакторы должны обладать необходимыми функциями для реализации основных задач моделирования.

Следующий критерий сравнения - это системные требования программы и компьютера пользователя. Как правило, наиболее строгие требования предъявляются к аппаратной составляющей компьютера пользователя и распространяются на объем оперативной памяти и характеристики процессора. Очевидно, что в случае, если компьютер пользователя не соответствует даже минимальным характеристикам производителя программного обеспечения, ни один 3D-редактор не сможет корректно работать и выполнять требуемые функции.

ZBrush. Программа ZBrush от компании Pixologic — это мощный профессиональный инструмент для создания и редактирования графики в трехмерном пространстве. В первую очередь программа направлена на работу с так называемой «цифровой глиной», которая позволяет буквально вылепливать объекты. ZBrush может использоваться для твердотельного 3D-моделирования и оснащен для этого специальными инструментами. Реалистичность при создании 3D моделей создается благодаря огромному набору специальных кистей, а инструменты наложения текстур и визуализации дополняют функционал программы. ZBrush практически не использует возможности видеокарты, что, непосредственно, влияет на скорость работы. Вместо этого основным ресурсом для приложения является оперативная память компьютера, недостаток которой может сказываться на производительности. ZBrush — это очень гибкий пакет 3D графики, который можно настроить согласно своим собственным предпочтениям. Интерфейс программы полностью программируем, настроить можно все,

вплоть до размера шрифта. Наряду с такой гибкостью, в программе нет единого алгоритма построения моделей.[2]

Tinkercad. Tinkercad — это онлайн-сервис по разработке 3D-проектов для начинающих. Использовать продукт можно только после регистрации аккаунта. Официальный сайт содержит массу обучающих материалов, что не составит труда, если специалист решил освоить данный софт. Моделирует электрические схемы, коды и 3D-проекты.[3]

Blender. Blender — это бесплатное программное обеспечение для создания и редактирования трехмерной графики. Программа справляется с анимацией и реалистичными ландшафтами, но уступает в скульптинге персонажей.

На сегодняшний день это полноценный 3D-редактор, в котором пользователя встречает полностью программируемый интерфейс и уникальная внутренняя файловая система. Оболочка программы на первый взгляд может показаться неудобной и непонятной, но после настройки горячих клавиш работать в Blender становится просто и удобно. На официальном сайте находятся в общем доступе обучающие курсы. В качестве языка программирования приложение использует Python, владея которым вы можете создавать собственный инструменты, редактировать интерфейс и сам принцип работы программы. Приятным бонусом является доступность пакета на различных операционных системах обеих разрядностей: освоить программу смогут владельцы компьютеров с ОС Windows, GNU/Linux и Mac OSX.

Maya. Maya является самой распространенной программой для создания спецэффектов, анимаций. Создает реалистичные картинки, подстраивается под любого пользователя, богата своим интерфейсом, однако очень требовательна к устройству, с которого будет происходить работа. Maya ценится за огромный набор инструментов для анимации, текстурирования, а также создания разнообразных спецэффектов. Это серьезный редактор трехмерной графики, в нем грамотно реализована функция визуализации готовых моделей.

На официальном сайте имеется лицензия для студентов, которая выдается на 3 года бесплатно.

3DsMax. 3Ds Max — это программное обеспечение для 3D-моделирования, анимации и рендеринга, созданное и разработанное для игр и визуализации дизайна. Программное обеспечение очень полезно для проектирования зданий, инфраструктуры и строительства, а также для разработки продуктов и планирования производства.

Кроме того, 3Ds Max помогает пользователям создавать массивные игровые миры, детализированных персонажей, настраивать окружение здания, создавать сцены, в которых много людей, имитировать физические свойства жидкостей, таких как вода, масло и лава. Программа легка в изучении на начальных этапах, позже могут понадобиться дополнительные курсы или материалы, обучающие уроки есть в общем доступе. Лицензия для студентов выдается на 3 года.

В таблице 1 приведены достоинства и недостатки рассматриваемых программ.

Таблица 1- Достоинства и недостатки программ для 3D моделирования.

Название	Плюсы	Минусы
TinkerCad	Не нужно скачивать отдельным софтом. Бесплатное пользование. Поддерживает 3D-принтер. Имеет бесплатные обучающие видео. Подходит для новичков.	Малый функционал. Нет возможности работать в оффлайн-режиме.
Blender	Бесплатная версия. Реалистичная картинка на выходе. Большой функционал. Простой интерфейс. Возможность создания спецэффектов VFX. Возможность добавления плагинов.	Недостаточная проработка деталей кожного покрова или одежды персонажей. Частые обновления.
ZBrush	Наличие детализированного скульптинга. Широкий выбор кистей. Авторитетность на рынке. Наличие возможности самостоятельного создания собственных кистей либо добавления скачанных пакетов.	Высокая стоимость. Сложности, возникающие при освоении программы у людей без опыта. Слабая палитра и рендер.
Maya	Высокий функционал анимации. Повышенная скорость работы. Повышенный функционал в скульптинге. Возможность поддерживать самые популярные мультимедийные форматы. Можно создавать плавающие заголовки и логотипы. Большое количество видео-уроков, которые могут посмотреть все желающие.	Интерфейс английский, отсутствие русскоязычной версии. 30-ти дневная пробная версия программы. Высокий уровень системных требований. Нет встроенного vray.
3Ds Max	Встроенный vray позволяет создавать реалистичные картинки. Простота использования. Большое количество обучающего материала. 3D анимация и динамика. Общие инструменты анимации. Настраиваемый интерфейс, рабочий процесс и конвейер. Библиотека активов. Настраиваемые рабочие пространства. Поддержка дисплея с высоким разрешением. 3D моделирование, текстурирование и эффекты.	Недостаточная анимация для создания полноценных мультфильмов. Не подходит для скульптурирования людей и животных. Высокая цена на профессиональный пакет.

Таблица 2- Технические характеристики.

Название	Условия распространения	Операционные системы	Поддержка анимации	Поддерживаемые форматы	Полнота функционала
Blender[5]	Бесплатно	macOS, Windows, Linux, Steam	есть	OBJ, FBX, PLY, STL	Полный
TinkerCad	Бесплатно	Онлайн	нет	STL, OBJ, X3D colors, VRML colors, SVG	Базовый
Maya [4]	Платно/бесплатная версия для студентов	Windows, macOS, Linux	да	3DS, OBJ	Полный
3Ds Max [1]	Платно/бесплатная учебная лицензия	Windows, macOS, Linux	да	3DS, OBJ	Полный
ZBrush	Платно	Windows, macOS	да	OBJ, 3DS, dxf, psd	Полный

Таким образом, рассмотренные программные средства для 3D-моделирования имеют как достоинства, так и недостатки. Проведенный сравнительный анализ может помочь при создании программы для 3D-моделирования на российском рынке. Стоит учесть лучшие стороны и пункты, которые можно было бы скорректировать для более удобной работы пользователей.

Список литературы

1. Все о программе 3Ds Max [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://junior3d.ru/article/3Ds-Max.html> (дата обращения 10.12.2022).
2. Обзор 10 лучших программ для 3D-моделирования [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3dclub.com/blog/top-programm-dlya-3d-modelirovaniya> (дата обращения 10.12.2022).
3. Программа для 3D-моделирования Tinkercad [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://junior3d.ru/article/tinkercad.html> (дата обращения 10.12.2022).
4. Краткий обзор программы AUTODESK MAYA [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3ddevice.com.ua/blog/3d-printer-obzory/autodesk-maya-obzor/> (дата обращения 10.12.2022).
5. Краткий обзор бесплатного 3d редактора Blender [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3ddevice.com.ua/blog/3d-printer-obzory/3d-redaktor-blender-obzor/> (дата обращения 10.12.2022).

МЕТОДЫ ПОСТОБРАБОТКИ ИЗДЕЛИЙ, СОЗДАННЫХ ПРИ ПОМОЩИ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Бакаев А.А., Савышина В.А., Головнева О.А.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Аддитивные технологии являются видом радикальных технологических инноваций, находящимся в настоящее время в стадии активного внедрения в различные отрасли экономики.

Наиболее широко используемой технологией 3D-печати является технология FDM. Она подразумевает создание объектов при помощи послойного нанесения расплавленного материала и лучше всего подходит для быстрого создания малобюджетных прототипов [1].

В FDM-распечатках обычно видны линии слоев, поэтому, если требуется получить гладкую поверхность, постобработка очень важна.

Таким образом, постобработка - это постпечатный процесс шлифовки, сглаживания или покраски поверхности, который осуществляется для того чтобы выращенная 3D модель выглядела максимально качественно и профессионально. На рисунке 1 изображены изделия, которые прошли постобработку.



Рисунок 1 - Прошедшие постобработку FDM-распечатки (слева направо): холодная сварка, заполнение пустот, необработанная, зачищенная шкуркой, отполированная, покрашенная и покрытая эпоксидкой.

В данной статье мы рассмотрим следующие методы постобработки изделий.

Удаление поддержек.

Удаление поддержки – это обычно первый этап постобработки при любой технологии 3D-печати, в которой они применяются. В целом подпорки можно разделить на нерастворимые и растворимые. Удаление подпорок является обязательным и не приводит к улучшению качества поверхности.

Шлифование.

После того, как поддержки удалены или растворились, можно выполнить шлифование модели, чтобы удалить остатки поддержки и сгладить шероховатости, неровности. С самого начала до самого конца рекомендуется влажное ошкуривание – это позволит избежать излишнего трения, которое может привести к повышению температуры и повредить объект, а также загрязнить саму наждачную бумагу. В промежутке между шлифованием распечатку следует чистить зубной щеткой и промывать мыльной водой, после чего протирать тряпочкой, что позволит удалить пыль и избежать ее слипания.

Холодная сварка.

Когда размер печатаемой модели превышает максимальный объем принтера, модель часто разбивают на более мелкие детали, которые затем собирают вместе после печати. Для PLA пластика и других материалов сборка может выполняться с использованием клея или другого клея, соответствующего типу пластика. При использовании ABS пластика компоненты могут быть «сварены» с использованием ацетона. Поверхности, которые необходимо соединить, следует слегка смазать ацетоном, и прочно удерживать вместе (или зажать в тисках), до тех пор, пока большая часть ацетона не испарится. В процессе этого части модели соединятся друг с другом в процессе химической реакции.

Заполнение промежутков.

Во время печати нередко формируются промежутки, когда слои являются неполными из-за неисправности 3D принтера или плохих настроек. Небольшие промежутки и пустоты могут быть легко заполнены эпоксидной смолой и могут не требовать дополнительной обработки. Большие зазоры или пустоты, образовавшиеся в результате склейки деталей, могут быть успешно заполнены специальным наполнителем, что потребует дополнительной шлифовки после высыхания.

Полировка.

После того, как модель будет отшлифована, необходимо удалить образовавшуюся пыль тканью, затем очистить ее в теплой воде при помощи зубной щетки. Дать достаточно времени модели для высыхания и затем отполировать ее полировочным составом при помощи шлифовального круга или салфетки из микрофибры.

Грунтовка и покраска.

Также после того, как модель будет отшлифована деталь можно грунтовать. Грунтование выполняется специальной аэрозольной грунтовкой двумя слоями.

Как только грунтовка будет завершена, можно приступать к окраске. Обычная краска из строительного магазина более вязкая и более сложная в нанесении, поэтому лучше использовать краски, специально разработанные для

окраски 3D-моделей. Загрунтованную поверхность следует хорошенько отполировать затем очистить поверхность с помощью ткани. Начинать покраску модели лучше легкими мазками.

Обработка парами растворителя.

Для того чтобы произвести обработку парами растворителя, необходимо выстелить дно контейнера и по возможности боковые стенки бумажными полотенцами. Крайне важно, чтобы пар не испортил саму камеру. Рекомендуется использовать стеклянные и металлические контейнеры. Нужно добавить достаточное количество растворителя, чтобы слегка увлажнить, но не намочить полностью бумажные полотенца. В то же время растворителя должно быть достаточно, чтобы полотенце прилипло к боковым стенкам контейнера. Далее следует поместить небольшую подложку из алюминиевой фольги или другого подходящего материала в середину контейнера, выложенного бумажным полотенцем. Затем поместите модель на подложку и закройте крышку контейнера. Для полировки парами растворителя требуется определенное количество времени, поэтому периодически проверяйте деталь. Чем выше температура в контейнере, тем выше скорость сглаживания, но следует соблюдать осторожность, чтобы концентрация паров растворителя не привела к возгоранию[2].

Погружение в растворитель.

Перед погружением изделия в растворитель необходимо убедиться, что используемый контейнер достаточно широкий и глубокий для его полного погружения. После этого следует заполнить контейнер соответствующим количеством растворителя, соблюдая осторожность, чтобы свести к минимуму разбрызгивание. Следующим этапом подготовьте модель для погружения, закрутив крючок или небольшой винт на незаметную поверхность модели. Проденьте проволоку через ушко крючка или вокруг винта, чтобы модель могла быть опущена в контейнер. Если проволока слишком тонкая, будет сложно удерживать модель при погружении.

Как только деталь будет подготовлена, быстро погрузите ее полностью в растворитель не более чем на несколько секунд и вытащите модель из контейнера и подвесьте ее за проволоку для сушки [3]. Важно, чтобы растворитель полностью испарился с поверхности. Деталь можно осторожно встряхнуть после вынимания из контейнера, чтобы ускорить сушку.

Покрытие эпоксидной смолой.

После того, как модель будет отшлифована тщательно очистите ее тканью. Эпоксидные смолы обладают экзотермическими свойствами, поэтому не рекомендуется использовать стеклянные контейнеры и контейнеров, состоящих из материалов с низкой температурой плавления. Рекомендуются контейнеры, специально предназначенные для смешивания эпоксидных смол. Неправильное соотношение увеличивают время высыхания, и эпоксидная смола никогда не высохнет полностью, и будет иметь липкую поверхность. Необходимо тщательно перемешать смолу и отвердитель в соответствии с инструкцией, плавными круговыми движениями, чтобы минимизировать количество пузырьков воздуха. Количество слоев зависит от качества печати. Учтите, что даже для

небольшого количества эпоксидной смолы требуется достаточно много времени для полимеризации.

Покрытие металлом.

Металлическое покрытие может быть выполнено с помощью гальванизации в домашних условиях или на производстве. Качественное металлическое покрытие требует профессиональных навыков и специального оборудования. Ниже приведем процесс гальванизации медью.

Гальванизация в домашних условиях может быть выполнена с использованием меди или никеля в качестве базового слоя, который затем может быть покрыт другим металлом. Крайне важно, чтобы поверхность модели была максимально гладкой до нанесения покрытия, так как любые неровности и шероховатости проявятся на поверхности после гальванизации. Подготовьте очищенную и отшлифованную модель, покройте пластик тонким слоем токопроводящей краски или раствором ацетона с графитом. Дайте токопроводящему покрытию полностью высохнуть и при необходимости отполируйте его, чтобы обеспечить гладкую поверхность. Необходимо минимизировать контакт с моделью в этот момент или одеть перчатки, так как, выделяемый кожный жир попадет на поверхность детали и ухудшит конечный результат [4].

Вставьте винт или крючок в малозаметную часть модели и присоедините к одному из выводов блока питания. Он будет служить катодом и должен быть подключен к отрицательной клемме блока питания. Опустите анод в емкость и включите блок питания. После этого поместите модель в емкость, чтобы она не контактировала с анодом в любой точке. Установите регулятор на напряжение 1-3 вольта и дождитесь, пока модель не будет полностью покрыта. Выключите блок питания, выньте модель и протрите ее салфеткой из микрофибры. Можно покрыть модель лаком, чтобы защитить ее от окисления [5].

Таким образом, в данной статье мы рассмотрели наиболее распространенные методы постобработки изделий. Если раньше при использовании 3D принтера для печати прототипов постобработку не рассматривали как этап печати, то сегодня по мере внедрения аддитивных технологий как инструмента производства, этап постобработки уже рассматривается пользователями как неотъемлемая его часть. Использование аддитивных технологий растет, и затраты на постобработку становятся критичными в себестоимости напечатанного изделия. Исходя из этого, сделан вывод об актуальности дальнейших теоретических исследований в данной области, разработки специализированной теории и методологии, которая найдет практическое применение.

Список литературы

1. Что нужно для постобработки 3D-печатных объектов [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3dtoday.ru/blogs/3dtool/postprocessing-of-3d-printed-objects-what-do-you-need> (дата обращения 10.12.2022).
2. Постобработка моделей после 3D печати [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3d-diy.ru/wiki/3d-printery/postobrabotka-modelej-posle-3d-pechat/> (дата обращения 10.12.2022).

3. Обработка изделий напечатанных на FDM 3D-принтерах [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://rec3d.ru/rec-wiki/postobrabotka-na-pechatannykh-na-fdm-3d-printerakh-izdeliy/> (дата обращения 10.12.2022).

4. Постобработка 3D моделей [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3dtool.ru/stati/postobrabotka-3d-pechatnykh-obektov/> (дата обращения 10.12.2022).

5. Постобработка готовых изделий после фотополимерной 3D печати (SLA/LCD/DLP) [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://3d-services.ru/sfery-primeneniya/postobrabotka-izdelij-posle-3d-pechati-fotopolimerom/> (дата обращения 10.12.2022).

РОЛЬ АКТИВНОСТИ ЛИЧНОСТИ В ПРОЦЕССЕ ЕЕ РАЗВИТИЯ

Белокопытова О.Г., канд.пед.наук

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Наиболее острые проблемы в процессах обучения и воспитания, связанные с развитием мировоззрения личности выпускников всех учебных заведений, являются поистине актуальными и интернациональными проблемами. Эти вопросы глубоко волнуют ученых различных сфер во многих странах.

Проблема активности личности не является принципиально новой в образовании, однако её актуальность не вызывает сомнений и в современном мире.

Известный ученый М.И. Махмутов пишет, что формирование мировоззрения - это в первую очередь формирование интеллектуально активной личности.

Проблема активности личности в обучении как ведущий фактор достижения целей обучения, общего развития личности, профессиональной ее подготовки требует принципиального осмысления важнейших элементов обучения (содержания, форм, методов) и утверждает, что стратегическим направлением активизации обучения является не увеличение объема преподаваемой информации, не усиление и увеличение числа контрольных мероприятий, а создание дидактических и психологических условий осмысленности учения, включение в него учащегося на уровне не только интеллектуальной, но и личностной и социальной активности.

Нам педагогам нужно учитывать, что личность в широком смысле – субъект социальных отношений и социальной деятельности. Поэтому, если рассматривать личность, то нужно помнить, что это молодой человек, который готовится к профессиональной трудовой деятельности. В процессе обучения у студента формируются и развиваются необходимые для этого качества, знания, умения и навыки. Отсюда складываются основные цели на ближайшее будущее в жизни студента – учиться, развивать свой интеллект, расти духовно, нравственно, физически, эстетически, овладевать профессией [4, с. 379-381]. Человек никогда не рождается личностью, он становится личностью в процессе развития.

Потребность мировоззренческого самоопределения личности и становления ее собственной жизненной позиции стали актуальными, в результате усиления информационного давления на сознание молодого поколения, а что особенно важно, в результате происходящей динамики социально-экономических процессов. Поэтому общество, особенно ошутимо, стало нуждаться в личности активной, динамичной, умеющей быстро ориентироваться в сложных ситуациях, самостоятельной, ответственной.

Активность обучаемых – это их интенсивная деятельность и практическая

подготовка в процессе обучения и применения знаний, сформированных навыков и умений. Активность в обучении является условием сознательного усвоения знаний, умений и навыков. В результате чего у студентов осуществляется серьезная профессиональная подготовка и их практическая деятельность. Все-му этому способствуют активные методы обучения.

Само идеологическое воздействие на личность должно носить проблемный характер, предполагая поисковую, творческую работу студентов. Это достигается, прежде всего, за счет внедрения активных методов, которые превращают отношения из «субъект-объектных» в «субъект-субъектные» [5, с.209].

Активные методы обучения – это способы активизации учебно-познавательной деятельности учащихся, которые побуждают их к активной мыслительной и практической деятельности в процессе овладения материалом, когда активен не только преподаватель, но активны и ученики (А.М.Смолкин).

Активные методы обучения предполагают использование такой системы методов, которая направлена главным образом, не на изложение преподавателем готовых знаний и их воспроизведение, а на самостоятельное овладение учениками знаний в процессе активной познавательной деятельности.

Таким образом, активные методы обучения – это обучение деятельностью. Так Л.С. Выготский сформулировал закон, который говорит, что обучение влечет за собой развитие, так как личность развивается в процессе деятельности. Именно в активной деятельности, направляемой преподавателем, ученики овладевают необходимыми знаниями, умениями, навыками, развивают творческие способности [3, с.95].

Однако самые оптимальные условия, созданные обществом, могут не реализоваться, если человек сам не проявляет собственной активности в развитии своей личности.

Активность человека не сводится к жесткому соответствию его поведения требованиям моральных норм, она должна носить творческий характер, т.е. предполагает не внешнюю, а внутреннюю регуляцию, самоконтроль, личную ответственность в деятельности и поведении, которые основываются на личном моральном выборе [5, с.213].

Позиция авторов книги «Мировоззренческая направленность преподавания общетеоретических и специальных дисциплин в инженерно-техническом вузе» такова, что необходимо преодолевать попытки некоторых исследователей абсолютизировать активность субъекта, оторвать теорию от объекта, практики, растворив ее в чистой субъективной деятельности. Важно иметь в виду, что признание объективного существования окружающего человека мира ни в какой степени не противоречит активности познающего субъекта. Напротив, оно предполагает эту активность, и ее развитие у студентов – наша повседневная задача. Возрастание активности субъекта в познании является своеобразным законом развития как научного, так и всякого другого знания. Только благодаря этому осуществляется проникновение в глубь объекта, что свидетельствует о росте творческих способностей человека [1, с.14].

Проблемно-поисковый характер преподавания, ориентация на критиче-

ское мышление, использование не только когнитивных, но и чувственно-эмоциональных и творческих качеств личности делают их незаменимым инструментом развития мировоззрения. Поэтому развитие у студентов активности – наша повседневная и первостепенная задача.

Следует всегда помнить, что в основу оценки воспитанности и развитости личности должны быть положены не отдельные ее качества, а ее общая нравственная направленность.

Самое главное, преподавателю важно об этом помнить, т.к. игнорирование мировоззренческих установок ведет к невежеству, к деградации личности. Вот почему мировоззрение становится не только целью и средством развития личности студента, но и инструментом познания. При этом необходимо учитывать, что одно дело – содержание мировоззрения, другое дело – источник мировоззренческого сознания.

Повышение активности и творческого потенциала субъектов научно-педагогического процесса в любом учебном заведении возможно только при условии удовлетворения потребностей и создания благоприятных условий для развития способностей каждого конкретного человека.

Таким образом, личность формируется в процессе активного взаимодействия с окружающим миром. Именно активность направляет личность на поиск своего места в мире, что отчётливо проявляется в решении вопроса о выборе профессии. Активность направлена на социально-профессиональную адаптацию – освоение системы взаимоотношений в коллективе, новой социальной роли, приобретения профессионального опыта и в дальнейшем самостоятельное выполнение профессионального труда.

Список литературы

1. Мировоззренческая направленность преподавания общетеоретических и специальных дисциплин в инженерно-техническом вузе (методология, методика и опыт) : научно-методическое пособие / Под ред. Е.М. Пенькова, П.И. Полухина. – М : Высшая школа, 1984. – 216 с.
2. Наумова, О.Г. Развитие естественно-научного мировоззрения студентов университета : монография / О.Г. Наумова ; Челябинск : ГОУ «Южно-Уральский научно-образовательный центр РАО», 2008. – 107 с.
3. Педагогические технологии : учеб. пособие для студентов пед. специальностей / Под общей ред. В.С. Кукушина. – Серия «Педагогическое образование». – Москва : ИКЦ «МарТ» ; Ростов н/Д : издательский центр «МарТ», 2004. – 336 с.
4. Современный словарь по педагогике / Сост. Рапацевич Е.С. – Мн. : «Современное слово», 2001. – 928 с.
5. Табачковский, В.Г. Формирование мировоззренческой культуры молодежи / В.Г. Табачковский, Н.И. Соболева, М.А. Булатов [и др.] ; отв. ред. В.Г. Табачковский ; АН УССР, институт философии. – Киев: Наук. Думка, 1990. – 312 с.

ПРОИСХОЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМОВ В БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент,
Арифуллин М.Р., Садыков А.Р.

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

Появление электронно-возбужденных частиц промежуточных и конечных продуктов экзотермических химических реакций [1], сопровождающееся свечением в видимом диапазоне длин волн, – настолько обыденное явление, которое, как считается, не требует ни детального изучения, ни особых объяснений. Просто утверждается, что энергия, выделяющаяся в процессе химической реакции, идет на возбуждение поступательных, колебательных, вращательных и электронных степеней свободы образующихся частица также исходных материалов, находящихся в тепловом контакте с продуктами. Однако электронно-возбужденные частицы часто наблюдаются в процессах без значительных температурных эффектов, например, триболюминесценция [2], сонолюминесценция [3], некоторые химические реакции в твердых телах и в ударных волнах.

В полярных сияниях причиной появления электронно-возбужденных атомов азота и кислорода и молекулярных ионов N_2^+ (основных источников световых эффектов) считаются процессы ударного возбуждения ионизации и диссоциации молекул под действием ускоренных заряженных частиц [4]. Считается, что эти атмосферные процессы подобны процессам в лабораторных газоразрядных экспериментах, где, как правило, процессы возбуждения, ионизации и излучения протекают одновременно в одном и том же объеме.

Однако в экспериментах с разделением во времени и пространстве процессов диссоциации молекул N_2 и O_2 , накопления атомов O и N в жидком гелии в основном нижнем состоянии и их рекомбинации при сверхнизких температурах [5,6] обнаружено необычное явление [7]. При незначительном повышении температуры, освобождающей диффузию стабилизированных атомов, начиналась рекомбинация, сопровождавшаяся свечением исходных атомов N или O , не участвующих в процессах рекомбинации. Наблюдаемое зеленое свечение атомов N с длиной волны 520 нм соответствовало дважды запрещенному переходу $^2D \rightarrow ^4S$

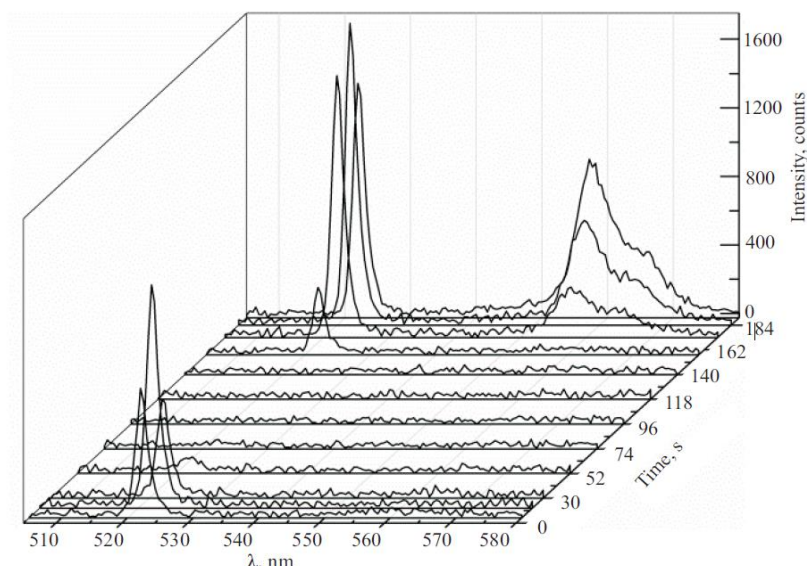
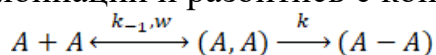


Рисунок – 1 динамика спектров термолюминесценции при “замедленном” прогреве образца, приготовленного путем конденсации газовой смеси, содержащей атомы N и O; линия α -группы атомов N сосредоточена около 520 нм, линия β -группы атомов O – около 560 нм.

Предложенная в [7] гипотеза о передаче энергии, выделенной при рекомбинации, остающимся атомам не способна объяснить наблюдаемое явление. Во первых, прямое электромагнитное возбуждение не способно перевести атомы N из основного в возбужденное состояние. Во-вторых, промежуточная среда, состоящая из атомов гелия, не способна передать и механическое воздействие энергии рекомбинации. Появление в «холодной» среде электронно возбужденных атомов азота в 2D состоянии однозначно указывает на их участие в высокоэнергетическом процессе и единственным таким процессом являются акты рекомбинации – удачные или неудачные.

В данной работе предлагается механизм возбуждения исходных атомов в результате «неудачных» попыток рекомбинации по аналогии со спин-селективными химическими процессами, допускающими рекомбинацию радикальных пар только в суммарном синглетном состоянии [8,9]. В таких процессах радикалы, избежавшие рекомбинации из-за спиновой селективности процесса, оказываются в состояниях, отличных от исходного, и содержащих примесь возбужденного спинового состояния.

Квантовомеханический анализ процессов возбуждения основан на модельной реакции двух атомов A, которые при встрече с вероятностью w могут либо рекомбинировать в диамагнитную молекулу $(A-A)$ с константой скорости k , только если находятся исключительно в состоянии $|\psi\rangle$, либо покинуть зону рекомбинации и разойтись с константой скорости k_1



В начальный момент времени оба атома A находятся в основном энергетическом состоянии $|\phi_0\rangle$, состояние двух атомов $|\Phi_0\rangle = |\phi_0(1)\rangle|\phi_0(2)\rangle$, состояние контактного комплекса $|\Psi\rangle = U|\Phi_0\rangle$. Квантовая эволюция системы атомов описы-

ваются уравнениями Неймана-Лиувилля для матриц плотности ρ_A пар атомов ($A + A$) и ρ_{AA} их контактного комплекса (A, A)

$$d\rho_A/dt = -i\hbar[H, \rho] - w\rho_A + k_{-1}U^{-1}\rho_{AA}U,$$

$$d\rho_{AA}/dt = +wU\rho_AU^+ - (k/2)\{P_\psi\rho_{AA} + \rho_{AA}P_\psi\} - k_{-1}\rho_{AA},$$

где $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ - оператор проектирования в состояние $|\psi\rangle$. Квазистационарное решение второго уравнения позволяет представить первое уравнение в следующем виде

$$d\rho_A/dt = -i\hbar[H, \rho] - (k/2)\{P_\psi'(U^{-1}\rho_{AA}U) + (U^{-1}\rho_{AA}U)P_\psi'\},$$

где $P_\psi' = U^{-1}P_\psi U$ - отображение оператора проектирования P_ψ на пространство состояний атомных пар ($A + A$). Выделяя из полной матрицы плотности ρ_A два блока $\rho_A' = P_\psi'\rho_AP_\psi'$ и $\rho_A'' = (1 - P_\psi')\rho_A(1 - P_\psi')$, можно легко показать, что после выхода из контактного комплекса пары атомов ($A + A$), находящиеся в состоянии ρ_A'' не могут и не будут рекомбинировать, так как $(1 - P_\psi')P_\psi' = 0$. Состояние этих пар атомов описывается матрицей плотности $\rho_A'' = (1 - P_\psi')|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0|(1 - P_\psi')$ или ненормированным вектором состояния

$$|\Phi_1\rangle = (1 - P_\psi')|\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle - U^{-1}P_\psi U|\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle - U^{-1}|\psi\rangle\langle\psi|U|\Phi_0\rangle$$

Если матричный элемент $\langle\psi|U|\Phi_0\rangle \neq 0$, то ненормированный вектор состояния $|\Phi_2\rangle = \langle\psi|U|\Phi_0\rangle U^{-1}|\psi\rangle$ описывает «долю» электронно возбужденных пар атомов A , появляющихся в системе после актов «неудачной» селективной рекомбинации.

Анализ спин селективной рекомбинации атомов водорода H, находящихся в нижнем синглетном состоянии, показывал, что в результате образуются только молекулы параводорода $p\text{-H}_2$ и появляются в системе возбужденные атомы водорода в триплетном состоянии, которые могут быть источником космического радиоизлучения на длине волны 21 см (космические мазеры).

Список литературы

1. Возбужденные частицы в химической кинетике. Сборник статей. Ред.: С.Х. Бамфорд, С.Ф.Х. Типпер, Мир, Москва, 1973, 320 с.
2. Zhaofeng Wang, Fu Wang. Triboluminescence: Materials, Properties and Applications// In: Luminiscence. OLED Tecnology and Applications, IntechOpen, London, 2020, 10.5772/intechopen.78903.
3. Brenner, M.P., Hilgenfeldt, D.S/Lohse. Single-bubble sonoluminescence// *Reviews of Modern Physics*. 2002. V. 74. No 2. P. 425–484.
4. E. Sandholt, H.C. Carlson; A. Egeland, Optical Aurora. In: Dayside and Polar Cap Aurora. Astrophysics and Space Science Library, V. 270. Springer, Dordrecht, 2004, https://doi.org/10.1007/0-306-47969-9_3
5. Межов-Деглин, Л.П. Примесные нанокластерные структуры в жидком гелии// *Успехи физических наук*. 2005. Т. 48. No 9. С. 1061–1070.
6. Gordon, E.B. Condensation of impurities in liquid and solid helium// *Low temperature physics*. 2004. V. 30. No 10. P. 1009-1018.
7. Khmelenko, V.V., Krushinskaya I.N., Boltnev R.E., Bykhalo I.B., A.A. Pelmenev, D.M. Lee. Dynamics of thermoluminescence spectra of impurity– helium

condensates containing stabilized nitrogen and oxygen atoms// Low Temperature Physics, 2012, V. 38, No. 8, pp. 871–883.

8. Бучаченко, А.Л. Химическая поляризация электронов и ядер. Наука, Москва, 1974, 246 с.

9. Бучаченко, А.ЛР.З. Сагдеев, К.М. Салихов, Магнитные и спиновые эффекты в химических реакциях, Новосибирск, Наука. 1978. 296 с.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА И КЛЕТОЧНЫМИ СИСТЕМАМИ

Бутаева Л.А.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Аннотация

Наночастицы серебра являются одним из наиболее важных материалов в индустрии нанотехнологий. Изучена антибактериальная активность наночастиц борат-серебро, цитрат-серебро и ПВП-серебро. Также имеются данные о том, что отдельные и различные белковые компоненты могут давать «белковую коронную сигнатуру», связанную с размером и/или поверхностью кривизны наночастиц серебра. Следовательно, образование белковых корон наночастиц серебра, а также другие клеточные биофизико-химические механизмы важны для наномедицины и нанотоксикологии.

Информация, содержащаяся в статье, может быть полезна исследователям для улучшения биотехнологических применений наночастиц серебра и решения связанных с этим проблем безопасности.

Interactions between silver nanoparticles and cellular systems

Butaeva L.A. 1st year master's student

l.butaeva@inbox.ru

**Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
"Orenburg State University", Orenburg**

Annotation

Silver nanoparticles are one of the most important materials in the nanotechnology industry. The antibacterial activity of borate-silver, citrate-silver and PVP-silver nanoparticles has been studied. There is also evidence that individual and different protein components can give a "protein corona signature" associated with the size and/or curvature surface of silver nanoparticles. Consequently, the formation of protein crowns of the rib nanoparticles, as well as other cellular biophysico-chemical mechanisms, are important for nanomedicine and nanotoxicology.

The information contained in the article may be useful to researchers for improving biotechnological applications of silver nanoparticles and solving related safety problems.

Важные аспекты взаимодействия между наночастицами серебра и клеточными системами

Цитотоксичность и генотоксичность наночастиц серебра зависят от многих факторов (например, концентрации, дисперсии, размера и функционализации поверхности) [1–4]. Например, в сообщениях указывается, что размер наночастиц серебра является важным фактором цитотоксичности и генотоксичности, вероятно, действующим через механизмы апоптоза и некроза [5, 6]

Были культивированы и изучены многие типы клеток, которые взаимодействуют с наночастицами серебра, включая эритроциты, клетки печени крыс BRL3A, нейроэндокринные клетки PC-12, стволовые клетки зародышевой линии GSCs, RBE4. эндотелиальные клетки головного мозга крысы, клетки аденокарциномы молочной железы человека MCF-7, клетки печени человека HepG2, клетки бронхиального эпителия BEAS-2B, альвеолярные эпителиальные клетки легкого A4549 и мезенхимальные стволовые клетки человека hMSC (рис. 2) [2, 7–19]. К настоящему времени данные, собранные *in vitro* и *in vivo*, показывают, что продукция активных форм кислорода (АФК) играет важную роль в токсических эффектах наночастиц серебра и ответственна за многие изменения (например, молекулярные и биохимические) связанные с генотоксичностью в культивируемых клетках (например, разрыв ДНК) [20]. В литературе также указывается, что растворение наночастиц серебра может играть ключевую роль в их токсичности. Более того, многие исследования предполагают, что антимикробная активность наночастиц серебра в отношении различных типов патогенов зависит от окислительного процесса.

При исследовании биологической активности наночастиц серебра важно понимать, что наночастицы всегда будут взаимодействовать с белковой средой, такой как среда для культивирования клеток или бактериальная культура, до их биологического действия. Следовательно, наличие белковой короны может иметь огромное значение для их биологической активности. Следовательно, важно рассмотреть эти темы и их конкретное отношение к взаимодействиям наночастиц серебра с биологическими системами [21].

В одной из первых работ по белковым коронам использовалась структура молекулы бычьего сывороточного альбумина (БСА), поскольку БСА является адекватной модельной системой для изучения взаимодействий наночастицы с белком. В этом исследовании две химически синтезированные наночастицы серебра диаметром 20 нм (3×10^{14} нм² мл⁻¹ площади поверхности на мл) или диаметром 40 нм (3×10^{15} нм² мл⁻¹), покрытые цитратом, и наночастицы серебра размером 70 нм. закрытые поливинилпирролидоном (ПВП), инкубировали с БСА. Содержание α -спирали белка анализировали с помощью спектроскопии кругового дихроизма, основанной на различной спектральной интенсивности при 208 и 220 нм. В качестве вторичных структурных элементов БСА в основном содержит α -спирали, и потеря структуры этого белка показывает степень нарушения взаимодействия между БСА и наночастицами. Сигнал БСА уменьшался с увеличением площади поверхности покрытых цитратом наночастиц серебра, присутствующих в смеси. Авторы показали, что площадь поверх-

ности наночастиц, необходимая для удаления свободного белка из объема раствора, хорошо соответствует расчетному количеству белка, которое может быть адсорбировано в монослой на поверхности наночастиц. По сравнению с наночастицами серебра, стабилизированными цитратом, взаимодействие БСА с наночастицами серебра, стабилизированными ПВП, показало другую картину. Хотя поведение сигнала показало сходные аспекты со спектрами для наночастиц серебра, покрытых цитратом, при увеличении площади поверхности наночастиц наблюдалось совершенно другое поведение. Полоса при 208 нм значительно уменьшилась по сравнению со вторым относительным минимумом примерно при 220 нм, что полностью отличалось от наночастиц цитрат-серебро и, вероятно, означает, что механистическая интерпретация более сложна, чем в случае цитрата.

Треуэль и др. [22] продемонстрировали, что поведение белков (таких как BSA) по отношению к наночастицам может сильно зависеть от присутствия полимерных покрытий, как обсуждалось ранее. Рамановский анализ с улучшенной поверхностью спектроскопию использовали для дальнейшего выяснения связывания белка с поверхностями серебра. Первая интерпретация различий в аффинности связывания для наночастиц цитрата серебра и наночастиц серебра из ПВП заключалась в том, что сильное взаимодействие между серосодержащими группами в белке и металлической поверхностью предотвращалось при наличии полимерного покрытия. Авторы предположили, что эта информация может принести пользу нанотоксикологии, которую можно использовать для улучшения наномедицинских приложений. Используя широкий спектр полимерных покрытий поверхности, можно оптимизировать биологический транспорт и медицинское действие наночастиц. В случае многобелковых корон, имитирующих реальные ситуации *in vivo*, конкуренция между белками, присутствующими в среде, очень выражена, поэтому свойства поверхности наночастиц становятся еще более актуальными.

Аналогичные результаты были опубликованы с различными методологиями взаимодействия альбумина с наночастицами серебра [23, 24]. Подила и др. [25] исследовали физиологические и химические взаимодействия простой белковой короны, изучая комбинацию определенного белка, такого как БСА, с наночастицами серебра, стабилизированными ПВП и цитратом. Изображения ПЭМ подтвердили, что непокрытые наночастицы серебра, полученные с помощью лазерной абляции (наночастицы La-серебра), имели сферическую форму с унимодальным распределением по диаметру (24 нм). Средний диаметр наночастиц серебра, покрытых цитратом и ПВП, составлял примерно 20 нм. При исследовании связывания белков к суспензии наночастиц серебра (10 мкМ) добавляли адекватное количество БСА (0–15 нМ) и тщательно перемешивали путем перемешивания для достижения хорошей дисперсии. Затем суспензии инкубировали при 37°C в течение 1 часа.

Плазма крови человека

Наночастицы серебра могут обеспечивать антимикробную эффективность при использовании в качестве покрытий на нескольких биомедицинских

устройствах. Поэтому очень важно понимать взаимодействие наночастиц серебра с компонентами крови (например, эритроцитами, лейкоцитами, белками плазмы и т. д.) [12, 26]. В плазме человека типичная белковая корона наночастиц состоит из таких белков, как ЧСА, иммуноглобулины, фибриноген, аполипопротеины, трансферрин, белки комплемента и гемоглобин. Недавно с помощью поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии (SERS) сообщалось о взаимодействии наночастиц серебра с нормальной и раковой плазмой человека, собранной у пациентов. В данном конкретном случае действие белков и наночастиц серебра было использовано в качестве маркеров для дифференциации нормальной и раковой плазмы человека. Заметный пик SERS связан с полосой амида I человеческого сывороточного альбумина (HSA), и было обнаружено, что при раке эта полоса выше, чем в нормальной плазме, что указывает на то, что повышенное относительное количество белков в конформации α -спирали было связано с развитием рака. Другими словами, селективные белки при раке взаимодействуют с наночастицами серебра иначе, чем с нормальной плазмой. Эти данные указывают на важность и роль среды во взаимодействиях белковых наночастиц. Будущие исследования, направленные на полную и точную характеристику короны, а затем на сравнение ее состава при различных заболеваниях, могут дать ценную информацию о ключевых белках, участвующих в развитии и прогрессировании определенных заболеваний.

Сывороточный альбумин человека (HSA)

Исследование Gebauer et al. [27] показали, что белковая корона, образованная сывороточным альбумином человека (ЧСА) на функционализированных цитратом наночастицах серебра, стабилизирует их против агломерации. Одним из важных аспектов этого исследования было то, что кинетику агломерации можно использовать для определения кажущегося сродства для описания равновесия адсорбции/десорбции белка. Кроме того, спектроскопия кругового дихроизма использовалась в качестве дополнительного метода для измерения сродства к тому же процессу. Кажущиеся значения KD, полученные с использованием обоих подходов, коррелировали с другими опубликованными значениями. Белковые короны, обнаруженные вокруг наночастиц серебра в этих экспериментах, состояли из монослоя белка на поверхности наночастиц, что подтверждает предыдущие результаты адсорбции ЧСА наночастицами, покрытыми полимером [28].

Биологическая активность, связанная с белковой короной

Изучена антибактериальная активность наночастиц борат-серебро, цитрат-серебро и ПВП-серебро. Наночастицы бората серебра были неактивны против сальмонелл при тестировании в бульоне Лурия-Бертани (LB), но были эффективны против сальмонелл в буфере PBS. При тестировании антибактериальной активности в PBS (кровь, сыворотка или плазма отсутствуют) различий в активности различных типов наночастиц серебра обнаружено не было. Однако кровь, сыворотка или плазма полностью ингибировали активность боратно-серебряных наночастиц, но не цитратно-серебряных или ПВП-серебряных наночастиц. Активность наночастиц PVPsilver была выше, чем у наночастиц цит-

рат-серебра. Активность наночастиц в отношении *S. typhimurium* изучали в присутствии компонентов крови мышей, тогда как в отношении *S. typhi* активность анализировали в присутствии компонентов крови человека. Сывороточный альбумин является основным компонентом крови; 3 % БСА использовали для измерения антибактериального действия исследуемых наночастиц серебра. Добавление БСА полностью устраняло антибактериальную активность борат-серебряных наночастиц, но не цитрат- или ПВП-серебряных наночастиц [29].

Наночастицы цитрата и ПВП-серебра проявляли антибактериальные свойства в бульоне LB. Авторы предположили, что это может быть связано с предотвращением взаимодействия наночастиц серебра через компоненты ЛБ или ингибированием агломерации этих частиц. Те же авторы использовали модель сальмонеллеза мышей, чтобы понять влияние покрывающего агента на наночастицы серебра. Мышей BALB/c инфицировали *S. typhimurium* (перорально/в/в) и изучали бактериальную нагрузку в брыжеечных лимфатических узлах, селезенке и печени. Никакого эффекта наночастиц серебра не наблюдалось, когда наночастицы бората-серебра (описанные как наночастицы серебра без колпачка) вводили для лечения сальмонеллезной инфекции, тогда как наночастицы цитрата и ПВП-серебра снижали бактериальную нагрузку в разных органах; Наночастицы PVPsilver показали эффективное антибактериальное действие. Наконец, при использовании боратно-серебряных наночастиц все мыши умерли через тот же период времени, что и в контроле, тогда как при пероральном и внутривенном введении наночастиц цитрата или ПВП-серебра отсрочивало смерть мышей. Однако, когда все наночастицы серебра вводили внутривенно, наночастицы ПВП и цитрата серебра защищали от смерти 60 и 40% мышей соответственно. Эта разница между устным и внутривенным введением связывали с тем, что наночастицы серебра при пероральном введении выводились с фекалиями. Авторы отметили, что это исследование было первым, в котором была показана роль покрывающего агента в антибактериальной активности в физиологических условиях на животной модели, а также то, как эффективность наночастиц серебра варьируется между PBS и биологическими жидкостями [29]. Как обсуждалось ранее, антибактериальная активность наночастиц серебра не только в исследованиях *in vitro*, но и *in vivo* зависит от покрывающих агентов.

Выводы

Основываясь на всех данных, касающихся наночастиц серебра и их белковых корон, и в зависимости от таких факторов, как размер, концентрация и функционализация поверхности, неожиданные взаимодействия с различными компонентами крови или любыми биологическими жидкостями могут помешать биомедицинским применениям, таким как антибактериальное, противогрибковое или противораковое лечение *in vivo*. Из этого обзора мы могли видеть, что круговой дихроизм широко использовался для подтверждения взаимодействий между отдельными белками и наночастицами серебра, подтверждая динамический тип взаимодействия, который мог привести к разворачиванию белка. Распространяя эти результаты на биологическую среду, изменения вторичной структуры белков в результате взаимодействия белок-наночастица

могут привести к различным реакциям клеток и процессам активации, что все еще требует дальнейшего изучения. Понимание взаимодействия этих белковых корон с клетками может привести к пониманию их иммунотоксичности или ее снижению с помощью наночастиц серебра, покрытых белковой короной. Вероятно, в ближайшем будущем мы увидим применение наночастиц серебра *in vivo*. Однако серьезной проблемой будет сравнение данных межлабораторных исследований, что оказывается затруднительным, поскольку в большинстве из них не соблюдаются одни и те же условия. Это свидетельствует о насущной необходимости лучше контролировать параметры экспериментов, а также стандартизировать некоторые условия, т.е. концентрация частиц, общая доступная площадь поверхности и условия биологических жидкостей, что позволяет создать надежную и надежную базу данных.

Список литературы

1. Durán N, Marcato PD, De Conti R, Alves OL, Costa FTM, Brocchi M (2010) Potential use of silver nanoparticles on pathogenic bacteria, their toxicity and possible mechanisms of action. *J Braz Chem Soc* 21:949–959
2. Greulich C, Diendorf J, Simon T, Eggeler G, Epple M, Koller M (2011) Uptake and intracellular distribution of silver nanoparticles in human mesenchymal stem cells. *Acta Biomater* 7(1):347–354
3. De Lima R, Seabra AB, Durán N (2012) Silver nanoparticles: a brief review of cytotoxicity and genotoxicity of chemically and biogenically synthesized nanoparticles. *J Appl Toxicol* 32:867–879
4. Lima R, Feitosa LO, Ballottin D, Marcato PD, Tasic L, Durán N (2013) Cytotoxicity and genotoxicity of biogenic silver nanoparticles. *J Phys Conf Ser* 429:012020
5. Carlson C, Hussain SM, Schrand AM, Braydich-Stolle LK, Hess KL, Jones RL, Schlager JJ (2008) Unique cellular interaction of silver nanoparticles: size-dependent generation of reactive oxygen species. *J Phys Chem B* 112:13608–13619
6. Park MV, Neigh AM, Vermeulen JP, de la Fonteyne LJ, Verharen HW, Briedé JJ, van Loveren H, de Jong WH (2011) The effect of particle size on the cytotoxicity, inflammation, developmental toxicity and genotoxicity of silver nanoparticles. *Biomater* 32:9810–9817
7. Hussain SM, Hess KL, Gearhart JM, Geiss KT, Schlager JJ (2005) In vitro toxicity of nanoparticles in BRL 3A rat liver cells. *Toxicol In Vitro* 19:975–983
8. Hussain SM, Javorina AK, Schrand AM, Duhart HM, Ali SF, Schlager JJ (2006) The interaction of manganese nanoparticles with PC-12 cells induces dopamine depletion. *Toxicol Sci* 92:456–463
9. Park S, Lee YK, Jung M, Kim KH, Chung N, Ahn EK, Lim Y, Lee KH (2007) Cellular toxicity of various inhalable metal nanoparticles on human alveolar epithelial cells. *Inhal Toxicol* 19:59–65
10. Braydich-Stolle L, Hussain S, Schlager JJ, Hofmann MC (2005) In vitro cytotoxicity of nanoparticles in mammalian germline stem cells. *Toxicol Sci* 88:412–419

11. Braydich-Stolle LK, Lucas B, Schrand A, Murdock RC, Lee T, Schlager JJ, Hussain SM, Hofmann MC (2010) Silver nanoparticles disrupt GDNF/Fyn kinase signaling in spermatogonial stem cells. *Toxicol Sci* 116:577–589
12. Choi J, Reipa V, Hitchins VM, Goering PL, Malinauskas RA (2011) Physicochemical characterization and in vitro hemolysis evaluation of silver nanoparticles. *Toxicol Sci* 123:133–143
13. Cronholm P, Karlsson HL, Hedberg J, Lowe TA, Winnberg L, Elihn K, Wallinder IO, Moller L (2013) Intracellular uptake and toxicity of Ag and CuO nanoparticles: a comparison between nanoparticles and their corresponding metal ions. *Small* 9:970–982
14. Grosse S, Evje L, Syversen T (2013) Silver nanoparticle-induced cytotoxicity in rat brain endothelial cell culture. *Toxicol In Vitro* 27:305–313
15. Ciftci H, Turk M, Tamer U, Karahan S, Menemen Y (2013) Silver nanoparticles: cytotoxic, apoptotic, and necrotic effects on MCF-7 cells. *Turk J Biol* 37:573–581
16. Faedmaleki F, Shirazi FH, Salarian A-A, Ashtiani HA, Rastegar H (2014) Toxicity effect of silver nanoparticles on mice liver primary cell culture and HepG2 cell line. *Iran J Pharm Res* 13:235–242
17. Gliga AR, Skoglund S, Wallinder IO, Fadeel B, Karlsson HL (2014) Size-dependent cytotoxicity of silver nanoparticles in human lung cells: the role of cellular uptake, agglomeration and Ag release. *Particle Fibre Toxicol* 11:11
18. Sengstock C, Diendorf J, Epple M, Schildhauer TA, Köller M (2014) Effect of silver nanoparticles on human mesenchymal stem cell differentiation. *Beilstein J Nanotechnol* 5:2058–2069
19. Massarsky A, Abraham R, Nguyen KC, Rippstein P, Tayabali AF, Trudeau VL, Moon TW (2014) Nanosilver cytotoxicity in rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) erythrocytes and hepatocytes. *Comp Biochem Phys C* 159:10–2
20. Kawata K, Osawa M, Okabe S (2009) In vitro toxicity of silver nanoparticles at noncytotoxic doses to HepG2 human hepatoma cells. *Envir Sci Tech* 43:6046–6051
21. Tran QH, Nguyen VQ, Le AT (2013) Silver nanoparticles: synthesis, properties, toxicology, applications and perspectives. *Adv Nat Sci Nanosci Nanotechnol* 4:033001
22. Treuel L, Malissek M, Grass S, Diendorf J, Mahl D, Meyer-Zaika W, Epple M (2012) Quantifying the influence of polymer coatings on the serum albumin corona formation around silver and gold nanoparticles. *J Nanopart Res* 14:1–12
23. Ravindran A, Singh A, Raichur AM, Chandrasekaran N, Mukherjee A (2010) Studies on interaction of colloidal Ag nanoparticles with bovine serum albumin (BSA). *Colloids Surf B Biointerfaces* 76:32–37
24. Mariam J, Dongre P, Kothari D (2011) Study of interaction of silver nanoparticles with bovine serum albumin using fluorescence spectroscopy. *J Fluoresc* 21:2193–2199

25. Podila R, Chen R, Ke PC, Brown JM, Rao AM (2012) Effects of surface functional groups on the formation of nanoparticle-protein corona. *Appl Phys Lett* 101:263701
26. Laloy J, Minet V, Alpan L, Mullier F, Beken S, Toussaint O, Lucas S, Dogné J-M (2014) Impact of silver nanoparticles on haemolysis, platelet function and coagulation. *Nanobiomedicine* 1:1–9
27. Gebauer JS, Malissek M, Simon S, Knauer SK, Maskos M, Stauber RH, Peukert W, Treuel L (2012) Impact of the nanoparticle–protein corona on colloidal stability and protein structure. *Langmuir* 28:9673–9679
28. Rocker C, Potzl M, Zhang F, Parak WJ, Nienhaus GU (2009) A quantitative fluorescence study of protein monolayer formation on colloidal nanoparticles. *Nat Nanotechnol* 4:577–580
29. Gnanadhas DP, Thomas MB, Thomas R, Raichur AM, Chakravorty D (2013) Interaction of silver nanoparticles with serum proteins affects their antimicrobial activity in vivo. *Antimicrob Agents Chemother* 57:4945–4955

МОДЕЛИРОВАНИЕ УДАРНО-ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ

**Зверьков Е.А., Бердинский В.Л., д-р физ.-мат. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Актуальность исследования: Моделирование поведения вещества в экстремальных состояниях, возникающих при динамическом ударно-волновом нагружении связано с необходимостью решения большого количества практических и теоретических задач. Разработка реализация в программном коде математических моделей адекватно и точно описывающих физические процессы в материалах и газах является актуальной задачей, так как помогает провести численный эксперимент без проведения экспериментов в лаборатории или проанализировать и проинтерпретировать данные полученные в ходе эксперимента. Цель работы – разработка вычислительного алгоритма, реализующего метод Ньютона, для моделирования газодинамических течений в сплошной среде.

Задачи исследования:

- Изучить численные методы моделирования ударных волн в жидкостях, газах и материалах.
- Реализовать численный алгоритм для выбранной модели
- Провести валидацию вычислительного алгоритма;
- Провести расчет модельных задач о распаде произвольного разрыва
- Выполнить расчеты для поставленной модельной задачи.

В настоящем исследовании мы составили и запрограммировали систему газодинамических уравнений в рамках адиабатического приближения для модели идеального газа, в которой была использована искусственная вязкость для предотвращения осцилляций термодинамических величин на контактных границах. Решение уравнений в конечных разностях было сделано с помощью методов Ньютона и прогонки.

Для описания распространения ударных волн в сплошной среде используются два подхода, которые связаны с выбором системы координат относительно которой мы рассматриваем нашу систему. Это подходы Эйлера и Лагранжа.

При использовании подхода Лагранжа мы наблюдаем за фиксированной частицей среды. Координаты начального положения частиц системы используются в качестве независимых переменных Лагранжа.

В подходе Эйлера мы ведем наблюдение за точками физического пространства системы. В данном подходе переменными Эйлера являются координаты точки наблюдения в пространстве.

Подходы Эйлера и Лагранжа эквивалентны друг другу, поэтому каждый из этих подходов может показать полную картину движения среды.

Уравнения системы представляют собой выражение общих законов сохранения массы, импульса и энергии. Система дифференциальных уравнений для пространственно одномерного случая с произвольной симметрией в переменных Лагранжа в отсутствие диссипативных процессов, внешних сил и источников сформулирована в работе.

Три уравнения газовой динамики содержат функции ρ, P, ε, U . В связи с этим было введено дополнительное соотношение, замыкающее систему дифференциальных уравнений. Таким соотношением является термодинамическое уравнение состояния, отметим, что уравнение состояния может быть представлено в различных формах, а не только в форме приведенной в работе.

Отдельно стоит остановиться на том факте, что при использовании уравнений в подходе Лагранжа, количество неизвестных переменных увеличивается так как необходимо дополнительно искать положение в пространстве частиц среды в каждый момент времени наблюдения. Из-за этого, к системе уравнений было добавлено ещё одно уравнение.

Три закона сохранения, уравнение состояния и уравнение для координат частиц среды $\mathbf{r}$ составляют замкнутую систему уравнений газовой динамики.

Помимо результатов вычислительных экспериментов, мы провалидировали решение сравнив его с решениями четырех тестовых задач имеющими аналитические решения. Используемые в задаче методы показывают достаточно хорошие результаты как на контактных разрывах, так и на ударных волнах в тестовых задачах. Для тестирования и валидации разработанного решения мы будем использовать широко известные тестовые задачи такие как задача Сода (Sod problem), задача Лакса (Lax problem), задача Нохы (Noh problem), задача Эйнфельдта (Einfeldt problem), так как данные задачи имеют аналитическое решение. Подробное описание каждой из этих задач вместе с граничными условиями и результаты визуализации расчетов приведены в работе. Помимо качественного (визуального) сравнения результатов расчетов выполненных с помощью нашего решения с известным эталонным (аналитическим) решением, для задачи Сода дополнительно мы провели сравнение относительно ошибки используя L_1 норму.

Полученные в работе результаты важны и с практической точки зрения, поскольку полученный алгоритм решения и код на Python можно расширить и использовать для решения более сложных задач с учетом процессов теплопроводности и решения задачи в двумерном и трехмерном пространстве в случаях разных симметрий. В работе широко представлены визуализации полученных результатов.

Результаты работы могут быть использованы для расчетов по заданным новым условиям и тестирования различных задач.

Рассмотренные, реализованные и провалидированные методы обобщаются на случай рассмотрения процессов распространения ударных волн в материалах, так как задача рассмотрения возмущения в таких средах не будет иметь принципиальных различий.

Также в работе подробно изложен алгоритм решения (выведены все необходимые соотношения, заданы начальные и граничные условия) системы с уравнением состояния в ином виде, что представляет большой интерес для моделирования возмущения в средах с реальным уравнением состояния.

Список литературы

1. Афанасьева, С.А. Исследование ударно-волновых явлений в композиционных материалах / С.А. Афанасьева, Н.Н. Белов, Ю.А. Бирюков, В.В. Бурков, В.М. Захаров, А.Н. Ищенко, А.В. Скосырский, А.Н. Табаченко, И.Е. Хорев, Н.Т. Югов // ИФЖ. – 2011. - Т.84. - N1. - С.47-56.
2. Мещеряков, Ю.И. Переход металлов в структурно-неустойчивое состояние при ударноволновом нагружении / Ю.И. Мещеряков, Н.И. Жигачёва, А.К. Диванов, И.П. Макаревич, В.К. Барахтин // ПМТФ. - 2010. - Т.51. - N5. - С.132-146.
3. Захаров, И.В. Авиационный метод высадки лесов и других видов растений с применением пиротехнических кассет / И.В. Захаров, С.Е. Алексеева // Вестник СамГТУ. Серия "Технические науки". - 2013.- N4(40). - С.106-113.
4. Лазарев, В.Б. Структурная устойчивость и динамическая прочность неорганических материалов / В.Б. Лазарев, А.С. Баланкин, А.Д. Изотов, А.А. Кожушко. - М.: Наука, 1993 – 175 с.
5. Sobolev, V.V. Physics of Super-Deep Penetration of Micro-Particles into Metals /V.V. Sobolev, S.M. Usherenko // Shock Waves in Condensed Matter: Proc. of Int. Conf . – Kiev, Ukraine, 16 - 21 September. - 2012. - P. 171-179.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ ВЫСОКИХ ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЁННЫХ СОСТОЯНИЙ МОЛЕКУЛ ПО КИНЕТИКЕ НАВЕДЁННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

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

Ишемгулов А.Т., канд. физ.-мат. наук,

Раздобреев Д.А., канд. хим. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Информация о процессах с участием высоких электронно-возбуждённых состояний (ВЭВС) молекул востребована для решения широкого круга задач в оптике, квантовой электронике, биофизике. Селективность заселения ВЭВС возрастает если применять технику ступенчатого возбуждения через нижние возбуждённые синглетные (S_1) или триплетные (T_1) уровни, используя излучение частотами ν_1 и ν_2 двух синхронизированных лазеров. Время жизни ВЭВС молекул крайне мало ($\sim 1-10$ пс) и экспериментально зарегистрировать кинетику релаксации таких состояний весьма проблематично. Об участии ВЭВС в процессах внутри- или межмолекулярного превращения поглощенной молекулами энергии опосредовано можно судить по кинетике дезактивации их S_1 или T_1 состояний. Длительность процессов с участием триплетных T_1 состояний молекул в отсутствие тушителей обычно составляет от нескольких десятков микросекунд, до десятков миллисекунд. Экспериментальные методы регистрации излучательных и безызлучательных каналов релаксации T_1 состояний молекул хорошо развиты. Информацию об особенностях релаксации долгоживущих возбужденных состояний молекул удобно получать по кинетике затухания наведенного поглощения. В настоящей работе представлены результаты исследования процессов с участием высоких триплетных T_m состояний молекул по кинетике наведенного $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения в различных средах с акцентом на возможные экспериментальные артефакты.

Объектами исследования служили растворы ксантеновых красителей (эозин, эритрозин) в воде, глицерине, этиленгликоле, пропиленгликоле, в водных растворах бычьего сывороточного альбумина (БСА), а также в плёнках поливинилового спирта (ПВС). Ксантеновые красители имеют большой квантовый выход в триплетное состояние и высокий коэффициент $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения [1-2]. Оптическая схема экспериментальной установки показана на рис. 1.

Источниками возбуждающих импульсов служили два моноимпульсных твердотельных лазера на $YAG:Nd^{3+}$ (вторая гармоника, 532 нм) (обозначены цифрами 1 и 2), а также жидкостный лазер на красителях 3. Лазер 1 возбуждал образцы в полосе поглощения $S_0 \rightarrow S_1$ (длительность импульса 10 нс, плотность мощности излучения длины волны $\lambda_1 = 532$ нм регулировалась в пределах 1-10 МВт/см²). После окончания возбуждающего импульса в результате $S_1 \rightsquigarrow T_1$

интеркомбинационной конверсии (ИКК) большая часть возбуждённых молекул красителей переходят в T_1 -состояние.

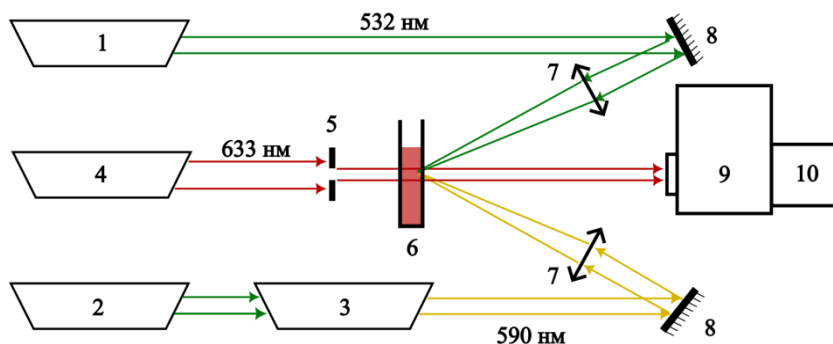


Рис. 1 Оптическая схема экспериментальной установки

Лазер 2 необходим для накачки лазера на красителях 3. Излучение лазера на красителях (использовался диапазон генерации 590-600 нм) использовалась для заселения высоких триплетных уровней молекул в результате $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения. Параметры возбуждающего импульса: длительность $\tau_{imp} = 15$ нс, плотность мощности излучения на длине волны $\lambda_2 = 590$ нм регулировалась от 1 до 10 МВт/см². С помощью автоматизированной системы синхронизации возбуждающие импульсы поступали на образец с регулируемой временной задержкой. В качестве зондирующего света использовался луч *He-Ne* лазера (4), который пропусклся через образцы: растворы красителей в кварцевой кювете толщиной 1 мм или окрашенные полимерные пленки толщиной 50 мкм. Диаметр луча, пропускаемого через диафрагму 5, составлял 1,2 мм.

По окончании импульса лазера 1 образуются молекулы в T_1 состояниях, возникает наведенное $T_1 \rightarrow T_m$ поглощение и интенсивность пропускания луча *He-Ne* лазера уменьшается на величину ΔI_1 (рис. 2А).

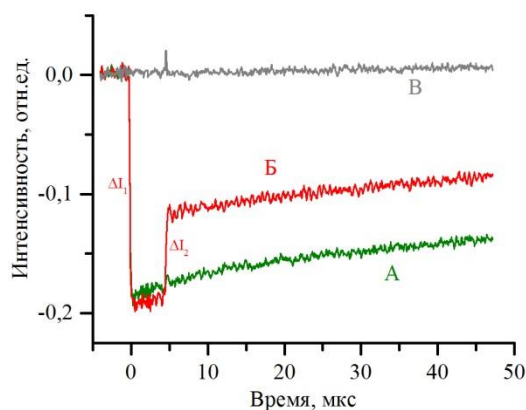


Рисунок 2 – Кинетика затухания наведенного поглощения эритрозина в ПВС при возбуждении: только лазером 1 (532 нм, (А)), лазером 1 и через 5 мкс лазером 2 (590 нм (Б)), только лазером 2 (В)

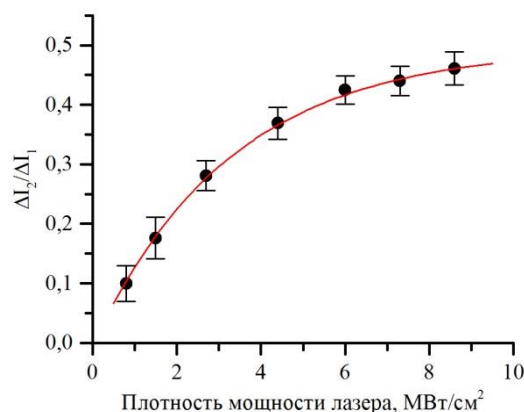


Рисунок 3 – Относительное изменение $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения эритрозина в ПВС в зависимости от плотности мощности излучения лазера 2

По мере возвращения молекул в исходное S_0 состояние интенсивность пропускания восстанавливается до начального уровня. На рис. 2А показан начальный участок кинетической кривой $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения. Длительность сигнала до полного восстановления составляет несколько миллисекунд.

Наиболее вероятными путями релаксации T_m состояний являются:

- внутренняя конверсия $T_m \rightsquigarrow T_1$;
- ИКК $T_m \rightsquigarrow S_1$.

Каждый из представленных каналов релаксации сопровождается передачей тепла в окружающую среду.

Возможны также реакции фотообесцвечивания (фотохимические реакции) и перенос энергии на акцепторы, если такие имеются в среде. Экспериментально показано, что после нескольких десятков возбуждающих импульсов заметного фотообесцвечивания образцов не происходит [1-2]. Кроме того, в спектральном диапазоне от 260 нм до 750 нм не обнаружены новые полосы поглощения, свидетельствующие о возникновении короткоживущих продуктов фотохимических реакций.

Перенос энергии на окружение в средах с полностью насыщенными связями детально исследован в работах [3]. В ПВС эффективность такого переноса не превышает 10^{-3} .

Из рис. 2А видно, что после окончания импульса лазера на красителях интенсивность наведенного $T_1 \rightarrow T_m$ поглощения ступенчато уменьшается на величину ΔI_2 . Это обусловлено ИКК $T_m \rightsquigarrow S_1$ с последующей $S_1 \rightarrow S_0$ флуоресценцией, т.е. возвратом молекул в основное S_0 состояние и, соответственно, уменьшением концентрации молекул в T_1 состояниях. Величина ΔI_2 зависит от квантового выхода $T_m \rightsquigarrow S_1$ ИКК, интенсивности возбуждающего импульса лазера на красителях и скорости $S_1 \rightsquigarrow T_1$ интерконверсии. Относительное изменение $\Delta I_2 / \Delta I_1$ интенсивности наведенного поглощения эритрозина в ПВС в зависимости от плотности мощности P излучения лазера на красителях показано на рис. 3. В диапазоне P до 3 МВт/см² зависимость близка к линейной, что указывает на поглощение молекулами в T_1 состоянии одного кванта излучения длины волны 590 нм. Отклонение от линейной зависимости при большей плотности мощности возбуждения связано с нелинейным поглощением и депопуляцией T_1 состояний.

Тепловыделение при релаксации T_m состояний по любому из указанных выше каналов оказывает большое влияние на регистрируемый сигнал пропускания образцами зондирующего луча в жидких средах. Поскольку время жизни ВЭС молекул не превышает ~ 10 пс, при высокой интенсивности возбуждения молекулы красителей за время импульса лазера 2 (~ 15 нс) могут неоднократно повторно поглощать кванты света, совершая циклические переходы $T_1 \leftrightarrow T_m$ или $T_1 \rightarrow T_m \rightsquigarrow S_1 \rightsquigarrow T_1$, каждый из которых сопровождается выделением тепла. Количество теплоты, передаваемой среде при безызлучательной релаксации ВЭС, зачастую оказывается достаточным для формирования тепловой линзы или закипания жидкости (образования пузырьков) в компактном облучаемом объёме. Эти явления становятся причиной различных артефактов при регистрации про-

пускания образцами зондирующего света при двухквантовом возбуждении молекул. Экспериментально показано, что уже при плотности мощности возбуждающего излучения лазера на красителях около 3 МВт/см^2 тепловые эффекты существенно влияют на регистрируемые сигналы (рис. 4-5).

На рис. 4 показана кинетика затухания наведенного поглощения эозина в глицерине (рис. 4А). В молекулах эозина квантовый выход $T_m \rightarrow S_1$ ИКК равен 0.71 [1] и по окончании импульса второго лазера следовало ожидать ступенчатого увеличения пропускания, аналогичного рис. 2А. Однако после окончания второго импульса интенсивность зондирующего луча, наоборот, ступенчато уменьшается («ступенька вниз»). Это объясняется рефракцией луча *He-Ne* лазера на тепловой линзе, сформировавшейся в локально разогретом облучаемом объеме жидкости. Экспериментально регистрируемая кривая после окончания импульса второго лазера на рис. 4Б фактически отражает время остывания разогретого объема и возвращения преломленного луча к своей первоначальной траектории. Это время, в зависимости от интенсивности излучения лазера на красителях, составляет от несколько миллисекунд до нескольких секунд.

В средах с меньшим, чем в воде коэффициентом температуропроводности – глицерине, этиленгликоле, пропиленгликоле – время термализации разогретой жидкости в зависимости от плотности мощности возбуждения составляло от десятых долей секунды до нескольких секунд.

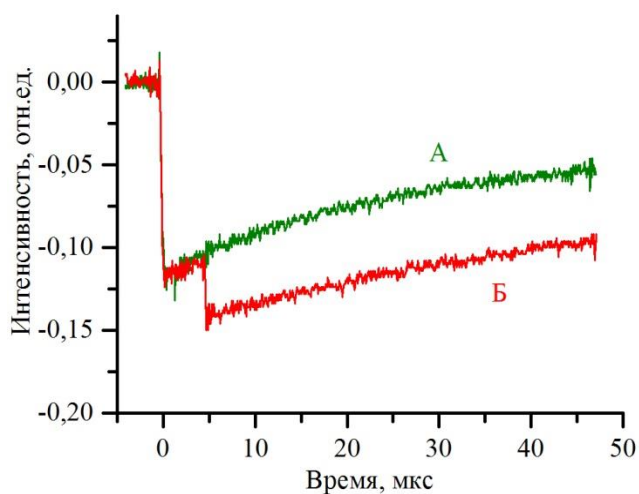


Рисунок 4 – Кинетика затухания наведенного поглощения эозина в глицерине при возбуждении: только лазером 1(532 нм) (А). Кривая восстановления траектории зондирующего луча после рефракции, при возбуждении образцов лазером 1 и через 5 мкс лазером 2(590 нм) плотностью мощности 7 МВт/см^2 (Б)

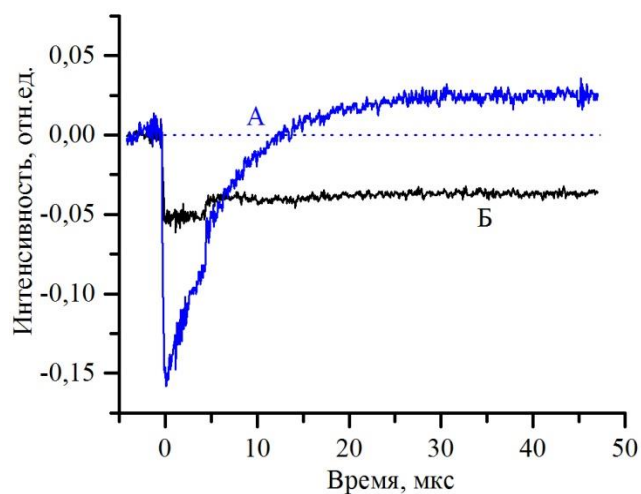


Рисунок 5 – Кинетика затухания наведенного поглощения эозина при возбуждении лазером 1 и через 5 мкс лазером 2 плотностью мощности 7 МВт/см^2 в этиленгликоле (А) и в водном растворе БСА (Б)

На рисунке 5А показана кривая изменения интенсивности зондирующего луча при ступенчатом двухквантовом возбуждении эозина в этиленгликоле. До

включения второго лазера это кинетическая кривая затухания наведенного поглощения. После окончания второго импульса интенсивность зондирующего луча закономерно уменьшается на величину ΔI_2 . После этого кривая уже не отражает только кинетику затухания наведенного поглощения, уровень сигнала поднимается выше нулевой линии (уровень нулевой линии показан пунктиром), с последующим возвращением в исходное состояние за характерное время остывания, зависящее от интенсивности накачки. Для интерпретации данного экспериментального результата высказано предположение о фокусировке зондирующего света на входной щели монохроматора после формирования в растворе тепловой линзы.

Существенно иная картина наблюдается в водных растворах БСА (рис. 5Б). Прежде всего, следует отметить существенное возрастание времени жизни (до 4 мс) триплетных состояний эозина по сравнению с водным раствором (5 мкс). Краситель и белок активно взаимодействуют, при этом молекулы красителя связанные белком локализованы в областях недоступных для кислорода. По окончании импульса второго лазера имеет место незначительное ступенчатое увеличение интенсивности сигнала (ΔI_2). Тепло переданное среде очень быстро рассеивается [4] и тепловые эффекты (как и в ПВС) в таких системах практически не проявляются. Вопрос о причинах малой величины ΔI_2 пока остается открытым.

Таким образом, по кинетике наведённого поглощения при двухквантовом ступенчатом заселении высоких электронных состояний молекул можно получить информацию об эффективности конкурирующих каналов их релаксации. При интерпретации результатов исследований в жидких растворах требуется учёт тепловых эффектов, обусловленных нагревом среды при безызлучательной релаксации ВЭВС молекул.

Список литературы

1. Летута, С.Н. Кинетика наведенного поглощения многоатомных молекул при двухквантовом возбуждении / С.Н. Летута, А.Т. Ишемгулов, Д.В. Дорофеев, Д.Е. Цюрко // Квантовая электроника, 2022. – Т. 52. – № 9. – С. 823-826.
2. Летута С.Н. Механизмы повреждения бактерий *Salmonella typhimurium* и *Staphylococcus aureus* при импульсном фотовозбуждении молекулярных сенсibilизаторов / С.Н. Летута, А.Т. Ишемгулов, А.Н. Никиян, Д.А. Раздобреев, Л.В. Галактионова, Д.В. Дорофеев, Д.Е. Цюрко // Биофизика, 2022. – Т. 67. – № 3. – С. 531-539.
3. Герко, В.И. Эффективность переноса энергии с высших триплетных уровней / В.И.Герко, Ю.Б.Шекк, И.Г.Батеха, М.В.Алфимов // Опт. и спектр., 1971. -Т. 30. - № 3 - С. 456-460.
4. Кучеренко, М.Г. Кинетика нелинейных фотопроцессов в конденсированных молекулярных системах / М.Г. Кучеренко. – Оренбург: Изд-во ОГУ, 1997.

ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ ДАТЧИКИ И ПРЕОБРАЗОВАТЕЛИ С ЭЛЕКТРОПИТАНИЕМ ПЕРЕДАЮЩЕЙ ЧАСТИ ОТ ПРИЕМНОЙ

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

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Оптоэлектронные измерительные устройства и датчики широко используются практически во всех отраслях промышленности, научных исследования, медицинских приборах и оборудовании, в электроэнергетике и ускорительной техники [1, 2]. В [3-5] для обеспечения электропитания передающих частей такого рода измерительных устройств и датчиков было предложены две схемы – одна с электропитанием передающей части от приемной по совмещенному каналу передачи информации и энергии и вторая по схеме с отдельными каналами. Это позволило сделать энергонезависимыми от места установки передающие блоки таких устройств и датчиков и как следствие существенно расширило области их применения.

Обобщенная функциональная схема оптоэлектронных датчиков и преобразователей с совмещенными каналами передачи информации и энергии показана на рисунке 1 [3-5]. Они содержат:

- приемную часть, включающую источник оптической энергии, фотоприемный блок, блок уплотнения, источник электропитания, общий для фотоприемного блока и источника оптической энергии;

- передающую часть, основными элементами которой являются параметрический преобразователь устройством преобразования электрических сигналов в световые, фотоэлектрический блок, преобразователь напряжения и блок уплотнения;

- волоконно-оптический канал, через который обеспечивается связь приемной и передающей частей.

Особенность этой схемы состоит в том, что передача энергии электропитания к передающей части и в обратном направлении передача информации осуществляется по одному и тому же каналу. Это обстоятельство дает возможность проводить не только бесперебойное электропитание передающей части, но и обеспечивает необратимого обесцвечиваний лазерным излучением стабильных полос поглощения, наведенных радиацией в световодах либо одновременно с работой оптоэлектронной системы, либо в те промежутки времени, когда она не работает [4].

Конструктивно передающие и приемные блоки этих устройств выполняются в виде самостоятельных частей, связанных между собой волоконно-оптическим каналом. Причем передающая часть располагается непосредственно на диагностируемом объекте, а приемная часть в любом удобном месте, там, где есть возможность ее электропитания от сети. Эти блоки электрически не связаны между собой. Они изолированы через световод волоконно-оптического

канала, который и обеспечивает передачу информации от передатчика к приемнику и необходимой для работы передатчика энергией в обратном направлении.

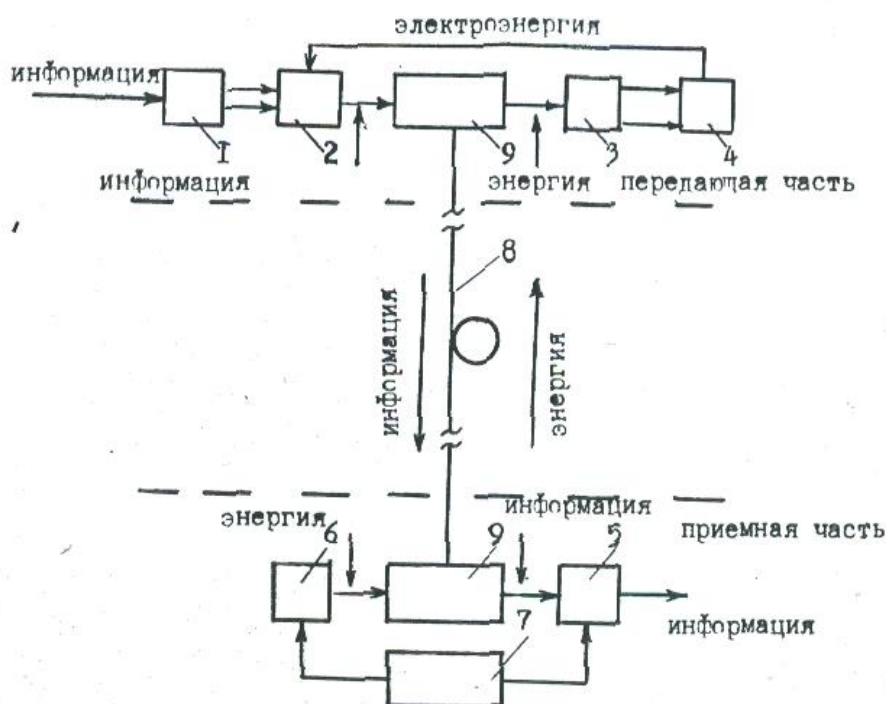


Рисунок 1 - Обобщенная функциональная схема оптоэлектронных датчиков и преобразователей с электропитанием передающей части от приемной на основе совмещенного канала передачи информации и энергии.

1- первичный преобразователь, 2- параметрический преобразователь с устройством преобразования электрических сигналов в световые, 3- фотоэлектрический блок, 4- преобразователь напряжения, 5- фотоприемный блок, 6- источник оптической энергии, 7- источник электропитания, 8- волоконно-оптический канал, 9- блоки управления

В соответствии с функциональной схемой устройства уплотнение волоконно-оптического канала обеспечивается специальными блоками [3,4]. Назначение этих блоков состоит в том, чтобы обеспечить разделение и сведение световых потоков энергетического и информационного каналов, не превышая при этом критического уровня помех в информационном канале, создаваемых в нем энергетическим каналом. Оно, это разделение, может быть осуществлено в общем случае временным, спектральным или фазовым способом [3-5].

Соответственно, обобщенная функциональная схема оптоэлектронных датчиков и преобразователей с отдельными каналами передачи информации и энергии показана на рисунке 2 [3-5]. Эти оптоэлектронные датчики и преобразователи содержат передающую и приемную части, по своему составу аналогичные варианту с совмещенным каналом, за исключением блоков уплотнения.

Особенность данной схемы реализации электропитания передающих блоков:

- возможность применения световодов различных видов;
- неограниченное число световодов, обеспечивающих передачу энергии от приемной к передающей части оптоэлектронного устройства;
- использование как когерентных, так и некогерентных источников оптического излучения в составе канала передачи энергии;
- пониженные, в сравнении с вариантом совмещенных каналов передачи информации и энергии, потери в энергетическом канале из-за отсутствия оптических систем сведения и разделения информации и энергии;

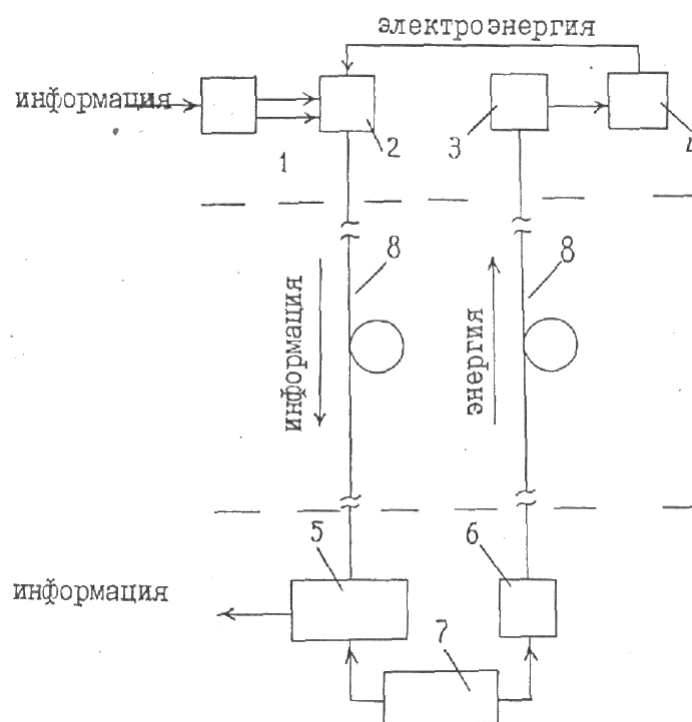


Рисунок 2 - Обобщенная функциональная схема оптоэлектронных датчиков и преобразователей с электропитанием передающей части от приемной с использованием специального волоконно-оптического канала

1- первичный преобразователь, 2- параметрический преобразователь с устройством преобразования электрических сигналов в световые, 3 - фотоэлектрический блок, 4 - преобразователь напряжения, 5 - фотоприемный блок, 6 - источник оптической энергии, 7 - источник электропитания, 8 - световоды волоконно-оптического канала

Ниже, в этой статье представлен анализ метрологических параметров построенных по этим схемам оптоэлектронных измерительных устройства и датчиков.

Для них статистические характеристики в общем случае описываются выражением:

$$Y_{\text{вых}} = Y_0 + \prod_{m=1}^n k_m \cdot X_{\text{вх}} \quad (1)$$

где: Y_0 -выходной сигнал при отсутствии модулирующей величины $X_{\text{вх}}$,
 $k_m = \frac{\Delta Y_m}{\Delta X_m}$ -коэффициент преобразования m -го преобразователя.

Практически всегда можно добиться $Y_{\text{вых}} = 0$ при $X_{\text{вх}} = 0$ и соответственно

$$Y_{\text{вых}} = \prod_{m=1}^n k_m \cdot X_{\text{вх}} \quad (2)$$

Применительно к рассматриваемым схемам построения оптоэлектронных измерительные устройства и датчиков уравнение (2) можно представить в виде:

$$Y_{\text{вых}} = k_1 k_2 X_{\text{вх}} \quad (3)$$

Правомерность представления для рассматриваемых датчиков уравнения (2) в виде (3) обусловлена тем, что оптическим излучением, передающим энергию питания от их приемной части к передающей, обеспечивается еще и защита световода волоконно-оптического датчика от воздействия радиации, исключая тем самым прогрессирующую погрешность всего устройства. Кроме того, эти преобразователи если и имеют дрейф, связанный с изменением параметров компонент на которых они построены, то его скорость очень мала, поэтому им также можно пренебречь. Эти обстоятельства дают возможность классифицировать далее все составляющие погрешности по признаку слабой или сильной взаимной корреляционной связи и по (2) и (3) результирующую погрешность определять по погрешности промежуточных преобразователей.

В рамках этого подхода [6] результирующую относительную погрешность γ_{Σ}^N определяемую данным видом дестабилизирующего воздействия определяется соотношением

$$\gamma_{\Sigma}^N = \sum \gamma_m^n \quad (4)$$

где N – индекс, означающий вид дестабилизирующего воздействия,

$\gamma_m^N = \frac{1}{k_m} \cdot \frac{\partial k_m}{\partial N} \cdot dN$ - относительная погрешность m –го преобразователя в заданном диапазоне $X_{\text{вх}}$ от воздействия факторов N

Соответственно результирующую погрешность, γ_{Σ} определяемую всем набором внешних воздействий можно вычислить из соотношения:

$$\gamma_{\Sigma}^2 = \sum_{i=1}^m (\gamma_{\Sigma}^i)^2 \quad (5)$$

Для рассматриваемых схем построения оптоэлектронных датчиков и преобразователей, основным фактором определяющим погрешность является изменение окружающей температуры, нестабильность источников питания, а также разъюстировка оптических элементов. Влияние разъюстировки оптических элементов на погрешность этих оптоэлектронных датчиков и преобразователей, несмотря на то, что передача информации от их передающих части к приемной осуществляется кодированными сигналами, обусловлено тем, что она приводит к изменению энергии, передаваемой в обратном направлении от приемной части к передающей. Это обстоятельство может привести к изменению напряжения питания параметрических преобразователей, и соответственно к изменению частоты параметрических преобразователей без воздействия измеряемого физического поля.

Пользуясь (4) для оптоэлектронных датчиков и преобразователей, построенных по схеме на рисунке 1 и рисунке 2 составляющую погрешности, обусловленной влиянием температуры может быть представлена в виде:

$$\gamma_{\Sigma}^t = \gamma_1^t + \gamma_2^t = \sum_{m=1}^2 \gamma_m^t \quad (6)$$

Составляющая погрешности, вызванная влиянием нестабильности источника питания в виде:

$$\gamma_{\Sigma}^{U_n} = \gamma_6^{U_n} + \gamma_5^{U_n} = \sum_{m=1}^2 \gamma_m^t \quad (7)$$

а составляющая погрешности, вызванная влиянием разбюстировки оптических элементов в виде:

$$\gamma_{\Sigma}^l = \gamma_6^l + 2\gamma_9^l + \gamma_3^l \quad (8)$$

для оптоэлектронных датчиков и преобразователей, построенных по схеме на рисунке 1 и в виде:

$$\gamma_{\Sigma}^l = \gamma_6^l + \gamma_3^l \quad (9)$$

для оптоэлектронных датчиков и преобразователей, построенных по схеме, показанной на рисунке 2.

Соответственно результирующая погрешность для оптоэлектронных датчиков и преобразователей по схеме, показанной на рисунке 1, если уплотнение временное, имеет вид

$$\gamma_{\Sigma} = \sqrt{(\gamma_1^t + \gamma_2^t)^2 + (\gamma_6^{U_n} + \gamma_5^{U_n})^2 + (\gamma_6^l + 2\gamma_9^l + \gamma_3^l)^2} \quad (10)$$

и

$$\gamma_{\Sigma} = \sqrt{(\gamma_1^t + \gamma_2^t)^2 + (\gamma_6^{U_n} + \gamma_5^{U_n})^2 + (\gamma_6^l + \gamma_3^l)^2} \quad (11)$$

для оптоэлектронных датчиков и преобразователей, построенных по схеме, показанной на рисунке 2.

Если в схеме, показанной на рисунке 1, использован спектральный или фазовый метод уплотнения канала, в том случае, когда источник оптической энергии канала передачи энергии когерентный или частично когерентный и его мощность ниже порога возникновения генерации континуума или ВКР [7], а блоки уплотнения канала полностью разделяют по спектру компоненты оптических излучений передающих информацию и энергию, то результирующая погрешность также будет определяться формулой (10). В тех же случаях когда источник излучения канала передачи энергии некогерентный или частично когерентный, но его мощность превосходит порог возникновения эффекта генерации континуума, вклад в результирующую погрешность будет вносить и засветка фотоприемника канала передачи информации излучением канала передачи энергии, причем это влияние возникает даже в тех случаях, когда оптическое излучение передающее энергию непрерывно, в силу того, что меняется

среднее значение тока фотоприемника, обусловлено это фоновой засветкой и равное [8]

$$i_{\Phi} = \eta'_1 A_{\text{вх}} \Omega \int_0^{\infty} B_{\Phi}(\lambda) \eta'_2(\lambda) \varepsilon(\lambda) d(\lambda) \quad (12)$$

η'_1 - коэффициент пропускания приемной оптической системы, $A_{\text{вх}}$ - площадь входного зрачка приемного объектива, $\Omega = \pi \sin^2 \beta_1$, $2\beta_1$ - угол поля зрения приемной системы, $B_{\Phi}(\lambda)$ - спектральная плотность яркости фона, $\eta'_2(\lambda)$ - передаточная функция блока спектрального уплотнения, $\varepsilon(\lambda)$ - спектральная чувствительность фотоприемника. λ - длина волны излучения;

и как следствие возрастает требуемое пороговое значения лучистого потока на фотоприемнике, например на фоторезисторе

$$\Phi_{\Pi} = \mu_1 [(2ei + 4kT/R_H)(1 + m_2^2) \Delta f_{\text{эф}}]^{1/2} (2\alpha\varepsilon)^{-1} \quad (13)$$

где: e - заряд электрона, k - постоянная Больцмана, T - абсолютная температура, $i = i_T + i_{\Phi}$, i_T - темновой ток фотоприемника, α - относительное ухудшение отношение сигнал/шум, ε - чувствительность фотоприемника на длине волны принимаемого излучения

$$m_2 = i_A \{S_0^2 R_H^2 [i + 2kT/(eR_H)]\}^{-1} \quad (14)$$

i_A - среднее значение тока активного элемента первого каскада усиления,

S_0 - крутизна вольтамперной характеристики активного элемента, R_H - сопротивление нагрузки, $\Delta f_{\text{эф}}$ - полоса принимаемого сигнала [8].

Результирующая относительная погрешность в этом случае:

$$\gamma_{\Sigma} = \{(\gamma_1^t + \gamma_2^t)^2 + (\gamma_6^{U_n} + \gamma_5^{U_n}) + (\gamma_6^e + 2\gamma_9^e + \gamma_3^e) + (\gamma_5^{\Phi_0})^2\}^{1/2} \quad (15)$$

$\gamma_5^{\Phi_0}$ - погрешность, обусловленная засветкой фотоприемника канала передачи информации излучением канала передачи энергии.

Анализ (10, 11, 15) показывает, что наименьшее число составляющих имеет погрешность оптоэлектронных измерительных устройств и датчиков с электропитанием передающей части по отдельному волоконно-оптическому каналу. Причем, в силу того, что изменение напряжения источника питания и зависимость от колебания напряжения сети, с помощью стабилизаторов на приемной части рассматриваемых оптоэлектронных датчиков и преобразователей, можно практически свести к минимуму, а колебания источника питания передающей части, путем использования неразъемных соединений в канале передачи энергии, также могут быть исключены, погрешность всего устройства будет определяться погрешностью вида $\gamma_{\Sigma} = \gamma_{\Sigma}^e$. Таким образом, для реализации оптоэлектронных измерительных устройств и датчиков с высокими метрологическими характеристиками, также как и в случае электропитания передающей части, автономным источником, необходимо, прежде всего, использовать частотный преобразователь с высокими метрологическими характеристиками в широком диапазоне температур. В схеме с совмещенными каналами передачи энергии и информации, в соответствии с (11, 15), даже при использовании преобразователя с высокими метрологическими характеристиками, слабо зависящими от температуры в широком интервале, погрешность всей системы будет зави-

сеть еще и от мощности оптического излучения, передаваемого по световоду на передающую часть датчика, а также от длины волны этого излучения и длины световода, связывающего его приемную и передающую части. Причем, если длины волн, на которых передается информация и энергия, таковы что их можно полностью разделить системами уплотнения волоконно-оптического канала, а уровень мощности оптического излучения в канале передачи энергии, ниже порога возникновения эффекта континуума или ВКР, канал передачи энергии не ухудшает погрешности датчика. При превышении мощности оптического излучения в канале передачи энергии над порогом генерации континуума или ВКР, метрологические характеристики канала передачи информации ухудшаются независимо от соотношения частот излучения передающих информацию и энергию. Соответственно эта схема более предпочтительна для создания оптоэлектронных датчиков и преобразователей с низким энергопотреблением на передающей части.

Таким образом, из приведенного анализа можно сделать следующие выводы;

1. Схемы построения оптоэлектронных датчиков и преобразователей с системами питания передающей части от приемной позволяют исключить необходимость в источниках питания на передающей части, что существенно расширяет области их использования, обеспечивают высокую помехоустойчивость к воздействию электромагнитных помех, а схема с совмещенными каналами передачи информации и энергии еще и к воздействию радиации.

2. Схемы с отдельными каналами передачи информации и энергии не ухудшает метрологических характеристик информационно-измерительной части оптоэлектронных датчиков и преобразователей, не накладывает каких либо ограничений на структуру их передающей части связанных с ее энергопотреблением.

3. За счет взаимного влияния друг на друга оптических излучений передающих энергию и информацию вызванного эффектами генерации континуума и ВКР, схема с совмещенными каналами передачи информации и энергии, при фазовом или спектральном методах уплотнения канала вызывает ухудшение соотношения сигнал/шум информационно-измерительной части оптоэлектронных датчиков и преобразователей. Соответствующие блоки уплотнения канала, используемые в этом случае, даже если источник оптической энергии канала передачи информации когерентный или частично-когерентный, должен быть рассчитан на выделение узкого по спектру информационного сигнала на фоне широкой помехи.

Конкретные схемы построения оптоэлектронных измерительных устройств и датчиков на базе предложенных схем электропитания передающих частей от приемных представлены [3, 4].

Список литературы

1. [Александрович С.В. Основы оптоэлектроники](#). Донецк: ДонНУ, 2012. - 88 с.

2. [Гуртов В.А. Оптоэлектроника и волоконная оптика](#). Учебное пособие. - Петрозаводск: Изд-во ПетрГУ, 2005. - 239 с..
3. Кирин И.Г. К43 Фотоэлектронные трансформаторы: монография / И.Г. Кирин. –М.: Университетская книга, 2013 – 136 с.
4. Кирин И.Г. Специальные радиационно-устойчивые волоконно-оптические и оптоэлектронные датчики и системы / И.Г. Кирин –М.: Университетская книга, 2008 – 148 с
5. Кирин И.Г. [Оптоэлектронные трансформаторы тока \(обзор\)](#) [Оптоэлектроника и полупроводниковая техника](#). 1992. [№ 23](#). С. 2-23.
6. Новицкий П.В. Динамика погрешностей средств измерений. Л.: Энергоатомиздат, 1990. – 191 с.
7. Кирин И.Г. Нелинейно-оптические процессы при резонансном и нерезонансном взаимодействии лазерного излучения с прозрачными средами.//Труды юбилейного сборника ОГУ. Оренбург: Издательство ОГУ, 1996г. - 153 с., с.99-109.
8. Лебедев Е.Г., Парфирьев Л.Ф. Теория и расчет импульсных и цифровых оптико-электронных систем. Л.; Машиностроение, 2018- 191 с.

ПЕДАГОГИЧЕСКОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОБУЧЕНИЯ МАГИСТРА МЕТОДИКЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ В ВУЗЕ

Кучеренко М.А., канд. пед. наук,

Огерчук А.А., канд. пед. наук

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

С 2021-2022 учебного года на физическом факультете, для магистров направления подготовки 03.04.02 Физика, профиля «Биохимическая и медицинская физика», реализуется дисциплина «Методика преподавания физики в вузе». Новый курс потребовал предварительной разработки основных деталей предстоящей деятельности преподавателя и учащихся - проектирования компонентов, этапов и состояний педагогического процесса и действий его участников, прогнозирования различных ее результатов. Главными объектами педагогического проектирования являлись составные части педагогического процесса - педагогические ситуации с двумя субъектами деятельности (педагог и магистр) и способами их взаимодействия. Формами же педагогического проектирования стали документы, в которых с разной степенью точности было описано действие педагогического процесса.

Рассмотрим последовательно ступени педагогического проектирования обучения магистров методике преподавания физики в вузе.

Педагогическая деятельность начинается с цели, которая в компетентном подходе опирается на формируемую общепрофессиональную компетенцию «ОПК-1. Способен применять фундаментальные знания в области физики для решения научно-исследовательских задач, а также владеть основами педагогики, необходимыми для осуществления преподавательской деятельности». Целевая установка «Формирование социальных и профессиональных компетенций у обучающихся в области методики преподавания физики» определила, в свою очередь, задачи обучения с тремя необходимыми их составляющими:

- Когнитивной как знание и понимание: сущности, структуры и специфики вузовских программ по физике; основ педагогики, психологии личности, педагогической и возрастной психологии; совокупности сведений, посредством которых рационально моделируется, планируется, реализуется и оценивается с позиции эффективности инклюзивный учебный процесс;

- деятельностной как умение: организовывать предметную и метапредметную деятельность обучающихся, необходимую для успешного освоения программ вузовской физики; рационально моделировать, планировать, реализовывать и оценивать с позиции эффективности инклюзивный учебный процесс; организовывать учебно-воспитательный процесс на основе современных достижений психологии и педагогики: использовать стратегии командного со-

трудничества для достижения поставленных целей, с учетом своей роли в команде сверстников;

- ценностной как понимание, в каком культурном, этическом и правовом контексте будет реализована будущая профессиональная деятельность магистра.

Далее, на ступени моделирования были конкретизированы принципы педагогического проектирования посредством анализа предметного профессионального статуса магистров, среди которых, кроме выпускников-бакалавров направлений подготовки 03.03.02 [Физика](#), 03.03.03 [Радиофизика](#) и 12.03.04 [Биотехнические системы и технологии](#), обучались выпускники электроэнергетического факультета и медицинского университета г. Оренбурга. Принципы человеческих приоритетов и саморазвития, заявленные в [1], были интерпретированы нами в следующем виде:

- подчинение проектируемых педагогических ситуаций реальным потребностям, интересам и возможностям учащихся, с постоянной опорой на их наличный опыт профессиональной деятельности;

- выбор таких методов, средств, форм и содержания обучения, которые легко трансформируются как в сторону усложнения, так и в сторону упрощения, в каждой конкретно-возникающей учебной ситуации.

На ступени конструирования была разработана технология обучения магистров как способ реализации его содержания, предусмотренного созданной рабочей программой, представляющей систему указанных выше форм, методов и средств обучения для наиболее эффективного достижения сформулированных ранее цели и задач образовательного процесса. Содержание курса «Методика преподавания физики в вузе», рассчитанного на 32 часа контактной работы с магистрами (лекции и практические занятия), включало три модуля:

- «Психолого-педагогические и общеметодологические вопросы преподавания физики», предполагающего расширение и углубление знаний магистров в области: основ психологии студенческого возраста, психология личности, основ педагогической психологии; инклюзивного учебного процесса: моделирования, планирования, реализации и оценивания; теории и методики обучения физике как педагогической науки; знаний о физике как учебном предмете в системе высшего образования (цели, задачи и принципы преподавания физики; связь курса физики с другими учебными предметами; особенности методов обучения физике; взаимосвязь методов обучения и методов научного познания при обучении физике).

- «Методические основы преподавания физики», направленного на знание: способов подготовки учебно-методического комплекса по физике; методов, форм и средств проверки знаний и умений учащихся; приемов индивидуализации и дифференциации обучения физике; методики проведения вузовского физического эксперимента (реального и виртуального); методики обучения учащихся решению физических задач; методики проведения занятий лабораторного практикума, практических и семинарских занятий по физике; средств обобщения и систематизация знаний учащихся по физике на основе примене-

ния стратегий смыслового чтения учебного текста; способов организации учебно-исследовательской и проектной деятельности, как форм внеаудиторной работы обучающихся.

▪ «Инновационные технологии обучения», обеспечивающего теоретическое и практическое освоение технологий: смыслового чтения учебных текстов; опережающего и перевернутого обучения; технология сотрудничества.

Технология обучения магистров была выстроена в контексте активизации учебного процесса в вузе посредством применения активных и интерактивных форм проведения занятий, удельный вес которых, в соответствии с [2], должен составлять не менее 40% аудиторных занятий. Интерактивные занятия, как занятия «погруженные в общение» [3], были представлены в таких формах, как:

- психологические и преподавательские тренинги;
- семинары в режиме диалога и полилога;
- разбор конкретных проблемных ситуаций;
- ролевые игры;
- дискуссии.

Заметим, что при подготовке и проведении занятий в интерактивном режиме было важно создавать благоприятный психологический климат, продуктивную групповую учебную деятельность, продумывать обратную связь с аудиторией на основе рефлексивных подведений итогов, причин удач или неудач совместной деятельности субъектов образовательного процесса.

Контроль и оценивание в контексте компетентного подхода осуществлялся как в традиционных формах (устный опрос и письменные работы), так и с помощью формы контроля, включающей элементы разработанного нами итогового теста практических умений и анкетного обследования. Результат итогового тестирования по оценке освоения магистрами психолого-педагогических знаний и умений приведен в таблице 1.

Таблица 1 - Итоговое тестирование по оценке освоения магистрами психолого-педагогических знаний и умений

Задание	Результат выполнения задания
1. А.К. Маркова выделила девять групп педагогических умений. Из них: Вторая группа педагогических умений включает три подгруппы: ▪ умения, отвечающие на вопрос «чему учить?» ▪ умения, отвечающие на вопрос «кого учить?» ▪ умения, отвечающие на вопрос «как учить?» Четвертая группа умений – это приемы постановки широкого спектра коммуникативных задач. Шестая группа - это умение удерживать устойчивую профессиональную позицию педагога. Восьмая группа объединяет умения определять характеристики знаний учащихся в начале и в конце учебного семестра (или учебного	Верно – 33% Верно – 17% Верно – 50%

года).			
Задание: Для каждой группы приведите 1-3 примера педагогических умений.			
2. «Студент выступает в качестве субъекта учебной деятельности, которая прежде всего определяется мотивами».			Верно – 67%
Задание: а) объясните в 3-4 предложениях, что означает приведенное утверждение? б) определите иерархию мотивов студента вуза: мотив достижения; познавательный мотив; мотив общения; мотив долга.			
3. Приведите формы или методы учебной работы, которые могут безусловно относиться к формам и методам интерактивного обучения. Поясните свой выбор.			Верно – 83%
4. В таблице приведена часть содержания ОПК-3 из рабочей программы по физике для студентов-бакалавров направления подготовки <u>13.03.02 Электроэнергетика и электротехника</u>			Верно – 100% (неполно)
Код и наименование формируемых компетенций	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине, характеризующие этапы формирования компетенций	
ОПК-3 Способен применять соответствующий физико-математический аппарат, методы анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования при решении профессиональных задач	ОПК-3-В-5 Демонстрирует понимание физических явлений и умеет применять физические законы механики, молекулярной физики, термодинамики, электричества и магнетизма для решения типовых задач ОПК-3-В-6 Демонстрирует знание элементарных основ оптики, квантовой механики и атомной физики	<u>Знать:</u> <u>Уметь:</u> <u>Владеть:</u>	
Задание: Используя приложение 5, определите содержание планируемых результатов обучения по физике.			
5. Выберите по своему усмотрению педагогическую техноло-			

гию и приведите 1-3 формы текущего контроля успеваемости, промежуточных и итоговых аттестаций сформированности профессиональной компетенции ОПК-3 для студентов-бакалавров по физике.	Верно – 67%
6. Сделайте структурно-семантический анализ учебного текста «Теорема Гаусса» на основе выбранного Вами приема смыслового чтения	Верно-50%

Из содержания приведенной таблицы можно заключить:

1. В результате изучения курса «Методика преподавания физики в вузе» когнитивная составляющая (знание и понимание психолого-педагогических и общеметодологических основ преподавания) усвоена обучающимися удовлетворительно. Знания их фрагментарные, неконкретные, поверхностные.

2. Интерактивные занятия (в том числе ролевые игры) обеспечили усвоение магистрами ключевых особенностей проведения различных видов таких занятий.

3. Почти половина анкетированных не освоила приемы структурно-семантического анализа учебного текста по физике как условия различных форм продуктивной учебной коммуникации на лекции, семинаре и практическом занятии.

Сделанные выводы, как представляется, определяют пути коррекции содержания форм, средств и методов обучения, которые на данном этапе нашей образовательной практики и общих тенденций, сформулированных в [4], можно сформулировать следующим образом:

1. Выбор в качестве доминирующей технологической парадигмы смешанной модели на основе технологий модульного обучения, полного усвоения и смыслового чтения, особенности которых заявлены в [5], [6] и [7].

2. Разработка контрольных заданий и критериев оценки их выполнения для дидактических единиц на деятельностной основе, по трем уровням сформированности умений: пороговом, достаточном, высоком.

3. Использование в обучении магистров стратегий интериоризации, экстериоризации, проблематизации и рефлексии.

К вышеизложенному добавим, что в 2022-2023 учебном году на правах электронного учебно-методического издания году мы подготовили и зарегистрировали Фонд тестовых заданий для системы АИССТ по дисциплине «Методика преподавания физики в вузе» для магистров нового года обучения. Мы осознаем и готовы к тому, что педагогическое проектирование обучения – процесс динамичный, системно использующий современные требования, решения проблемы качества образования и сохранения имеющегося контингента обучающихся.

Список литературы

1. Педагогика и психология высшей школы: Учеб. пособие. – Ростов н/Д.: Феникс, 2002. – С.153-154.
2. Методика преподавания в высшей школе: учеб.-практич. пособие / В.И. Блинов, В.Г. Виненко, И.С. Сергеев. – М.: Издательство Юрайт, 2014. – С.231-235.
3. Гавронская, Ю «Интерактивность» и «интерактивное обучение» // Высшее образование в России - 2008. - №7. - С. 101-104.
4. Петрова О.В., Чепьюк О. Р., Макарова С. Д., Марики В. В., Горылев А. И. Российская магистратура будущего: четыре траектории развития// Высшее образование в России. – 2021. – Том 30, №8-9. – С.20-33.
5. Гареев В.М., Куликов С.И., Дурко Е.М. Принципы модульного обучения // Вестник высшей школы. – 1987. - №8. - С. 13-20.
6. Кучеренко, М.А. Стратегии смыслового чтения учебного текста по физике / Кучеренко М.А. – Оренбург: ОГУ, 2014. – 248 с.
7. Околелов О.П. Современные технологии обучения в вузе: сущность, принципы проектирования, тенденции развития // Высшее образование в России.– 1994. - №2.–С. 45-50.

МАГНИТНАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ДВУСЛОЙНОГО ЦИЛИНДРА С КРУГОВЫМ СЕЧЕНИЕМ МИКРОМЕТРОВОГО РАДИУСА В ГАРМОНИЧЕСКИ ИЗМЕНЯЮЩЕМСЯ ПОПЕРЕЧНОМ ПОЛЕ

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

Действие многих современных плазмонных датчиков и сенсоров основано на формировании субволнового поля, обеспечивающего передачу энергии и информации от молекулярных источников к приемникам столь же малого размера, что и сами источники [1-3]. Спектральная селективность таких устройств может быть существенно повышена в результате использования магнитооптических эффектов различного рода [4], если исследуемая система является магнитоактивной и способна создавать вокруг себя магнитные поля достаточно большой величины напряженности или модулировать характеристики этих полей.

Достаточно часто для этой цели используются проводящие наносистемы цилиндрической геометрии [4-5], в ограниченной области которых возможно возбуждение квазиодномерных бегущих плазмонных волн, либо локализованных (поперечных) поверхностных плазмонов. Широкое распространение в нанофотонике и наноплазмонике получили цилиндрические структуры такого типа как однородные наноцилиндры, нанопровода с изолирующими оболочками, а также токопроводящие нанотрубки [4-7].

В микроволновом диапазоне частот ω возникают эффекты несколько иного рода, связанные с появлением квазистационарного магнитного поля в пространстве вблизи поверхности проводников. Так, например, двуслойный проводящий цилиндр микрометрового радиуса в поперечном однородном, гармонически меняющемся с частотой ω магнитном поле, приобретает магнитную поляризацию, определяемую вектором $\mathbf{m}(t)$ двумерного дипольного магнитного момента, пропорционального напряженности поляризующего поля: $\mathbf{m}(t) = \alpha_m^{(2)} \mathbf{H}_0(t)$. Магнитная поляризуемость $\alpha_m^{(2)}$, далее обозначаемая как $\alpha(\omega) \equiv \alpha_m^{(2)}$, является комплекснозначной функцией частоты ω , и она может быть определена в приближении квазистационарного поля при достаточно малых радиусах поперечного сечения по сравнению с длиной электромагнитной волны [8]. Двумерное результирующее поле вне микропровода представляет собой сумму затравочного и индукционного полей и определяется выражением

$$\mathbf{H}^{(e)}(r, \theta, t) = \mathbf{H}_0 \exp(-i\omega t) + \frac{2\alpha(\omega)}{r^2} \left[2 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{I} \right] \mathbf{H}_0 \exp(-i\omega t). \quad (1)$$

Спин-селективные реакции парамагнитных молекул вблизи токопроводящих тел и поверхностей в переменных магнитных полях характеризуются специфической магниточувствительностью, связанной с появлением индуциро-

ванных токов как на поверхностях этих тел, так и в их объеме [3,9]. Токоведущие элементы и магистрали из пара- или диамагнитных металлов с высокой электропроводностью (Cu, Au, Ag), несмотря на отсутствие у них ферромагнитных свойств, являются эффективными трансформаторами электромагнитных полей на предоптических $\sim 10^9\text{-}10^{10}\text{ с}^{-1}$ [3] частотах за счет возникновения токов Фуко [9]. Индукционные токи в проводе создают двумерное поле $\mathbf{H}_m(t)$ магнитодипольного типа, с сильной зависимостью амплитуды $\mathbf{H}_m(\omega)$ этого поля от частоты ω внешнего однородного монохроматического магнитного поля $\mathbf{H}_0(t) = \mathbf{H}_{00} \exp(-i\omega t)$. В металлических частицах сферической формы и вне частиц, вблизи их поверхности, характеристики таких полей были проанализированы в [9]. В данной работе мы рассмотрим коаксиальную цилиндрическую систему кругового сечения, со структурой «стержень-оболочка», с проводящими слоями из металла или полупроводника.

Проводящий аксиальный стержень композита характеризуется коэффициентом электропроводности σ_1 , а его оболочка – коэффициентом σ_2 (Рис.1). В периодически изменяющемся со временем внешнем магнитном поле $\mathbf{H}_0(t)$ и в осевой части и в оболочке композита наводятся переменные токи Фуко, изменяющие магнитное поле внутри и снаружи провода. Молекулы с электронным спиновым магнитным моментом, участвующие в магниточувствительных реакциях, будут ощущать эти изменения поля, отражающиеся в модуляции выхода спин-селективных реакций [3,9].

Как и в случае металлических микрочастиц [9], токопроводящий провод с оболочкой будет создавать снаружи себя компоненту магнитного поля, сдвинутую по фазе на величину $\pi/2$ относительно колебаний внешнего поля $\mathbf{H}_0(t) = \mathbf{H}_{00} \exp(-i\omega t)$. Это позволяет разделять во времени сигналы отклика системы на каждую из смещенных по фазе компонент поля, и осуществлять независимое измерение величин выходных сигналов.

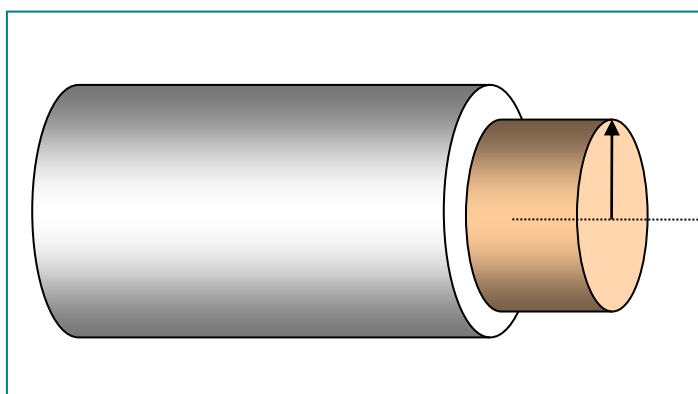


Рис.
1. Биметаллический цилиндрический провод кругового сечения $S(R_1, R_2)$ с проводящей оболочкой и внешним микрометровым радиусом R_2 . Радиус осевой жилы – R_1 .

Если циклическая частота ω изменения внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_{00} \exp(-i\omega t)$ удовлетворяет условию принятия квазистационарного приближения, уравнения для напряженностей $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r})$, ($j = 1, 2$) магнитного поля в осевой жиле ($j=1$) и оболочке ($j=2$) цилиндрического композита имеют вид

$$\nabla^2 \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) + k_j^2 \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0, (1)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0, (2)$$

где

$$k_j(\omega) = (1 + i)/\delta_j(\omega),$$

$\delta_j(\omega) = c/\sqrt{2\pi\sigma_j\omega}$ – толщина скин-слоя для металла сорта j ; $\sigma_j = \omega_{p(j)}^2/(4\pi\gamma_j)$ – проводимость этого металла. Напряженности $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r})$ в уравнениях (1)-(2) определяются через соответствующие векторные потенциалы $\mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r})$ соотношениями

$$\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{A}^{(1)}, 0 < r < R_1, j = 1 \\ \operatorname{rot} \mathbf{A}^{(2)}, R_1 < r < R_2, j = 2 \end{cases} \quad (3)$$

которые удовлетворяют таким же двумерным уравнениям Гельмгольца, как и (1)

$$\nabla^2 \mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r}) + k_j^2 \mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0. (4)$$

Следуя методу, изложенному в [8], для нахождения векторных потенциалов $\mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r})$, удовлетворяющих (4), рассмотрим соответствующее (4) скалярное уравнение Гельмгольца для аксиально симметричных скалярных функций $f_j(r)$

$$\nabla^2 f_j(r) + k_j^2 f_j(r) = 0, (5)$$

заданных в круговой и кольцевой областях, указанных при записи (3).

Как и в [8], будем искать решение для $\mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{r})$ в виде

$$\mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{r}) = (f_1(k_1 r) \mathbf{H}_{00}). \quad (6)$$

Тогда, с учетом (3), для напряженности внутри приосевого цилиндра получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(1)}(\mathbf{r}) &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} (f_1(k_1 r) \mathbf{H}_0), \\ \mathbf{H}^{(1)}(\mathbf{r}) &= \left(\frac{f_1'(k_1 r)}{r} + k_1^2 f_1(k_1 r) \right) \mathbf{H}_{00} - \left(\frac{2f_1'(k_1 r)}{r} + k_1^2 f_1(k_1 r) \right) \mathbf{n} \cdot (\mathbf{H}_{00} \mathbf{n}), \end{aligned} \quad (7)$$

где единичный вектор $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$.

Решение для функции $f_1(k_1 r)$, регулярное на оси провода, необходимо выбирать в виде

$$f_1(k_1 r) = \beta J_0(k_1 r), \quad (8)$$

где $J_0(k_1 r)$ – функция Бесселя, β – неизвестная постоянная, определяемая из условий на граничных цилиндрических поверхностях.

Решение для векторного потенциала $\mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r})$ внутри оболочки будем искать в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(2)}(\mathbf{r}) &= a_1 J_0(k_2 r) \mathbf{H}_{00} + a_2 N_0(k_2 r) \mathbf{H}_{00}, \quad (9) \\ f_2(k_2 r) &= a_1 J_0(k_2 r) + a_2 N_0(k_2 r). \end{aligned}$$

Здесь, в (9), $N_0(k_2 r)$ – функция Неймана, $a_1 a_2$ – неизвестные коэффициенты.

Тогда, с учетом (3), для напряженности поля внутри оболочки получаем

$$\mathbf{H}^{(2)}(\mathbf{r}) = \left(\frac{f_2'(k_2 r)}{r} + k_2^2 f_2(k_2 r) \right) \mathbf{H}_{00} - \left(\frac{3f_2'(k_2 r)}{r} + k_2^2 f_2(k_2 r) \right) \mathbf{n} \cdot (\mathbf{H}_{00} \mathbf{n}). \quad (10)$$

Вне слоистого цилиндра, т.е. при $r > R_2$, напряженность $\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнениям

$$\nabla^2 \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0, \text{div} \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

и тогда вводя скалярный потенциал $\varphi(r)$, удовлетворяющий уравнению Лапласа $\nabla^2 \varphi(r) = 0$ можем записать решение (11) в виде[8]

$$\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = -\nabla \varphi + \mathbf{H}_{00}, \quad (12)$$

где

$$\varphi(r) = -\alpha' V \mathbf{H}_{00} (\nabla \ln r),$$

α' – удельная дипольная магнитная поляризуемость слоистого цилиндра.

Тогда для напряженности $\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r})$ вне цилиндра можем записать

$$\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = -2\alpha'(\omega) V \nabla (\nabla \ln r \cdot \mathbf{H}_{00}) + \mathbf{H}_{00} = \frac{2\alpha'(\omega)V}{r^2} [2\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H}_{00}) - \mathbf{H}_{00}] + \mathbf{H}_{00}. \quad (13)$$

$$V = \pi R_2^2 l$$

Как и в случае слоистого шара, для четырех неизвестных коэффициентов α, β, a_1, a_2 можем записать четыре уравнения для нормальных и тангенциальных компонент векторов напряженности $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}), (j = 1, 2), \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r})$ на граничных цилиндрических поверхностях $S(R_1), S(R_2)$.

Тогда из (7) и (8) следует

$$H_n^{(j)}(\mathbf{r}) = -\frac{f'_j(k_j r)}{r} H_{00} \cos \theta, \quad (14)$$

$$H_t^{(j)}(r, \theta) = \left(\frac{f'_j(k_j r)}{r} + k_j^2 f_j(k_j r) \right) H_{00} \sin \theta. \quad (15)$$

И тогда из векторных уравнений

$$\mathbf{H}^{(1)}(R_1) = \mathbf{H}^{(2)}(R_1), \mathbf{H}^{(2)}(R_2) = \mathbf{H}^{(e)}(R_2)$$

и (14)-(15) получаем

$$f'_1(k_1 R_1) = f'_2(k_2 R_1), \frac{f'_1(k_1 R_1)}{R_1} + k_1^2 f_1(k_1 R_1) = \frac{f'_2(k_2 R_1)}{R_1} + k_2^2 f_2(k_2 R_1), \quad (16)$$

$$-\frac{f'_2(k_2 R_2)}{R_2} = 2 \frac{\alpha'(\omega)V}{R_2^2} + 1, \frac{f'_2(k_2 R_2)}{R_2} + k_2^2 f_2(k_2 R_2) = 1 - \frac{2\alpha'(\omega)V}{R_2^2}. \quad (17)$$

Подставляя (8) и (9) в (16) и (17), получаем

$$a_1 = \frac{2}{k_2^2 [J_0(k_2 R_2) - (g_1/g_2) N_0(k_2 R_2)]}, a_2 = -\frac{g_1}{g_2} a_1, \quad (18)$$

где безразмерные коэффициенты

$$g_1 = k_2 R_1 J_0(k_2 R_1) - k_1 R_1 \frac{f'_0(k_2 R_1)}{f'_0(k_1 R_1)} J_0(k_1 R_1), \quad (19)$$

$$g_2 = k_2 R_1 N_0(k_2 R_1) - k_1 R_1 \frac{N'_0(k_2 R_1)}{J'_0(k_1 R_1)} J_0(k_1 R_1). \quad (20)$$

Для коэффициентов α, β получаем

$$\alpha'(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \left[1 + \frac{k_2}{R_2} \left(a_1 J'_0(k_2 R_2) + a_2 N'_0(k_2 R_2) \right) \right], \quad (21)$$

$$\beta(\omega) = \frac{a_1 J'_0(k_2 R_1) + a_2 N'_0(k_2 R_1)}{J'_0(k_1 R_1)}. \quad (22)$$

Для проверки полученных выражений (18)-(21) примем $R_1=0$. Эта ситуация отвечает сплошному цилиндру радиуса $R=R_2$. Тогда из (19) следует $g_1=0$, а значит и $a_2=0$. Из (18) получаем

$$a_1 = \frac{2}{k^2 J_0(kR)} = \beta. \quad (23)$$

Для поляризуемости однородного цилиндра из (21) с учетом (23) получаем

$$\alpha'(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \left[1 + a_1 \frac{J'_0(kR)}{R} \right] = -\frac{1}{2\pi} \left[1 - \frac{2}{kR} \frac{J_1(kR)}{J_0(kR)} \right], \quad (24)$$

что совпадает с известным выражением для поперечной магнитной поляризуемости цилиндра [8].

Для нахождения Re и Im частей коэффициентов α, β из итоговых выражений (21)-(22) могут оказаться полезными интегральные представления функций Бесселя и Неймана, например

$$J_l(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp(-il\varphi + iz \sin \varphi) d\varphi.$$

Поскольку $k_j(\omega) = (1+i)/\delta_j(\omega)$, $\text{Re} k_j(\omega) = \text{Im} k_j(\omega) = 1/\delta_j(\omega)$. Тогда

$$\text{Re} J_l(k_j(\omega) R_j) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(\sin \varphi / \delta_j(\omega) - l\varphi) \exp(-\sin \varphi / \delta_j(\omega)) d\varphi,$$

$$\text{Im} J_l(k_j(\omega) R_j) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\sin \varphi / \delta_j(\omega) - l\varphi) \exp(-\sin \varphi / \delta_j(\omega)) d\varphi.$$

Колебания во времени напряженности магнитного поля вне объема цилиндра происходят по закону

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)}(r, \theta; t) = & \left\{ \vec{\mathbf{I}} + \frac{2 \text{Re} \alpha'(\omega) \pi R_2^2}{r^2} \left[2 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{\mathbf{I}} \right] \right\} \mathbf{H}_{00} \cos(\omega t) - \\ & - \left\{ \frac{2 \text{Im} \alpha'(\omega) \pi R_2^2}{r^2} \left[2 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{\mathbf{I}} \right] \right\} \mathbf{H}_{00} \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (25)$$

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

Список литературы

1. 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.
2. Кучеренко М.Г. Локализованные плазмоны в замагниченном наноцилиндре и сферическом слоистом композите с анизотропной сердцевинной или оболочкой // Универ. комплекс как регион. центр образ., науки и культуры: матер. Всеросс. научно-методич. конфер. – Электрон. дан. –Оренбург: ОГУ, 2016. – С. 1220-1227.
3. Кучеренко М.Г. Молекулярные фотопроцессы в трансформированных электромагнитных полях микро- и наночастиц-рефлекторов // Международ. научная конфер.«Хим. физикамолекулиполифункц. матер. Chem. physics of molecules and polyfunct. materials». Матер.конфер. Оренбург. ОГУ. 28-30 ноября 2022. С. 21-25.
4. Кучеренко М. Г., Налбандян В. М. Спектры поляризуемостей замагниченных слоистых нанокомпозитов с анизотропной сердцевинной или оболочкой и локализованными поверхностными плазмонами // Оптический журнал. 2018. -Том 85. -№ 9. -С. 1-9.
5. Сасин М.Е., Ильинская Н.Д., Задиранов Ю.М., Калитеевская Н.А., Лазаренко А.А., Мазлин В.А., Брунков П.Н., Павлов С.И., Калитеевский М.А. Цилиндрические многослойные металлодиэлектрические структуры Письма в журнал технической физики. 2015, В. 22.С. 61
6. Jin-You Lu, Kuo-Pin Chiu, Husan-Yi Chao, Yuan-Huei Chang
Multiple metallic-shell nanocylinders for surface-enhanced spectroscopes // Nanoscale Research Letters 2011, 6:173. <http://www.nanoscalereslett.com/content/6/1/173>
7. Katja Ehrhold¹, Silke Christiansen, Ulrich Goesele. Plasmonic Properties of Bimetal Nanoshell Cylinders and Spheres. Excerpt from the Proceedings of the COMSOL Conference 2008. Hannover
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
9. Кучеренко М.Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Аннигиляция молекулярных электронных возбуждений вблизи диамагнитной металлической частицы в переменном магнитном поле // Международ. научная конфер.«Хим. физикамолекулиполифункц. матер. Chem. physics of molecules and polyfunct. materials». Матер.конфер. Оренбург. ОГУ. 28-30 ноября 2022. С. 76-81.

ХАРАКТЕРИСТИКИ ИНДУКЦИОННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ СЛОИСТОЙ БИМЕТАЛЛИЧЕСКОЙ МИКРОЧАСТИЦЫ ВО ВНЕШНЕМ КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ ПОЛЕ

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

Спин-селективные реакции парамагнитных молекул вблизи проводящих частиц в переменных магнитных полях характеризуются специфической магниточувствительностью, связанной с появлением индуцированных токов на поверхности частиц, или в их объеме [1-3]. Частицы из пара- или диамагнитных металлов с высокой электропроводностью (Cu, Au, Ag), несмотря на отсутствие у них ферромагнитных свойств, являются эффективными трансформаторами электромагнитных полей на оптических [4-5] и даже дооптических $\sim 10^9$ - 10^{10} с⁻¹ [1-3] частотах. В переменных магнитных полях с частотами вплоть до 10^9 - 10^{10} с⁻¹, проводящие неферромагнитные частицы могут создавать неоднородные магнитные поля заметной величины напряженности вблизи поверхности частицы за счет токов Фуко [6]. Эти поля магнитодипольного типа характеризуются сильной зависимостью амплитуды $H_m(\omega)$ от частоты ω внешнего монохроматического магнитного поля $H_0(t) = H_{00} \exp(-i\omega t)$. В однородных металлических частицах сферической формы и вне частиц, вблизи их поверхности, характеристики таких полей были подробно проанализированы в работе [1-3]. В данной работе мы рассмотрим композитную сферическую частицу со структурой «кор-оболочка» с проводящим слоем из металла с нормальной проводимостью или сверхпроводника.

В общем случае композитный шар имеет проводящее ядро с коэффициентом электропроводности σ_1 металла или полупроводника и проводящую оболочку с аналогичным параметром σ_2 (Рис.1). При помещении шара в периодически изменяющееся со временем внешнее магнитное поле $H_0(t)$ и в коре и в оболочке наводятся переменные токи Фуко, изменяющие магнитное поле как внутри, так и снаружи композита. Молекулы с ненулевым электронным или ядерным магнитным моментом, находящиеся вблизи частицы с наведенными токами, и участвующие в магниточувствительных процессах, будут реагировать на это изменение поля, обеспечивая модуляцию выхода спин-селективных реакций [7-8]. Перспективы использования композитных магнитных материалов в современной электронике, технике сенсоров и устройств памяти представляются весьма обширными и многообещающими [9].

Важным обстоятельством является и то, что токопроводящая композитная частица будет создавать компоненту магнитного поля, сдвинутую по фазе на $\pi/2$ относительно колебаний внешнего инициирующего поля с напряженностью $H_0(t) = H_{00} \exp(-i\omega t)$. Это дает возможность разделения во времени сигнала

лов отклика системы на каждую из компонент поля и независимого измерения величин этих сигналов.

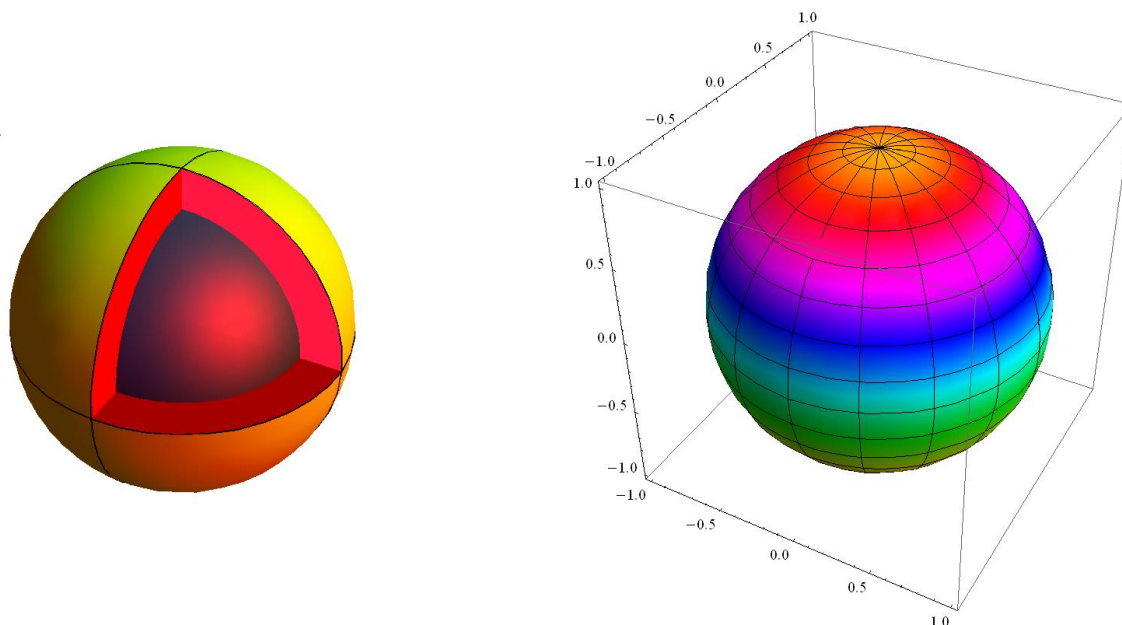


Рис. 1. Биметаллический шар с концентрической оболочкой в гармонически меняющемся магнитном поле с напряженностью $\mathbf{H}_0(t) = H_{00} \exp(-i\omega t)$ и картина распределение индуцированных токов Фуко на его поверхности (справа).

Композитный шар с проводящим ядром и оболочкой

В диапазоне частот ω изменения внешнего магнитного поля $H_{00} \exp(-i\omega t)$, оправдывающем применение квазистационарного приближения, уравнения для напряженностей $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r})$, ($j = 1, 2$) магнитного поля в коре ($j=1$) и оболочке ($j=2$) композита имеют вид

$$\nabla^2 \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) + k_j^2 \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0, (1)$$

$$\text{div} \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0, (2)$$

где

$$k_j(\omega) = (1 + i)/\delta_j(\omega),$$

$\delta_j(\omega) = c/\sqrt{2\pi\sigma_j\omega}$ – толщина скин-слоя для металла сорта j ; $\sigma_j = \omega_{p(j)}^2/(4\pi\gamma_j)$ – проводимость этого металла. Напряженности $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r})$ в уравнениях (1)-(2) определяются через соответствующие векторные потенциалы $\mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r})$ соотношениями

$$\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \text{rot} \mathbf{A}^{(1)}, & 0 < r < R_1, j = 1 \\ \text{rot} \mathbf{A}^{(2)}, & R_1 < r < R_2, j = 2 \end{cases} \quad (3)$$

которые удовлетворяют таким же уравнениям, как и (1)

$$\nabla^2 \mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r}) + k_j^2 \mathbf{A}^{(j)}(\mathbf{r}) = 0. (4)$$

Для нахождения векторных потенциалов $A^{(j)}(r)$, удовлетворяющих (4), следуя методу, изложенному в [6], вначале рассмотрим соответствующее (4) скалярное уравнение для сферически симметричных скалярных функций $f_j(r)$

$$\nabla^2 f_j(r) + k_j^2 f_j(r) = 0, (5)$$

заданных в областях, указанных при записи (3).

Как и в [6], будем искать решение для $A^{(1)}(r)$ в виде

$$A^{(1)}(r) = (f_1(k_1 r) H_{00}). (6)$$

Тогда, с учетом (3), для напряженности внутри кора получаем

$$H^{(1)}(r) = \left(\frac{f'_1(k_1 r)}{r} + k_1^2 f_1(k_1 r) \right) H_{00} - \left(\frac{3f'_1(k_1 r)}{r} + k_1^2 f_1(k_1 r) \right) n \cdot (H_{00} n), (7)$$

где единичный вектор

$$n = r/|r|.$$

Регулярное в центре кора решение для функции $f_1(k_1 r)$ необходимо выбирать в виде

$$f_1(k_1 r) = \beta j_0(k_1 r), (8)$$

где $j_0(k_1 r)$ - сферическая функция Бесселя, β – неизвестная постоянная.

Решение для векторного потенциала $A^{(2)}(r)$ внутри оболочки будем искать в виде

$$A^{(2)}(r) = a_1 j_0(k_2 r) H_{00} + a_2 n_0(k_2 r) H_{00} (9)$$

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z), n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+1/2}(z) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{-(l+1/2)}(z)$$

Здесь $j_l(k_j r), n_l(k_j r)$ - сферические, а $J_{l+1/2}(k_j r), N_{l+1/2}(k_j r)$ - «обычные» функции Бесселя и Неймана, $a_1 a_2$ – неизвестные пока коэффициенты. Функции Бесселя с полуцелым индексом выражаются через элементарные гармонические функции, и тогда

$$j_l(z) = z^l \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\sin z}{z}, j_0(z) = \frac{\sin z}{z}, j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z},$$

$$n_l(z) = -z^l \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \right)^l \frac{\cos z}{z}, n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}, n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}.$$

Решение уравнения (5) для функции $f_2(k_2 r)$ должно иметь вид

$$f_2(k_2 r) = a_1 j_0(k_2 r) + a_2 n_0(k_2 r). (10)$$

Тогда, с учетом (3), для напряженности поля внутри оболочки получаем

$$H^{(2)}(r) = \left(\frac{f'_2(k_2 r)}{r} + k_2^2 f_2(k_2 r) \right) H_{00} - \left(\frac{3f'_2(k_2 r)}{r} + k_2^2 f_2(k_2 r) \right) n \cdot (H_{00} n), (11)$$

Вне слоистого шара $r > R_2$, помещенного в непроводящую среду напряженность $H^{(*)}(r)$ удовлетворяет уравнениям

$$\nabla^2 \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0, \text{div} \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0, \quad (12)$$

и тогда вводя скалярный потенциал $\varphi(r)$, удовлетворяющий уравнению Лапласа $\nabla^2 \varphi(r) = 0$ можем записать решение (12) в виде

$$\mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) = -\nabla \varphi + \mathbf{H}_{00}, \quad (13)$$

где

$$\varphi(r) = -\alpha V \mathbf{H}_{00} \left(\nabla \frac{1}{r} \right),$$

α –удельная дипольная магнитная поляризуемость слоистого шара.

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r}) &= V\alpha \nabla \left(\nabla \frac{1}{r} \cdot \mathbf{H}_{00} \right) + \mathbf{H}_{00} = \frac{V\alpha}{r^3} [3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{H}_{00}) - \mathbf{H}_{00}] + \mathbf{H}_{00} \\ V &= (4/3)\pi R_2^3 \end{aligned} \quad (14)$$

Для четырех неизвестных коэффициентов α, β, a_1, a_2 можем записать четыре уравнения для нормальных и тангенциальных компонент векторов напряженности $\mathbf{H}^{(j)}(\mathbf{r}), (j = 1, 2), \mathbf{H}^{(e)}(\mathbf{r})$ на граничных поверхностях $S(R_1), S(R_2)$.

Так, из (7) и (8) следует

$$H_n^{(j)}(\mathbf{r}) = -\frac{2f'_j(k_j r)}{r} H_{00} \cos \theta, \quad (15)$$

$$H_t^{(j)}(r, \theta) = \left(\frac{f'_j(k_j r)}{r} + k_j^2 f_j(k_j r) \right) H_{00} \sin \theta. \quad (16)$$

И тогда из векторных уравнений

$$\mathbf{H}^{(1)}(R_1) = \mathbf{H}^{(2)}(R_1), \mathbf{H}^{(2)}(R_2) = \mathbf{H}^{(e)}(R_2)$$

и (15)-(16) получаем

$$f'_1(k_1 R_1) = f'_2(k_2 R_1), \frac{f'_1(k_1 R_1)}{R_1} + k_1^2 f_1(k_1 R_1) = \frac{f'_2(k_2 R_1)}{R_1} + k_2^2 f_2(k_2 R_1), \quad (17)$$

$$-2 \frac{f'_2(k_2 R_2)}{R_2} = 2 \frac{\alpha V}{R_2^3} + 1, \frac{f'_2(k_2 R_2)}{R_2} + k_2^2 f_2(k_2 R_2) = 1 - \frac{\alpha V}{R_2^3}. \quad (18)$$

Подставляя (8) и (10) в (17) и (18), получаем

$$a_1 = \frac{3}{2k_2^2 [j_0(k_2 R_2) - (g_1/g_2)n_0(k_2 R_2)]}, a_2 = -\frac{g_1}{g_2} a_1, \quad (19)$$

где

$$g_1 = k_2^2 R_1 j_0(k_2 R_1) - k_1^2 R_1 \frac{j_0(k_1 R_1)}{j'_0(k_1 R_1)} j'_0(k_2 R_1), \quad (20)$$

$$g_2 = k_2^2 R_1 n_0(k_2 R_1) - k_1^2 R_1 \frac{j_0(k_1 R_1)}{j'_0(k_1 R_1)} n'_0(k_2 R_1). \quad (21)$$

Для коэффициентов α, β получаем

$$\alpha(\omega) = -\frac{3}{8\pi} \left[1 + 2a_1 \frac{j'_0(k_2 R_2)}{R_2} + 2a_2 \frac{n'_0(k_2 R_2)}{R_2} \right], \quad (22)$$

$$\beta(\omega) = \frac{a_1 j'_0(k_2 R_1) + a_2 n'_0(k_2 R_1)}{j'_0(k_1 R_1)}. \quad (23)$$

В качестве проверки полученных выражений (20)-(23) рассмотрим случай $R_1=0$. Эта ситуация отвечает сплошному шару радиуса $R=R_2$. Тогда из (20) следует $g_1=0$, а значит $a_2=0$. Из (19) следует

$$a_1 = \frac{3}{2k^2 j_0(kR)} = \beta. \quad (24)$$

Для поляризуемости шара из (22) с учетом (24) получаем

$$\alpha_V(\omega) = \alpha(\omega)V = -\frac{R^3}{2} \left[1 + 2a_1 \frac{j'_0(kR)}{R} \right] = -\frac{R^3}{2} \left[1 + \frac{3j'_0(kR)}{Rk^2 j_0(kR)} \right]. \quad (25)$$

Или, в окончательном виде

$$\alpha_V(\omega) = \alpha(\omega)V = -\frac{R^3}{2} \left[1 + \frac{3(kR \operatorname{ctg}(kR) - 1)}{k^2 R^2} \right], \quad (26)$$

что совпадает с известным выражением для магнитной поляризуемости шара [6].

Хотя современные вычислительные пакеты прикладных программ (Mathematica и др.) позволяют вычислять Реи Им части коэффициентов α, β , приведем, здесь, для удобства использования итоговых выражений (19)-(23), а также (26), следующие формулы

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \sin z &= \sin x \cdot \operatorname{chy}, \operatorname{Im} \sin z = \cos x \cdot \operatorname{shy}, \\ \operatorname{Re} \cos z &= \cos x \cdot \operatorname{chy}, \operatorname{Im} \cos z = -\sin x \cdot \operatorname{shy}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha'_V(\omega) &= -\frac{R^3}{2} \left[1 - \frac{3\delta \operatorname{sh}(2R/\delta) - \sin(2R/\delta)}{2R \operatorname{ch}(2R/\delta) - \cos(2R/\delta)} \right], \\ \alpha''_V(\omega) &= -\frac{3\delta^2 R}{4} \left[1 - \frac{R \operatorname{sh}(2R/\delta) + \sin(2R/\delta)}{\delta \operatorname{ch}(2R/\delta) - \cos(2R/\delta)} \right], \end{aligned}$$

т.к. для аналитической функции $\operatorname{ctg} kR$ можем записать

$$\operatorname{ctg} kR = \frac{\sin(2 \operatorname{Re} kR) - i \operatorname{sh}(2 \operatorname{Im} kR)}{\operatorname{ch}(2 \operatorname{Im} kR) - \cos(2 \operatorname{Re} kR)}.$$

Колебания во времени напряженности магнитного поля вне объема микрочастицы происходят по закону

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(e)}(r, \theta; t) &= \left\{ \vec{\mathbf{I}} + \frac{\alpha'_V(\omega)}{r^3} \left[3 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{\mathbf{I}} \right] \right\} \mathbf{H}_0 \cos(\omega t) - \\ &- \left\{ \frac{\alpha''_V(\omega)}{r^3} \left[3 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{\mathbf{I}} \right] \right\} \mathbf{H}_0 \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (27)$$

При низких частотах реальная часть $\operatorname{Re} \alpha_V(\omega)$ становится существенно меньше по модулю, чем мнимая часть $\operatorname{Im} \alpha_V(\omega)$, и тогда более важной в (27) будет величина $\operatorname{Im} \alpha_V(\omega)$. На рис. 2 а,б представлены графики колебаний различных компонент индукции магнитного поля $B(t)$ вне однородной ($R_1=0$) микроча-

стицы с $R_2=R=20$ мкм в области полюса (рис. 2а) и в экваториальной зоне (рис. 2б) [3]. Красные кривые представляют собой изменения во времени индукции однородного внешнего поля, синие – поле, создаваемое микрочастицей, зеленые кривые – результирующее поле, как сумма затравочного и наведенного полей. В определенные моменты времени затравочное поле $\mathbf{H}_0$ обращается в нуль и в пространстве вне частицы остается лишь создаваемое ею наведенное поле $\mathbf{H}_m$.

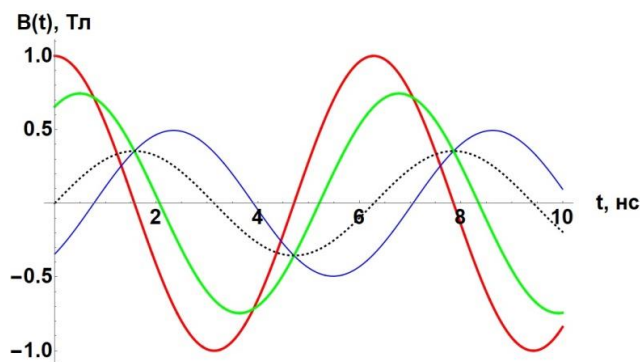


Рис. 2а. Компоненты индукции поля на полюсе частицы, $R = 30$ мкм, $\omega = 10^9 \text{ с}^{-1}$

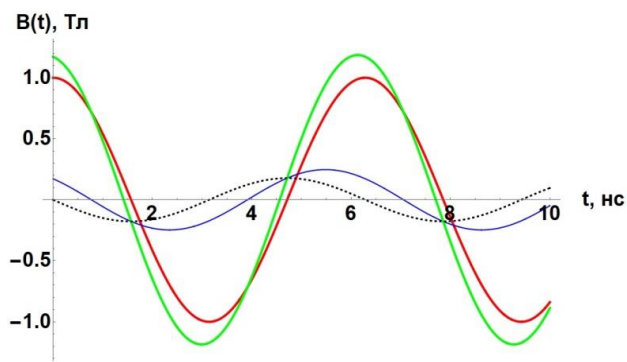


Рис. 2б. Компоненты индукции поля на экваторе частицы, $R = 30$ мкм, $\omega = 10^9 \text{ с}^{-1}$

Таким образом, в случае переменного поля магнитный момент в микрочастице будет возникать при наличии в ее структуре хорошо проводящих диалектичных или парамагнитных металлических компонентов. Результирующее квазистационарное поле представляет собой суперпозицию однородного поля и поля магнитного диполя

$$\mathbf{H}^{(e)}(r, \theta; t) = \left\{ \vec{I} + \frac{\alpha_V(\omega)}{r^3} \left[3 \frac{\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}}{r^2} - \vec{I} \right] \right\} \mathbf{H}_0 \exp(-i\omega t). \quad (28)$$

Осуществляя временную селекцию регистрируемых сигналов, сопровождающих магнитозависимые процессы вблизи микрочастиц, можно проводить анализ влияния индукционной составляющей суммарного поля на эти процессы.

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

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Триплет-триплетная аннигиляция молекулярных электронных возбуждений вблизи диамагнитной металлической наночастицы в переменном магнитном поле // Химическая физика и мезоскопия. 2023.
2. Кучеренко М.Г. Молекулярные фотопроцессы в трансформированных электромагнитных полях микро- и наночастиц-рефлекторов // Междуна-род. научная конфер. «Хим. физика молекул и полифункц. матер. Chem. physics of molecules and polyfunct. materials». Матер. конфер. Оренбург. ОГУ. 28-30 ноября 2022. С. 21-25.

3. Кучеренко М.Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Аннигиляция молекулярных электронных возбуждений вблизи диамагнитной металлической частицы в переменном магнитном поле // Международ. научная конфер.«Хим. физикамолекулиполифункц. матер. Chem. physicsofmoleculesandpolyfunct. materials». Матер.конфер.Оренбург. ОГУ. 28-30 ноября 2022. С. 76-81.
4. 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.
5. Кучеренко М.Г. Локализованные плазмоны в замагниченном наноцилиндре и сферическом слоистом композите с анизотропной сердцевинной или оболочкой // Универ. комплекс как регион. центр образ., науки и культуры: матер. Всеросс. научно-методич. конфер. – Электрон. дан. –Оренбург: ОГУ, 2016. – С. 1220-1227.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
7. Кучеренко М. Г., Неясов П. П. Особенности спиновой динамики и аннигиляции триплетных молекулярных возбуждений в нанореакторах с ферромагнитными частицами // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20, № 1. С. 33-48.
8. Кучеренко М. Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Спин-селективная кросс-аннигиляция электронных состояний мобильных триплетных молекул на поверхности ферромагнитной наночастицы // Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2019. – С. 2896-2902.
9. . Свойства 3D-композитов на основе Ивичева С.Н., Каргин Ю.Ф., Овченков Е.А., Кокшаров Ю.А., Юрков Г.Ю опаловых матриц и магнитных частиц // Физика твердого тела. 2011. –Т. 53. Вып 6. –С. 1053-1058.

АННИГИЛЯЦИЯ ТРИПЛЕТНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ ДИАМАГНИТНОГО МИКРОПРОВОДА В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

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

При помещении проводящего пара- или диамагнитного микрометрового цилиндра большой длины (микропровода) в переменное внешнее магнитное поле напряженности $H_0(t)$, направленное перпендикулярно оси цилиндра, в объеме цилиндра, а при высоких частотах поля – преимущественно на его поверхности, будут возникать индуцированные токи проводимости, формирующие вне микропровода дополнительное магнитное поле $H_m(r, \varphi|t)$ – поле магнитного диполя с моментом $m(t) = \alpha_m H_0(t)$. Результирующее внешнее магнитное поле $H^{(e)}$, в отличие от иницирующего поля $H_0(t)$, становится симметричным относительно прямой, параллельной вектору H_0 и проходящей через диаметр цилиндра. Оно приобретает зависимость лишь от координаты $r = r, \varphi$ в цилиндрической системе: $H^{(e)}(r, \varphi) = H_0 + H_m(r, \varphi)$. Если вблизи цилиндра будут находиться взаимодействующие друг с другом триплет-возбужденные молекулы, то результат их участия в спин-селективной реакции аннигиляции будет зависеть от величины локального магнитного поля $H^{(e)}(r, \varphi)$, а также времени нахождения реагентов в области действия такого поля.

В гармонически изменяющемся с частотой ω переменном поле $H_0(t) \sim \exp(-i\omega t)$ за счет индуцированных токов в проводнике возникает магнитный момент $m(t) = \alpha_m(\omega) H_0(t)$, где динамическая магнитная поляризуемость $\alpha_m(\omega)$ зависит от частоты ω и определяется выражением [1]

$$\alpha_m(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \left[1 - \frac{2}{kR} \frac{J_1(kR)}{J_0(kR)} \right] \pi R^2. \quad (1)$$

В формуле (1) $k(\omega) = \sqrt{2\pi\sigma\omega}(1+i)/c$, где электрическая проводимость σ металла есть $\sigma = \omega_{pi}^2/(4\pi\gamma)$, т.е. определяется плазменной электронной частотой ω_{pi} и частотой столкновения электронов γ . Толщина скин-слоя $\delta = (1+i)/k(\omega) = c/\sqrt{2\pi\sigma\omega}$ – действительная функция частоты ω , R – радиус сплошного проводящего цилиндра. Функции Бесселя целого порядка $J_1(kR)$ и $J_0(kR)$ являются функциями комплексного аргумента kR . Для серебра при частоте $\omega = 10^9 \text{ с}^{-1}$ получаем толщину скин-слоя $\delta = 13 \text{ мкм}$.

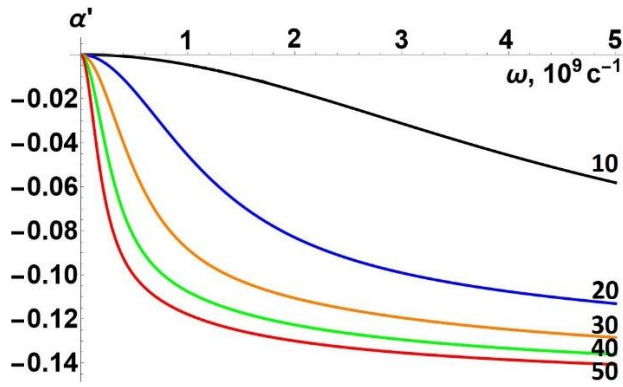


Рис. 1а. Частотные зависимости реальной части удельной (безразмерной) магнитной поляризуемости для различных значений радиусов R диамагнитного цилиндра в диапазоне 10-50 мкм

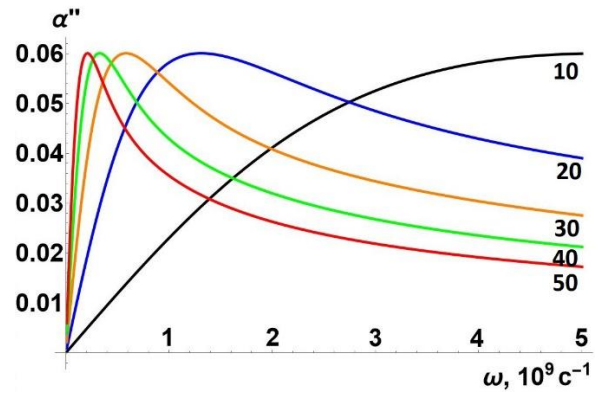


Рис. 1б. Частотные зависимости мнимой части удельной (безразмерной) магнитной поляризуемости для различных значений радиусов R диамагнитного цилиндра в диапазоне от 10 до 50 мкм

В пределе малых частот ($\delta \gg R$) выражение (1) переходит [1] в выражения

$$\alpha'_m(\omega) = -\frac{1}{24\pi} \left(\frac{R}{\delta}\right)^4 \pi R^2 = -\frac{\sigma^2 \omega^2}{6c^4} R^6, \quad \alpha''_m(\omega) = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{R}{\delta}\right)^2 \pi R^2 = \frac{\pi \sigma \omega}{4c^2} R^4. \quad (4)$$

В случае больших частот ($\delta \ll R$) получаем [1]

(5)

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

В случае произвольного соотношения между толщиной δ скин-слоя и радиуса R для нахождения поляризуемостей $Re\alpha_m(\omega)$ и $Im\alpha_m(\omega)$ необходимо определять Re и Im части функций Бесселя $J_1(kR)$ и $J_0(kR)$ в общем виде. Представление функций Бесселя через модуль и аргумент комплексного числа

$z = kR = x + iy$, то есть $z = |z| \exp(i \arctg(y/x))$ позволяет записать

$$J_m(z) = \left[\frac{|z| \exp(i\theta)}{2} \right]^m \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+m)!} \left[\frac{|z| \exp(i\theta)}{2} \right]^{2n}.$$

Тогда

$$Re J_m(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+m)!} \left[\frac{|z|}{2} \right]^{2n+m} \cos[(2n+m) \arctg(y/x)],$$

$$Im J_m(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!(n+m)!} \left[\frac{(x^2 + y^2)^{1/2}}{2} \right]^{2n+m} \sin[(2n+m) \arctg(y/x)].$$

Поскольку $k_j(\omega) = (1+i)/\delta_j(\omega)$, $Re k_j(\omega) = Im k_j(\omega) = 1/\delta_j(\omega)$. Тогда

$$x = y = R/\delta, |kR| = \sqrt{2}R/\delta, \arctg 1 = \pi/4,$$

На рис.1 представлены частотные зависимости действительной и мнимой частей магнитной поляризуемости микроцилиндра в гармонически изменяющемся поперечном магнитном поле $H_0(i\omega t)$, вычисленные с помощью (1) для различных значений радиуса R , в диапазоне от 10 до 50 мкм. С изменением ча-

стоты ω модуль реальной части $Re\alpha_m(\omega)$ монотонно растет от нуля, оставаясь отрицательным, в то время как $Im\alpha_m(\omega)$ всегда положительна, но меняется с частотой ω немонотонно, выходя на максимум $\max\{Im\alpha_m(\omega_m)\}$, положение которого сильно зависит от величины радиуса R микроцилиндра.

В случае переменного поля $H_0(t)$, магнитный момент в наночастице $m(t) = \alpha_m(\omega)H_0(t)$ будет возникать не из-за наличия в ее структуре ферромагнитного компонента [2-4], но и при наличии только лишь хорошо проводящего пара- или диамагнитного металлического компонента микроцилиндра. Результирующее квазистационарное поле, по-прежнему, как и в стационарном случае, представляет собой суперпозицию однородного поля $H_0(t)$ и поля $H_m(r, \varphi)$ магнитного диполя. В сформированном магнитном поле будут иметь место все те эффекты неоднородного поля в реакции Т-Т-аннигиляции (ТТА), которые наблюдались нами ранее [5] в случае постоянного магнитного поля.

Магнитное поле $H^{(e)}$ в области локализации реагирующих Т-молекул, формируется из двух частей: $H^{(e)}(r, \varphi) = H_0 + H_m(r, \varphi)$, где $H_m(r, \varphi)$ – поле двумерного магнитного диполя с моментом $m = \alpha_m H_0$, и имеет вид

$$H^{(e)}(r, \varphi) = H_0 + \frac{2\alpha_m}{r^2} \left[2 \frac{r \otimes r}{r^2} - \vec{I} \right] H_0. \quad (6)$$

Диамагнитный микропровод искажает однородное поле H_0 вокруг посредством наложения поля $H_m(r, \varphi)$ магнитного диполя. В результирующем неоднородном поле $H^{(e)}$ становится важным градиентный механизм эволюции спиновых состояний молекулярной Т-Т-пары. Кинетика населенности $\rho_{00}(t) = \langle 00 | \rho | 00 \rangle$ благоприятного для ТТА синглетного спинового состояния пары формируется на основе нескольких параллельно действующих механизмов [5].

Заметим, что амплитуда H_0 изначально может быть выбрана как действительная величина. Для определенности будем полагать, что вектор H_0 направлен вдоль оси x . Тензорная функция Грина $\vec{G}(r, \varphi) = \frac{2}{r^2} \left[2 \frac{r \otimes r}{r^2} - \vec{I} \right]$ магнитного диполя в (6) также действительна. Поэтому комплексной при принятых условиях является только магнитная поляризуемость $\alpha_m(\omega)$, представленная формулой (1). Именно комплексная форма поляризуемости $\alpha_m(\omega)$ будет приводить к фазовому сдвигу между колебаниями векторов H_0 и $H_m(r, \varphi)$ во времени.

Колебания индукции магнитного поля вне микрометрового цилиндра будут происходить по следующему закону:

$$H^{(e)}(r, \varphi, t) = H_0 \exp(-i\omega t) + \frac{2\alpha(\omega)}{r^2} \left[2 \frac{r \otimes r}{r^2} - \vec{I} \right] H_0 \exp(-i\omega t). \quad (7)$$

На рис. 2 представлены двумерные распределения индукции квазистационарного магнитного поля в различные моменты времени t , в пространстве вне диамагнитного проводящего цилиндра радиуса $R = 30$ мкм, находящегося в однородном переменном монохроматическом поле ($H_0 \parallel x$), гармонически изме-

няющемся с частотой $\omega = 10^9 \text{ с}^{-1}$. Моменты времени t выбирались таким образом, чтобы одна из характерных компонент индукции общего поля обращалась в нуль или принимала свое максимальное значение. Так, на рис. 2а сформировано аксиально симметричное поле двумерного магнитного диполя при обращении в нуль индукции затравочного поля; на рис. 2б – картина поля в момент максимальной магнитной поляризации цилиндра; на рис. 2в – картина поля при нулевом значении результирующей индукции в точке магнитного полюса.

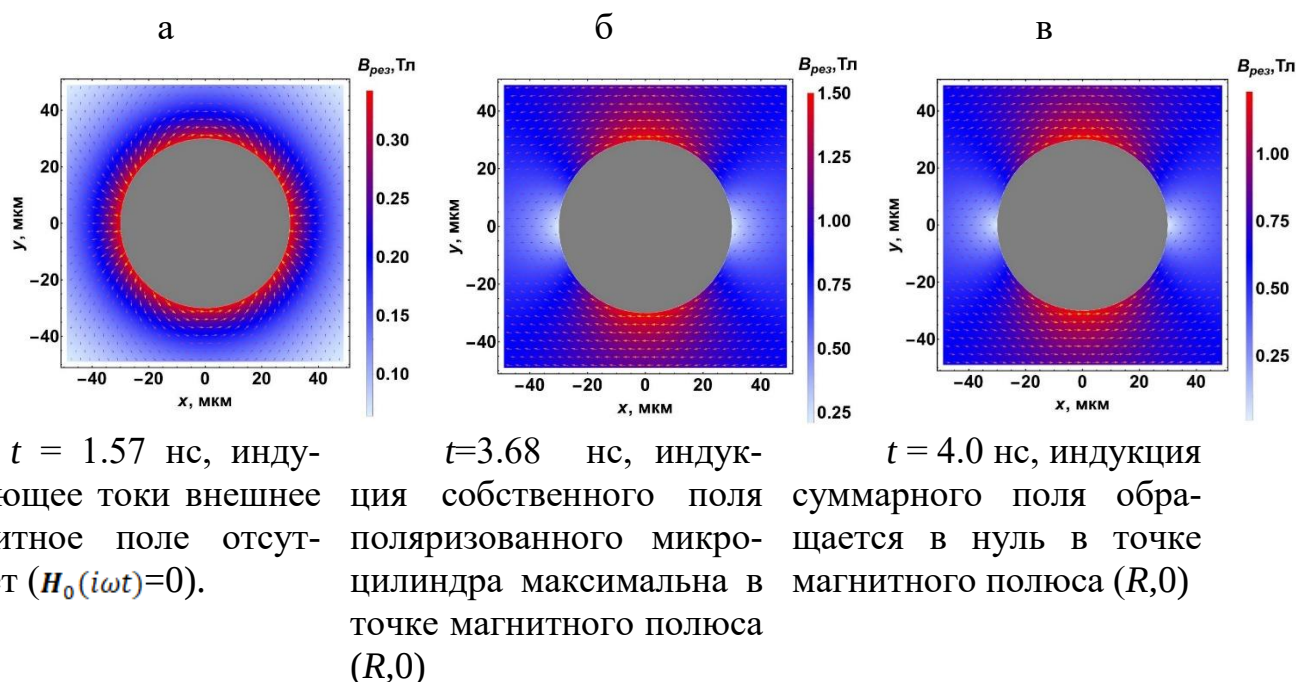


Рис. 2 Двумерные распределения индукции квазистационарного магнитного поля в различные моменты времени t , вне диамагнитного проводящего цилиндра радиуса $R = 30 \text{ мкм}$, в однородном монохроматическом поле $H_0(i\omega t)$ ($H_0 \parallel x$), гармонически изменяющемся с частотой $\omega = 10^9 \text{ с}^{-1}$.

Нарис. 3 представлены временные зависимости индукции внешнего магнитного поля в точке $x=R, y=0$ магнитного полюса на поверхности цилиндра, которые представляют собой сдвинутые по фазе друг относительно друга осцилляции во времени. Красная (внешнее поле) и чёрная штриховая (поле микроцилиндра с учётом реальной части магнитной поляризуемости) кривые представляют осцилляции, происходящие в противофазе. Фиолетовая штриховая кривая (поле микроцилиндра с учётом лишь мнимой части магнитной поляризуемости) сдвинута относительно них по фазе на $\pi/2$. Зеленая кривая определяет колебания результирующего поля как суммы полей микроцилиндра и внешнего затравочного поля.

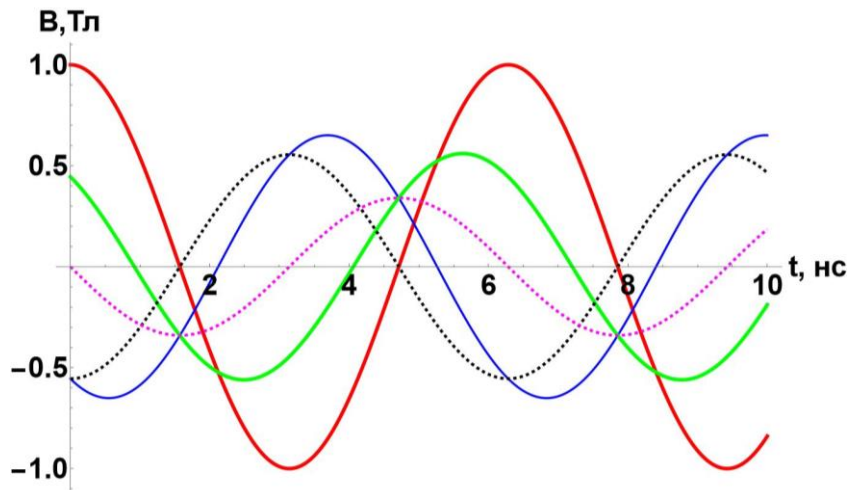


Рис. 3. Осцилляции индукции магнитного поля снаружи цилиндра в точке магнитного полюса с координатами $x=R$, $y=0$. Внешнее затравочное поле – красная кривая; поле микроцилиндра с учётом лишь реальной части магнитной поляризуемости – чёрная штриховая кривая; поле микроцилиндра с учётом лишь мнимой части магнитной поляризуемости – фиолетовая штриховая кривая; поле микроцилиндра с учётом реальной и мнимой частей магнитной поляризуемости – синяя кривая, результирующее поле как сумма полей микроцилиндра и внешнего поля – зеленая кривая. Радиус цилиндра $R=30$ мкм.

При измерении индукции магнитного поля в точках на образующей вертикального диаметра микроцилиндра с координатами $x=0$, $y=R$, фазовые сдвиги между осцилляциями различных компонент индукции поля изменяются. Нарис. 4 представлены временные зависимости индукции внешнего магнитного поля в точке $(0,R)$ образующей на поверхности цилиндра.

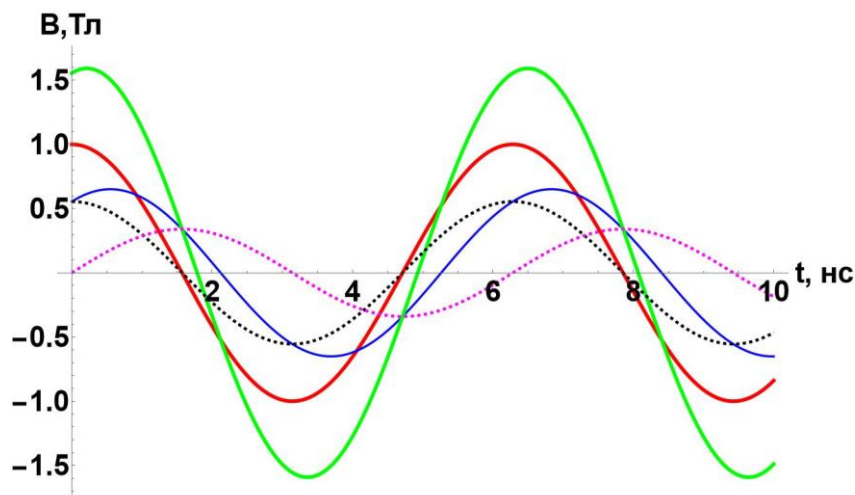


Рис. 4. Осцилляции индукции внешнего магнитного поля снаружи цилиндра радиусом $R=30$ мкм в точке на образующей с координатами $x=0$, $y=R$. Обозначения выделенных цветом кривых – такие же, как и для рис. 3.

Теперь в точке $x=0$, $y=R$, фазовые сдвиги между осцилляциями внешнего затравочного поля (красная кривая) и поля намагниченного микроцилиндра с

учёт реальной части магнитной поляризуемости (черная пунктирная кривая) отсутствуют, т.е. колебания этих полей синфазны.

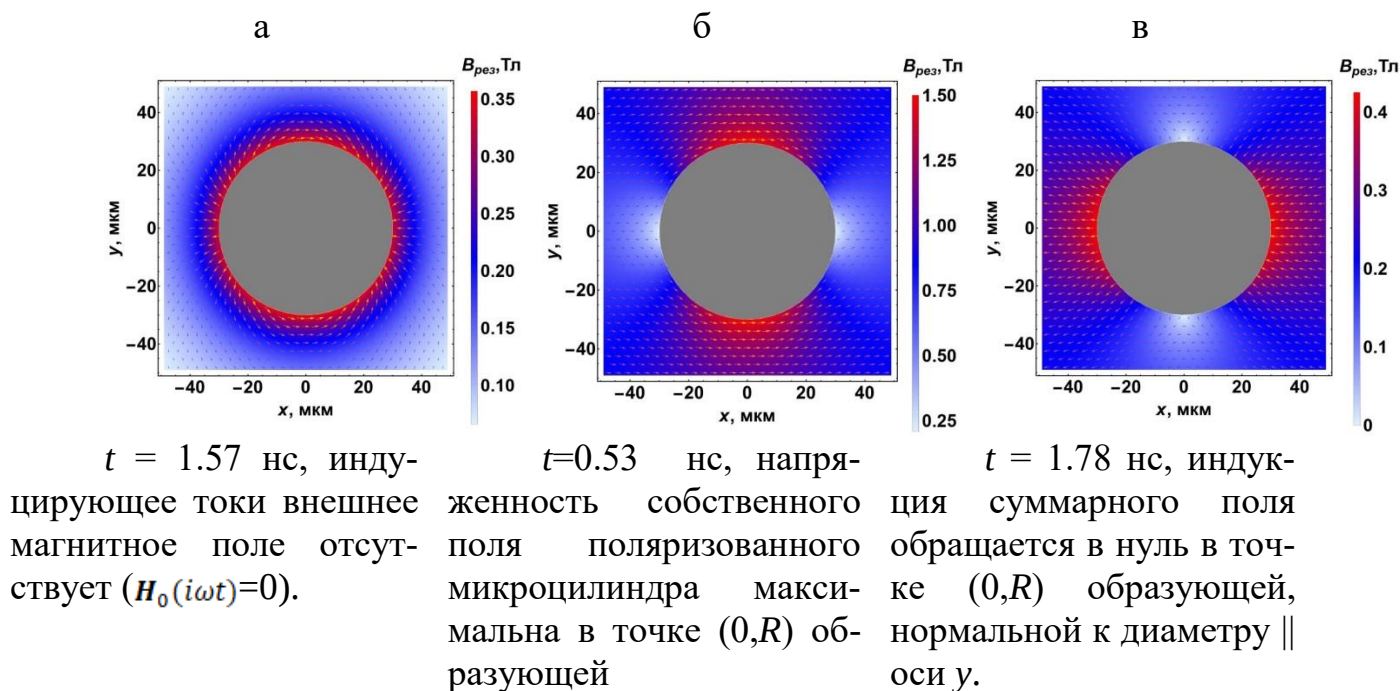


Рис. 5. Двумерные распределения индукции квазистационарного магнитного поля в различные моменты времени t , вне диамагнитного проводящего цилиндра радиуса $R = 30$ мкм, в однородном монохроматическом поле $H_0(i\omega t)$ ($H_0 \parallel x$), гармонически изменяющемся с частотой $\omega = 10^9$ с $^{-1}$.

На рис. 5 представлены двумерные распределения индукции квазистационарного магнитного поля в различные моменты времени t , в пространстве вне диамагнитного проводящего цилиндра радиуса $R = 30$ мкм, находящегося в однородном переменном монохроматическом поле ($H_0 \parallel x$), гармонически изменяющемся с частотой $\omega = 10^9$ с $^{-1}$. Моменты времени t выбирались по тому же принципу, что и для рис. 2. На рис. 5а сформировано аксиально симметричное поле двумерного магнитного диполя при обращении в нуль индукции затравочного поля в момент $t=1.57$ нс; на рис. 5б – картина поля в момент максимальной магнитной поляризации цилиндра; на рис. 5в – картина поля при нулевом значении результирующей индукции в точке $(0,R)$ образующей, нормальной к вертикальному диаметру, т.е. параллельному оси y . Таким образом, картины распределения индукции результирующего поля в характерные моменты времени $t=1.78$ нс и 4.0 нс кардинально различаются.

При низких частотах $Re\alpha_m(\omega)$ становится существенно меньше по модулю, чем $Im\alpha_m(\omega)$, т.е. колебания векторов H_0 и $H_m(r, \varphi)$ во времени сдвинуты по фазе практически на угол, приближающийся к $\pi/2$. Теперь более важной становится не $Re\alpha_m(\omega)$, а $Im\alpha_m(\omega)$. Это обеспечивает ненулевую величину индукции магнитного поля в тот момент, когда напряженность H_0 практически равна нулю.

В переменном неоднородном поле $\mathbf{H}^{(e)}$ формируется специфический магнитозависимый выход спин-селективных реакций триплет-триплетной аннигиляции электронных возбуждений и триплет-дублетного тушения на поверхности микропровода [2-5]. Расстояние r_{12} между частицами-реагентами 1 и 2 в цилиндрической системе координат определяется выражением $r_{12} = [r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + z^2]^{1/2}$, а скорость $K(r, \varphi)$ спин-селективной реакции может быть представлена [3-5] в виде интегралов от диффузионных функций Грина $G_S(r_2, r'_2, \varphi_2, \varphi'_2; t), G_n(z_2; t)$ подвижных молекул реагентов, скорости $U(r_{12})$ элементарного акта реакции и фактора ее спиновой селективности $\text{Tr} \{ \hat{P}_S, \hat{\rho}(\mathbf{H}_t^{(e)}(r, \varphi), t) \}_+$

(8)

$$K(r, \varphi) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dt \iint_{\Delta S \cdot L} U(r_{12}) \text{Tr} \{ \hat{P}_S, \hat{\rho}(\mathbf{H}_t^{(e)}(r, \varphi), t) \}_+ G_S(r_2, r'_2, \varphi_2 - \varphi'_2; t) G_n(z_2; t) r_2 dr_2 d\varphi_2 dz$$

Для простоты записи (8) предполагалось, что молекула-реагент с индексом 1 закреплена на поверхности, а диффузионно-подвижной является частица с индексом 2. В уравнении для спиновой матрицы плотности $\hat{\rho}(\mathbf{H}_t^{(e)}(r, \varphi), t)$ молекулярной пары реагентов фигурировала времязависящая напряженность магнитного поля вне цилиндра, которое можно считать меняющимся адиабатически медленно, по сравнению с быстрой спиновой динамикой Т-Т-пары.

С учетом относительно большого радиуса R кривизны микроцилиндра в расчетах скорости ТТА (8) использовалась двумерная – «полярная» функция Грина $G_S(\rho, \rho'; t - \tau)$ для уравнения диффузии с коэффициентом D на плоском элементе поверхности S

$$G_S(\rho, \rho'; t - \tau) = \frac{1}{4\pi D(t - \tau)} \exp\left(-\frac{\rho^2 + \rho'^2}{4D(t - \tau)}\right) I_0\left(\frac{\rho\rho'}{2D(t - \tau)}\right), \quad (9).$$

и диффузионная функция Грина одномерного движения вдоль нормали $\mathbf{n}$ к этому участку поверхности

(10)

$$G_n^{(1)}(r - R, \xi; t - \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_n^{(1)}(t - \tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(r - R - \xi)^2}{4D_n^{(1)}(t - \tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(r - R + \xi)^2}{4D_n^{(1)}(t - \tau)}\right] \right\}.$$

Здесь $\xi \in [R, R + b]$ внутренняя точка приповерхностного слоя толщиной b .

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

Список литературы

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.8. Электродинамика сплошных сред. М., Наука, 1982.
2. Кучеренко М. Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Особенности аннигиляционной замедленной флуоресценции органических молекул вблизи сферического ферроплазмонного нанокомпозита// Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2020. – С. 2222-2229.
3. Кучеренко М. Г., Алимбеков И. Р., Неясов П. П.// Химическая физика и мезоскопия. 2021. Том 23, № 3 С. 272-291.
4. Кучеренко М.Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Аннигиляция молекулярных электронных возбуждений вблизи диамагнитной металлической частицы в переменном магнитном поле// Международная научная конференция «Химическая физика молекул и полифункциональных материалов»: материалы конференции. 28 – 30 ноября 2022 г. – ОГУ, Оренбург. С. 76-81.
5. Кучеренко М. Г., Неясов П. П. // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20, № 1. С. 33-48.

ИНДУЦИРОВАННЫЕ КИСЛОРОДОМ РЕАКЦИИ ТУШЕНИЯ И КРОСС-АННИГИЛЯЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРОВОДЯЩЕЙ МИКРОЧАСТИЦЫ

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

Алимбеков И.Р., Пеньков С.А.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

В коллоидных растворах с микрочастицами, адсорбирующими органические молекулы, все реакции с участием триплетных (Т) электронных возбуждений органики и молекулами O_2 , т.е. таких как $T + {}^3\Sigma_g^-(O_2)(i)$ и $T + {}^1\Delta_g(O_2)(ii)$ протекают исключительно на поверхности частиц-адсорбентов. В случае частицы микрометрового радиуса малый участок ее поверхности можно считать плоским с вектором нормали n'_z . Переменные токи, наведенные в проводящей частице создают в пространстве вблизи нее неоднородное магнитное поле B [1], изменяющее скорости протекания спин-селективных реакций [2]. Тогда бимолекулярные константы скорости $K_x(B)$ реакции (i) и $K_T(B)$ реакции $T + T \rightarrow 0$ (iii) Т-Т-аннигиляции в области достаточно больших значений индукции поля убывают с ростом индукции B поля [2], плотность Т-экситонов в кислородсодержащей пленке растет, а концентрация синглетного кислорода падает [3]. Какая из этих тенденций будет определяющей для формирования наблюдаемой полевой зависимости сигнала свечения – зависит от концентрации кислорода в системе. Явление переключения знака эффекта поля также возникает при определенной концентрации n_{ox} молекулярного кислорода [4]. Тогда зависимость слагаемого $K_T(B)[n_T(t|B)]^2$ для замедленной флуоресценции (ЗФ), связанной с реакцией $T + T \rightarrow 0$ (iii) в общем сигнале аннигиляционной ЗФ, сопровождающей реакции (ii) и (iii) становится монотонно возрастающей с увеличением индукции поля B , в отличие от произведения $K_\Delta n_T(t|B)n_\Delta(t|B)$, определяющего интенсивность свечения при кросс-аннигиляции (ii) [3-4].

Молекула кислорода, попадая в приповерхностный слой, имеет возможность передвигаться в нем. В этом случае можно говорить о латеральной диффузии O_2 в пределах монослоя. Поскольку глубина сорбционной потенциальной ямы мала (или высока температура подложки), то десорбция Δ -кислорода из монослоя представима как свободная диффузия вдоль оси z' . Форма импульса кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции $I_{DF}(t)$ определяется в такой модели через интеграл от парной функции распределения $g_\Delta(r, t)$ синглетного кислорода по поверхности следующей формулой [5-6]:

$$I_{DF}(t) = \varphi p_s \left[K_\Delta^{(3)}(t) + \kappa b K_\Delta^{(2)}(t) \right] n_T(t) \int_{R_F}^{\infty} g_\Delta(r, t) 2\pi r dr. \quad (1)$$

$$K_{\Delta}^{(3)}(t) = 4\pi R_{\Delta} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{R_F - 2R_{\Delta}}{\sqrt{4D_{\Delta}t}} \right] + \frac{R_F - R_{\Delta}}{\sqrt{\pi D_{\Delta}t}} \exp \left[-\frac{(R_F - 2R_{\Delta})^2}{4D_{\Delta}t} \right] \right\},$$

$$K_{\Delta}^{(2)}(t) = \frac{4\pi D_{\Delta}^{(2)} \kappa b}{\ln(D_{\Delta}^{(2)} t / r_0^2)} \theta_H(t - \vartheta), \operatorname{erfc}(q) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^q \exp(-x^2) dx.$$

Здесь, в (1), $g_{\Delta}(r, t) = \int_0^t \rho_{\Delta}(r | t, \tau) 2b G_{\Delta}^{(1)}(b, \xi; t - \tau) \frac{dn_{\Delta}}{dt} d\tau$ — двумерная ради-

альная функция распределения для плотности ${}^1\Delta_g(\text{O}_2)$ -возбуждений в приповерхностном слое микрочастицы относительно центра локальной генерации, т.е. точки нахождения Т-центра до момента его тушения. Суммарная удельная скорость $K_{\Delta}(t) = K_{\Delta}^{(3)}(t) + \kappa b K_{\Delta}^{(2)}(t)$ кросс-аннигиляции Т- и ${}^1\Delta_g$ возбуждений включает в себя трех- и двумерные части. Радиусы R_F, R_{Δ} представляют собой ферстеровский радиус S-S-аннигиляции и радиус Т- ${}^1\Delta_g$ кросс-аннигиляции соответственно. Функция Грина $G_{\Delta}^{(1)}(z', t - \tau)$ одномерного диффузионного движения молекул ${}^1\Delta_g(\text{O}_2)$ с коэффициентом диффузии $D_{\Delta}^{(1)}$ вдоль нормали z' к участку отражающей поверхности микрочастицы определяется выражением

$$G_{\Delta}^{(1)}(z', \xi; t - \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_{\Delta}^{(1)}(t - \tau)}} \left\{ \exp \left[-\frac{(z' - \xi)^2}{4D_{\Delta}^{(1)}(t - \tau)} \right] + \exp \left[-\frac{(z' + \xi)^2}{4D_{\Delta}^{(1)}(t - \tau)} \right] \right\}.$$

$$(\xi \in [0, b])$$

Функция $\rho_{\Delta}(r, t - \tau)$ имеет смысл плотности вероятности обнаружения ${}^1\Delta_g(\text{O}_2)$ - возбуждения в момент t на расстоянии r от точки его рождения в момент τ , при условии достоверного его нахождения в приповерхностном слое толщиной b . Она удовлетворяет диффузионному уравнению на плоскости с реакционным слагаемым, отвечающим кросс-аннигиляции возбуждений [5]

$$\frac{\partial \rho_{\Delta}(r, t - \tau)}{\partial t} = D_{\Delta}^{(2)} \nabla^2 \rho_{\Delta}(r, t - \tau) - \frac{1}{\tau_{\Delta}} \rho_{\Delta}(r, t - \tau) - K_{\Delta}(t) n_T(t) \theta_H(r - R_F) \rho_{\Delta}(r, t - \tau),$$

где $D_{\Delta}^{(2)}$ — коэффициент латеральной диффузии ${}^1\Delta_g(\text{O}_2)$ -возбуждений в монослое, $\theta_H(r)$ — функция Хэвисайда. Решение этого уравнения в случае дельта-функционального начального условия $\rho_{\Delta}(r, 0) = \frac{\delta(r)}{\pi r^2}$ представляется следующими выражениями

$$\rho_{\Delta}(r | t, \tau) = G_{\Delta}^{(2)}(r, r_0 | t - \tau) \exp \left[-\frac{t - \tau}{\tau_{\Delta}} - \theta_H(t - \tau - \vartheta) n_T(\tau) \frac{4\pi D_{\Delta}^{(2)}}{\ln(D_{\Delta}^{(2)} \tau / r_0^2)} \right] d\tau \quad (2)$$

$$G_{\Delta}^{(2)}(r, r_s | t - \tau) = \frac{1}{4\pi D_{\Delta}^{(2)}(t - \tau)} \exp \left(-\frac{r^2 + r_s^2}{4D_{\Delta}^{(2)}(t - \tau)} \right) I_0 \left(\frac{rr_s}{2D_{\Delta}^{(2)}(t - \tau)} \right).$$

Здесь $G_{\Delta}^{(2)}(r, r_0 | t - \tau)$ – функция Грина для уравнения диффузии на плоскости; $I_0(x)$ – функция Бесселя мнимого аргумента; $\vartheta = \frac{2r_0^2}{D_{\Delta}^{(2)}}$ – временной параметр, задающий начало отсчета двумерной кинетики. Через временную производную

$$\left(\frac{dn_{\Delta}}{dt}\right)^+ = \left[K_{\Sigma}^{(3)} + \frac{4\pi D_{\Sigma}^{(2)} \kappa b}{\ln(D_{\Sigma}^{(2)} t / r_0^2)} + \delta K(\theta) \right] n_{ox}^{(3)} n_T(t) \quad (3)$$

обозначена скорость генерации средней по поверхности плотности n_{Δ} для $^1\Delta_g(O_2)$ – возбуждений. Верхние индексы в скобках указывают на пространственную размерность d соответствующих величин. Таким образом, $K_{\Sigma}^{(3)}$ – бимолекулярная (объемная) константа скорости тушения Т-центров кислородом из растворителя (жидкой фазы) без учета повторного контакта реагентов; κ – коэффициент растворимости молекул O_2 в $^3\Sigma_g^-$ состоянии внутри приповерхностного слоя; $n_{ox}^{(3)}$ – объемная плотность невозбужденных молекул кислорода в растворителе; r_0 – эффективный радиус для «горизонтального» тушения Т-центров. Временная зависимость концентрации триплетных центров теперь имеет вид

$$n_T(t) = n_0 \exp\left\{-\frac{t}{\tau_T}\right\} - n_{ox}^{(3)} \left(K_{\Sigma}^{(3)} + \delta K(\theta) \right) t + \int_0^t 4\pi D_{\Sigma}^{(2)} \frac{\kappa b}{\ln(D_{\Sigma}^{(2)} \tau / r_0^2)} d\tau, \quad (4)$$

где $D_{\Sigma}^{(2)}$ – коэффициент диффузии невозбужденных молекул кислорода в поверхностном слое микрочастицы.

На рис. 1 показана эволюция плотности вероятности обнаружения возбужденной молекулы O_2 на плоскости в различных точках от центра круга, в котором она была активирована и осуществляет свой диффузионный маршрут по поверхности микрочастицы с коэффициентом диффузии $D_{\Delta}^{(2)}$.

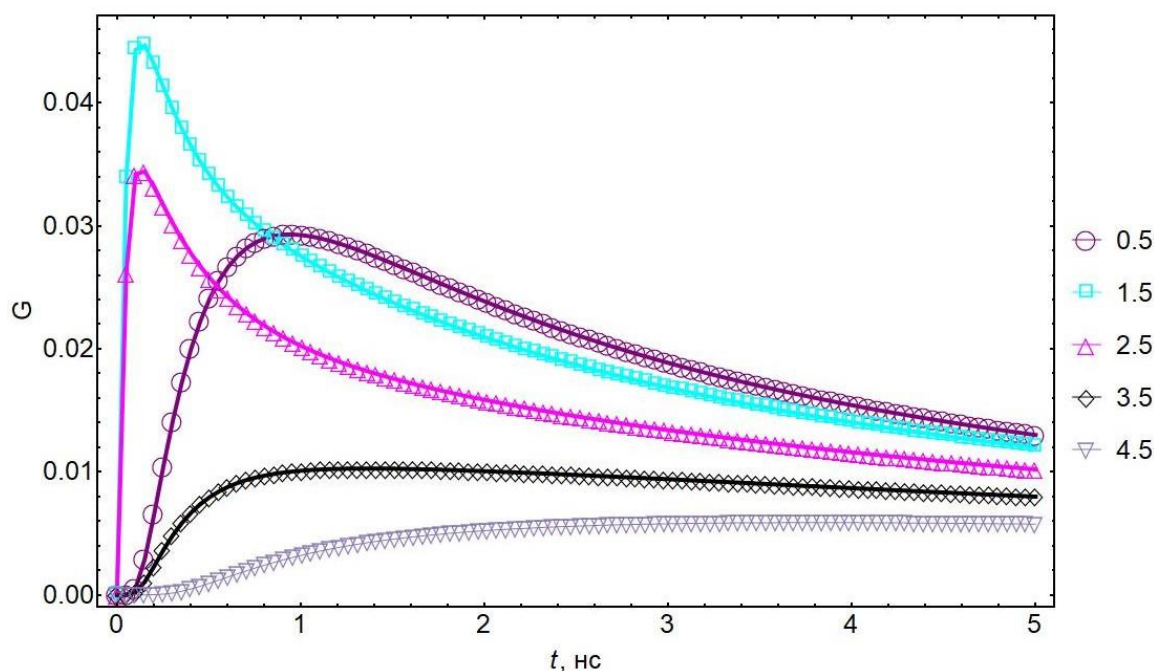


Рисунок 1 - Эволюция значений (в единицах nm^{-2}) двумерной диффузионной функции Грина $G_{\Delta}^{(2)}(r|t)$ на плоскости для различных расстояний r от центра в диапазоне от 0.5 до 4.5 нм с шагом в 1 нм (вертикальный столбец). Коэффициент латеральной диффузии $D_{\Delta}^{(2)}$ - $10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$. Расстояние r_0 от центра до стартовой точки подвижной молекулы - 2 нм.

Вводя спиновой оператор плотности $\hat{\rho}(t|B(z',\theta))$, определяющий скорость пополнения населенности благоприятного для реакции спинового состояния $|JM\rangle$ пары реагентов (J, M – квантовые числа суммарного спинового момента и его z -проекции), для аддитивной части $\delta K(\theta)$ константы скорости спин-селективного тушения триплетных (Т) состояний кислородом при дистанционном взаимодействии $U(|r + n'z'|)$ (неселективной по спину скорости элементарного акта аннигиляции) можем записать

$$\delta K(\theta) = \int_0^{\infty} dt \int_0^{\infty} dz' \frac{1}{2} \text{Tr} \left\{ \hat{P}_S, \hat{\rho}(t|B(z',\theta)) \right\}_+ \times \int \int_{S_R} U(\sqrt{r^2 + z'^2}) \left[G_{\Sigma}^{(3)}(z', r, r_0; t) + \kappa b^{-1} G_{\Sigma}^{(2)}(r, r_0; t) \theta_H(b - z') \right] d^2 r, \quad (5)$$

$$G_{\Sigma}^{(3)}(z', r, r_0; t) = G_{\Sigma}^{(2)}(r, r_0; t) \cdot G_{\Sigma}^{(1)}(z', b; t),$$

где $\text{Tr} \{ \hat{P}_S, \hat{\rho} \}_+ = \sum_{J,M} |JM\rangle (\hat{P}_S \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{P}_S) |JM\rangle = \langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle$, а $\hat{P}_S = |00\rangle \langle 00|$ – оператор проектирования на синглетное спиновое состояние $T^{-3}\Sigma_g$ -пары реагентов; начальные условия для синглетного элемента $\langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle$ матрицы плотности

$\langle 00|\hat{\rho}(0)|00\rangle = 0$. Меридиональный угол θ задает ориентацию локальной оси z' относительно вертикальной лабораторной оси z , параллельной внешнему однородному затравочному (индуцирующему токи) полю $\mathbf{B}_0(t)$.

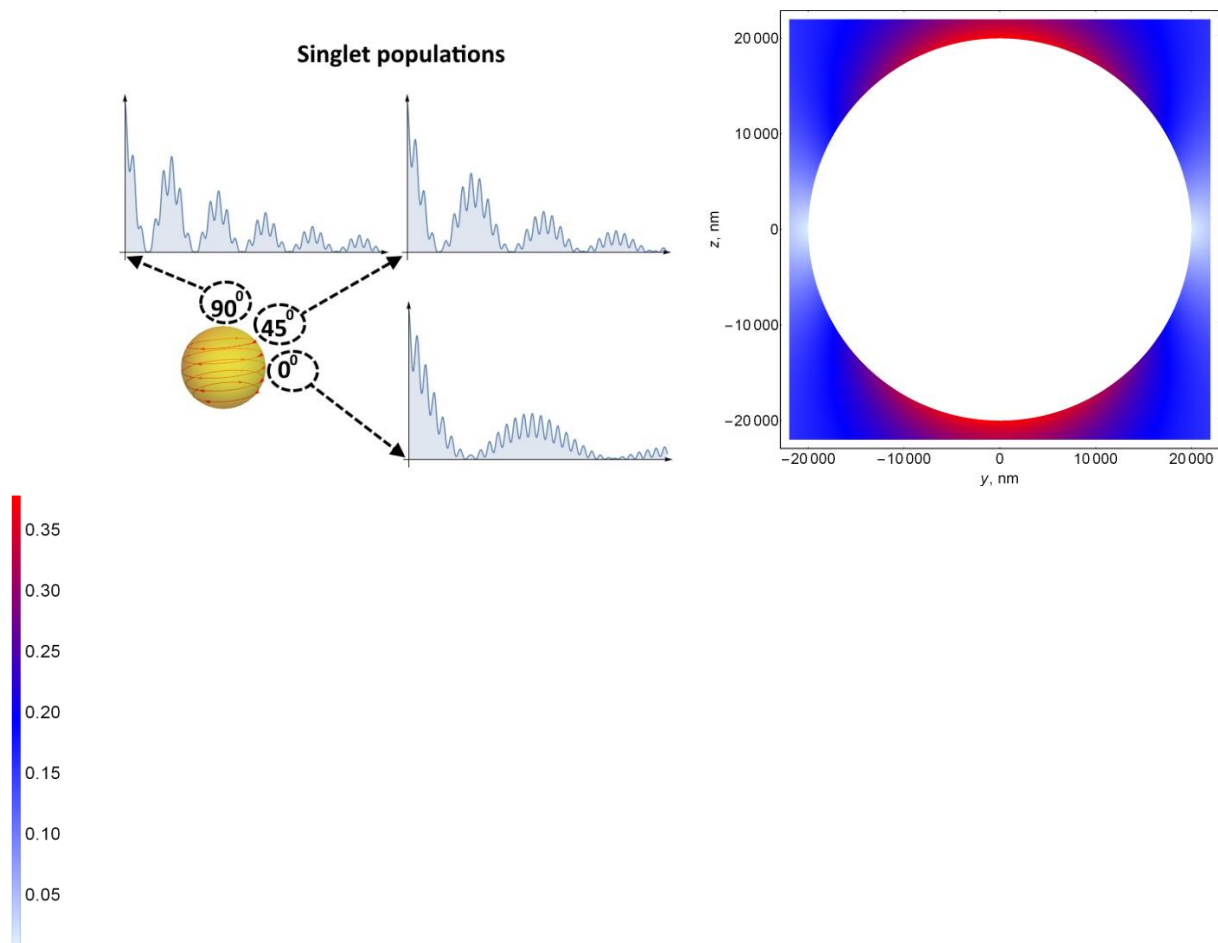


Рисунок 2 - Эволюция синглетного спинового состояния Т- $^3\Sigma_g^-$ -пары, локализованной в трех различных характерных областях поверхности микрочастицы. Справа карта распределения индукции магнитного поля вблизи поверхности микрочастицы. Значения индукции магнитного поля: на полюсе (900) – 0,35 Тл, при угле 450 – 0,2 Тл, на экваторе (00) – 0,05 Тл.

Неоднородное анизотропное магнитное поле $B(z', \theta)$ (рис.2) сферической микрочастицы изменяет скорость восполнения дефицита начальной синглетной населенности $\langle 00|\hat{\rho}|00\rangle = \rho_{00}(t)$ когерентной Т- $^3\Sigma_g^-$ -пары молекул [1-2]. В соответствии с (5) это влечет за собой зависимость от магнитного поля $B(z', \theta)$ аддитивной добавки $\delta K(\theta)$ к константе скорости тушения Т-возбуждений. Тогда скорость генерации (3) поверхностной плотности $^1\Delta_g(\text{O}_2)$ – возбуждений, в свою очередь, становится магнитозависимой, а с ней и парная функция распределения $g_\Delta(r, t)$ синглетного кислорода по поверхности. Форма импульса сигнала кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции $I_{DF}(t)$, определенная выражением (1), содержит два зависящих от магнитного поля фактора – это интеграл с функцией $g_\Delta(r, t)$ и плотность Т-центров (4). Удельная скорость $K_\Delta(t)$ кросс-

аннигиляции от магнитного поля $B(z', \theta)$ не зависит. Несмотря на это, интенсивности $I_{DF}(t)$ аннигиляционной ЗФ, сопровождающей реакцию (ii) будет формироваться по-разному в кольцевых поясах (параллелях) с разным меридиональным углом θ .

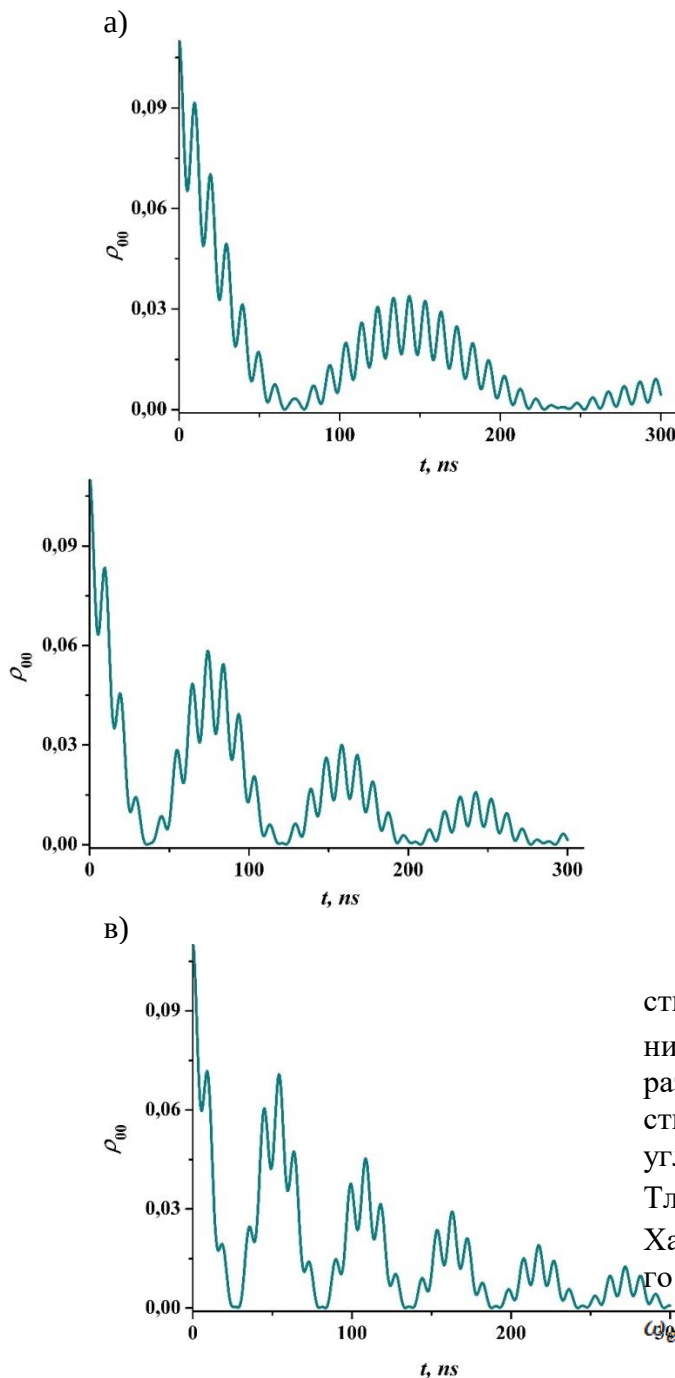


Рисунок 3 - Эволюция населенности $\rho_{00}(t)$ синглетного спинового состояния $T^{-3}\Sigma_g$ -пары, локализованной в трех различных поясах поверхности микрочастицы: а) на экваторе (0°) – 0,05 Тл, б) при угле 45° – 0,2 Тл, в) на полюсе (90°) – 0,35 Тл. Начальная населенность $\rho_{00}(0) = 1/9$. Характерные частоты тонкого и обменного взаимодействия $\omega_{SS} = 3 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$ и $\omega_{ex} = 10^7 \text{ с}^{-1}$, $\Delta g = 0,002$.

На рисунке 3 представлены временные зависимости населенности $\langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle = \rho_{00}(t)$ синглетного спинового состояния молекулярной $T^{-3}\Sigma_g$ -пары, находящейся в различных сферических поясах на поверхности микрочастицы. В расчетах представленной спиновой динамики принималось некоррелированное (равновесное) начальное условие для населенности синглета: $\langle 00 | \hat{\rho}(0) | 00 \rangle = 1/9$. В таком стартовом варианте исчезает необходимость разби-

ния полной скорости спин-селективного тушения Т-состояний органики на две аддитивные части $K_{\Sigma} = K_{\Sigma}^{(3)} + \delta K(\theta)$, и для магнито­зависимой величины $K_{\Sigma}(B) = K_{\Sigma}^{(3)}(B(\theta))$ можно сразу использовать выражение (5). В качестве характерных частот внутримолекулярного тонкого и межмолекулярного обменного взаимодействия принимались типичные для органических молекул значения $\omega_{SS} = 10^9 \text{с}^{-1}$ и $\omega_{exc} = 10^7 \text{с}^{-1}$, соответственно. При этом из-за своей малой величины на рис. 3 обменное взаимодействие себя не проявляет. В то же время расчеты показывают, что с увеличением обменной частоты ω_{exc} до значений 10^9с^{-1} и выше, происходит существенное подавление амплитуды осцилляций населенности $\rho_{00}(t)$.

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

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Аннигиляция молекулярных электронных возбуждений вблизи диамагнитной металлической частицы в переменном магнитном поле// Международная научная конференция «Химическая физика молекул и полифункциональных материалов»: материалы конференции. 28 – 30 ноября 2022 г. – ОГУ, Оренбург. С. 76-81.
2. Кучеренко М. Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Особенности аннигиляционной замедленной флуоресценции органических молекул вблизи сферического ферроплазмонного нанокомпозита// Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2020. – С. 2222-2229.
3. Кучеренко М.Г., Пеньков С.А. Особенности фотолюминесценции кислоро-донасыщенных пленок метокси-полифениленвинилена (МЕН-PPV) // Оптика и спектроскопия. 2022. -Том 130. Вып. 5. –С. 690-697.
DOI: 10.21883/OS.2022.05.52422.12-22
4. Kucherenko M.G., Penkov S.A. Triplet exciton reactions in MEN-PPV films registered by accompanying magneto-sensitive photoluminescence // Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry. 437 (2023) 114440. 1010-6030/© 2022 Elsevier B.V.
doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114440
5. Кучеренко М.Г. О кинетике реакции синглетного кислорода с неподвижными сенситизаторами // Химическая физика. 2001 . Т .20. №3. С. 31-36.
6. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Процессы с участием электронно - возбужденных молекул на поверхностях твердых адсорбентов. Оренбург: Оренбургский государственный университет. Монография. 2010. -346 с.

ПЛАЗМОННАЯ РЕГУЛИРОВКА ИНТЕНСИВНОСТИ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ МОЛЕКУЛ В ОПУШЕЧНОМ СЛОЕ АДСОРБИРОВАННЫХ ПОЛИПЕПТИДОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ЗАРЯЖЕННОЙ СФЕРИЧЕСКОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

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

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

Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент,

Степанов В.Н., канд. физ.-мат. наук, доцент

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Для получения характеристик регулируемых люминесцентных сигналов окрашенных белковых цепей и полипептидов, адсорбированных сферическими плазмонными наночастицами Au, детально исследован случай электрически заряженных наночастиц с полиамфолитными макромолекулярными цепями. Произведен анализ структуры сформированного радиального распределения пептидных звеньев, и сделан прогноз изменений в спектрах люминесценции молекул, связанных со звеньями полимерной цепи, адсорбированной на заряженной наночастице.

Ключевые слова: люминесценция молекул, полипептид, адсорбция, металлическая наночастица, плазмонный резонанс, полиамфолит

Адсорбированная цепь полипептидного амфолита на заряженной поверхности сферической наночастицы

Потенциальная энергия взаимодействия звена цепи с незаряженной сферической наночастицей (НЧ) радиуса R , в случае исходного парного потенциала 6 – 12 Леннарда – Джонса для межмолекулярного ван-дер-ваальсова взаимодействия между атомами звена и НЧ, записывается в виде ($r > R$) [1]

$$V_{9-3}(r) = \frac{\pi D n_0 r_0^6}{6r} \left\{ \frac{r_0^6}{60} \left[\frac{9R+r}{(R+r)^9} - \frac{9R-r}{(R-r)^9} \right] - \left[\frac{3R+r}{(R+r)^3} - \frac{3R-r}{(R-r)^3} \right] \right\}. \quad (1)$$

Здесь D и r_0 – параметры потенциала 6 – 12 Леннарда – Джонса, n_0 – концентрация атомов металла НЧ. При $r - R = \delta r \rightarrow 0$ из выражения (1) следует

$$V_9(r) = \frac{\pi D n_0 r_0^3}{45} \left(\frac{r_0}{\delta r} \right)^9. \quad (2)$$

При замене потенциала $V_{9-3}(r)$ представленного (1), простым модельным потенциалом $V_{\alpha\delta}^\infty(r) = V_\infty(R) - \alpha\delta(r - r_m)$ «твердая стенка – дельта-функциональная яма» [1-2], точка r_m локализации дельта-функциональной ямы совмещается с радиусом дна потенциальной ямы (1)

$$V_{9-3}(r_m) = \frac{\pi D n_0 r_0^6}{6 r_m} \left\{ \frac{r_0^6}{60} \left[\frac{9R+r_m}{(R+r_m)^9} - \frac{9R-r_m}{(R-r_m)^9} \right] - \left[\frac{3R+r_m}{(R+r_m)^3} - \frac{3R-r_m}{(R-r_m)^3} \right] \right\}.$$

Наконец, при $r \gg R, r \rightarrow \infty$ из (1) получаем

$$V_4(r \gg R) = -\frac{\pi D n_0 r_0^6 R}{r^4}. \quad (3)$$

В случае заряженной наночастицы, сферически-симметрично распределенным зарядом Q и полиамфолитной цепи с дипольным моментом $\mathbf{p}$ ее звена, к адсорбционному потенциалу (1) добавляется потенциал взаимодействия мономерамacroцепи $V_{pQ}(r) = -(\mathbf{pr})Q/r^3$ с кулоновым полем заряженной наночастицы

$$V_{9-3}^{pQ}(r) = V_{9-3}(r) + V_{pQ}(r) = V_{9-3}(r) \pm Q \frac{(\mathbf{pr})}{r^3}. \quad (4)$$

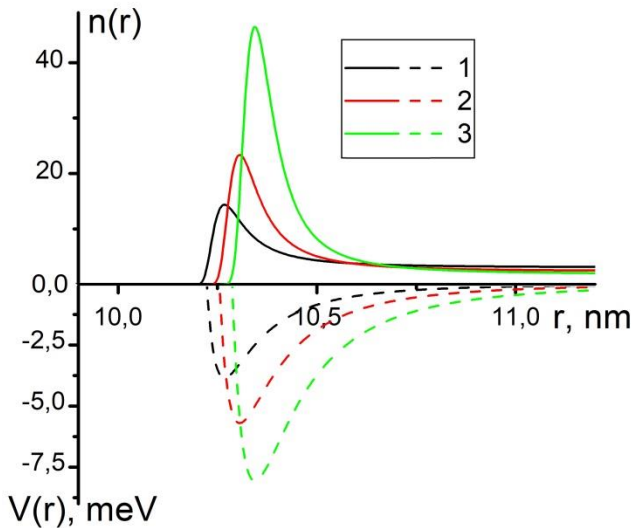


Рис. 1. Радиальное распределение плотности звеньев полимерной цепи (сплошные кривые) и потенциала (1) нейтральной НЧ (пунктирные кривые) при различных значениях параметра r_0 . 1 – 0.35, 2 – 0.4 и 3 – 0.45 нм. $R=10$ нм, $D=2kT$, $Q=0$.

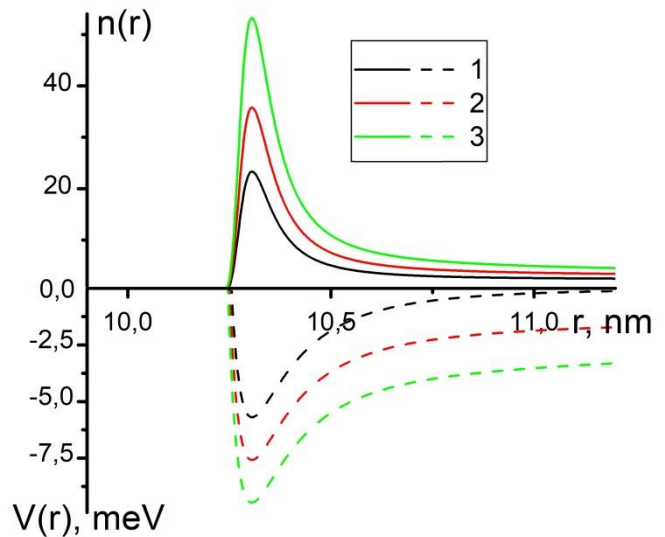


Рис. 2. Радиальное распределение плотности звеньев полимерной цепи (сплошные кривые) и потенциала (4) заряженной НЧ (пунктирные кривые) при различных величинах модуля ее заряда Q : 1 – 0, 2 – 2, 3 – 4. (в отн. единицах). $R=10$ нм, $D=2kT$, $r_0=0.4$ нм.

С увеличением параметра r_0 (дистанционный параметр потенциала взаимодействия 6-12 Леннард-Джонса) потенциальная яма (1) вблизи наночастицы удаляется от ее поверхности и становится при этом глубже (рис.1). Алгоритм расчетов сдвига положения минимума потенциальной ямы (4) к поверхности наночастицы при увеличении ее заряда (рис. 2) включал в себя следующие этапы. В больцмановском приближении расчет плотности $n(r) \sim \exp[-V_{9-3}^{pQ}(r)/kT]$ звеньев производился на основе потенциала $V_{9-3}^{pQ}(r)$, определенного выражением (4). По мере увеличения модуля заряда $|Q|$ НЧ производился расчет нового положения минимума r_m потенциала $V_{9-3}^{pQ}(r)$. Из рис.2 видно, что с увеличением заряда наночастицы увеличивается глубина потенциальной ямы НЧ и ее дальность.

действие. Это приводит к увеличению амплитуды распределения звеньев цепи вблизи поверхности НЧ.

Переход к модельному потенциалу $V_{\alpha\delta}^{pQ}(r)$ осуществлялся иначе. Вначале производился расчет точки минимума r_m потенциала $V_{9-3}(r)$, а затем в эту точку помещалась дельта-функция для использования комбинации модельных потенциалов $V_{\alpha\delta}^{\infty}(r) = V_{\infty}(R) - \alpha\delta(r - r_m)$ «твердая стенка – дельта-функциональная яма». Добавление в композицию потенциала $V_{pq}(r) = -(\mathbf{pr})Q/r^3$ приводило к модельному потенциалу $V_{\alpha\delta}^{pQ}(r) = V_{\infty}(R) - \alpha\delta(r - r_m) - pQ/r^2$, для которого можно было получить аналитическое решение уравнения Гроссберга-Хохлова, записанное для конфигурационной функции $F_0(r)$ [3]. В сферически симметричном случае, когда дипольные моменты звеньев цепи в равновесии выстраиваются вдоль вектора напряженности $\mathbf{E} = rQr^{-3}$ электрического поля для радиальной функции $F_0(r)$, квадрат которой определяет плотность звеньев $n(r) = F_0^2(r)$, получаем уравнение [2-3]

$$\frac{\alpha^2 kT}{6} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right] F_0(r) = [V(r) - \varepsilon_0] F_0(r), \quad (5)$$

с потенциалом $V_{\alpha\delta}^{pQ}(r) = V_{\alpha\delta}^{\infty}(r) - p \cdot Q/r^2$. Для нахождения функций $F_0^I(r)$, $F_0^{II}(r)$ уравнения (5) с таким потенциалом дельта-функциональная потенциальная яма $V_{\alpha\delta}(r) = -\alpha\delta(r - r_0)$ может временно не рассматриваться на промежуточных этапах расчета. Вводя новую радиальную функцию $\chi(r)$ подстановкой $F_0(r) = \chi(r)/\sqrt{r}$ получаем для нее уравнение

$$\chi'' + \frac{1}{r} \chi' - \left(q_0^2 + \frac{(1/4 - \gamma)}{r^2} \right) \chi(r) = 0, \quad (6)$$

где $q_0^2 = -\frac{6|\varepsilon_0|}{\alpha^2 kT}$, $\gamma = -\frac{6p|Q|}{\alpha^2 kT}$. Замечаем, что уравнение (6) представляет собой уравнение Бесселя, и тогда его решение может быть представлено набором функций $I_\nu(q_0 r)$ и $K_\nu(q_0 r)$ – модифицированных функций Бесселя первого и второго рода с индексом $\nu = \sqrt{1/4 - \gamma}$: $\chi(r) = A I_\nu(q_0 r) + B K_\nu(q_0 r)$. Тогда радиальные функции $F_0^I(r)$, $F_0^{II}(r)$ будут определены выражениями, аналогичными формулам для незаряженной сферической наночастицы, но с индексом $\nu = \sqrt{1/4 - \gamma}$ – величины, отражающей степень взаимодействия заряда НЧ с диполем звена полиамфолита

$$\begin{cases} F_0^I(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 R)}{\sqrt{r}} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}} \right], R < r < r_0 \\ F_0^{II}(r) = A \left[\frac{I_\nu(q_0 r_0)}{K_\nu(q_0 r_0)} - \frac{I_\nu(q_0 R)}{K_\nu(q_0 R)} \right] \frac{K_\nu(q_0 r)}{\sqrt{r}}, r_0 < r < \infty \end{cases}, \quad (7)$$

Нетрудно заметить, что при $\gamma \rightarrow 0, \nu = 1/2$ формулы (7) переходят в найденные нами ранее выражения для незаряженной сферической наночастицы [2, 4]. Уравнение для собственного значения q_0 аналогично приведенному в [1, 4] с заменой индекса функций Бесселя $1/2 \rightarrow \nu$.

Люминесценция двухчастичной системы «молекула-наночастица»

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

$$\delta\varphi(r', \theta; r, \vartheta) = -p_0 \cos \vartheta \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(l+1)}{l\varepsilon(\omega) + (l+1)\varepsilon_2} \frac{(r')^l}{r^{l+2}} \cdot P_l(\cos \theta), r' < R. \quad (8)$$

Здесь, в (8) $P_l(\cos \theta)$ - полином Лежандра; ϑ - угол между векторами $\mathbf{p}_0$ и $\mathbf{r}$. Неоднородное поле (8) наводит в НЧ дипольный момент

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

величина которого зависит от расстояния r между центром НЧ и молекулой. Спонтанные переходы с излучением фотонов будут происходить в ускоренном режиме благодаря наличию вблизи возбужденной молекулы частицы-наноантенны [5]

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

Здесь $w_{sp}(\omega|r, \vartheta)$ – скорость спонтанного перехода на частоте ω . Тогда интенсивность люминесценции системы «молекула-наночастица» будет определяться выражением

$$I_1(\omega|r, \vartheta) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{w_{sp}^2(\omega|r, \vartheta) \Gamma(\omega|r, \vartheta)}{(\omega - \omega_{if})^2 + \Gamma^2(\omega|r, \vartheta)}, \quad (9)$$

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

где $\Gamma(\omega|r, \vartheta)$ – спектральная ширина линии излучения системы молекула-НЧ на частоте ω .

Следует отметить, что ранее в [6] был рассмотрен аналогичный эффект влияния плазмонной наночастицы на скорость безызлучательного переноса энергии между молекулами в опущечном слое адсорбированной макроцепи, который был назван «эффектом кинетической линзы».

В условиях прямого влияния плазмонной наночастицы на излучательные переходы в опушке средний люминесцентный сигнал от отдельной заряженной НЧ с окрашенной полимерной цепью, адсорбированной на ее поверхности, будет определяться выражением

$$I \sim \int_R^\infty I_1(r) n(r) 4\pi r^2 dr \sim 4\pi \int_R^{r_0} I_1(r) [F_0^I(r)]^2 r^2 dr + 4\pi \int_{r_0}^\infty I_1(r) [F_0^{II}(r)]^2 r^2 dr, \quad (10)$$

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

Диссипация энергии в наночастице.

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

$$U(\omega|r, \vartheta) = \frac{1}{2\hbar} \int_0^R \int_0^\pi \text{Im} \varepsilon(\omega) |\nabla \delta \varphi(r', \theta; r, \vartheta)|^2 r'^2 dr' \sin \theta d\theta. \quad (11)$$

Теперь, с учетом скорости диссипации (11), квантовый выход люминесценции изолированной пары молекула-НЧ, определяющий интенсивность $I_1(r)$ в (10) и (11) полностью задан выражением

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

Выражения (9)-(10) позволяют произвести расчет регистрируемых экспериментально спектров люминесценции полимерных растворов с заряженными плазмонными НЧ, регулируемыми степенью удаленности связанных с макроцепями молекул люминофора от поверхности плазмонной наноантенны.

Молекулярно-динамическое моделирование изменений конформационной структуры полиамфолитов на поверхности заряженной металлической наночастицы

Было произведено молекулярно-динамическое (МД) моделирование полиамфолитных полипептидов на поверхности заряженной золотой наночастицы радиусом 1.5 нм с использованием программного комплекса NAMD 2.14 [7]. Атомы наночастицы в процессе моделирования оставались зафиксированными. Для полипептидов было использовано силовое поле CHARMM22 [8], а взаимодействие с золотой наночастицей описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, параметризованным в работе [9]. Потенциал Ван-дер-Ваальса обрезался на расстоянии 1.2 нм с помощью функции сглаживания между 1.0 и 1.2 нм. Электростатические взаимодействия рассчитывались непосредственно на расстоянии 1.2 нм, для больших дистанций использовался метод «частица–сетка» Эвальда (PME) [10] с шагом сетки 0.11 нм. Вся молекулярная система была помещена в куб с ребрами 20 нм, заполненный молекулами воды TIP3P [11].

Было исследовано 4 типа полиамфолитных полипептидов с различным соотношением звеньев Ala, Asp и Arg. Здесь будут приведены результаты, полученные для полипептида (ADA₂RA)₅₀, состоящего из 300 аминокислотных остатков с 200 звеньями Ala (A) с равномерно распределенными 50 звеньями Asp (D, заряд -1e) и 50 звеньями Arg (R, заряд +1e).

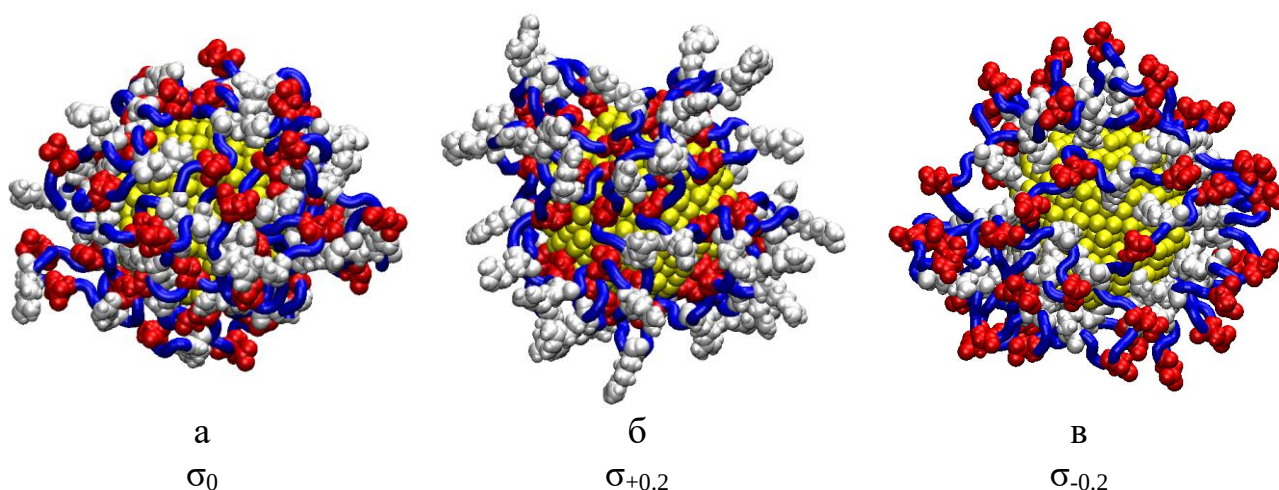


Рис. 3. Равновесные конформации полипептида $(ADA_2RA)_{50}$ на нейтральной (а), а также заряженной (б,в) золотой наночастице с поверхностной плотностью заряда $\sigma_{+0.2}$ (б) и $\sigma_{-0.2}$ (в) (синяя трубка - звенья Ala, белая – звенья Arg, красная – Asp. Желтым показаны атомы Au наночастицы).

Использованная в расчетах поверхностная плотность σ заряда сферической наночастицы определялась как $\sigma_{\pm 0.2} \approx \pm 4e/nm^2$. При этом значении σ атомы на поверхности наночастицы имели парциальный заряд $\pm 0.2e$.

На рисунке 3а изображена конформационная структура полипептида $(ADA_2RA)_{50}$ на поверхности нейтральной золотой наночастицы. На рисунках 3б-3в показаны конформационные структуры этого полиамфолитного полипептида, полученные по результатам МД-моделирования на поверхности заряженной сферической золотой наночастицы. При увеличении абсолютной величины поверхностной плотности электрического заряда на наночастице конформационная структура адсорбированного полиамфолита существенно изменялась. Аминокислотные остатки полипептида, одноименного с поверхностью знака заряда, отдалялись от наночастицы, а противоположного – располагались на поверхности НЧ. Начиная со значений поверхностной плотности заряда $\sigma_{\pm 0.15}$ и $\sigma_{\pm 0.2}$ все одноименно заряженные по отношению к поверхности НЧ аминокислотные остатки смещались от нее на максимальное расстояние, которое было тем больше, чем большее число нейтральных звеньев находилось между разноименно заряженными остатками в макроцепи.

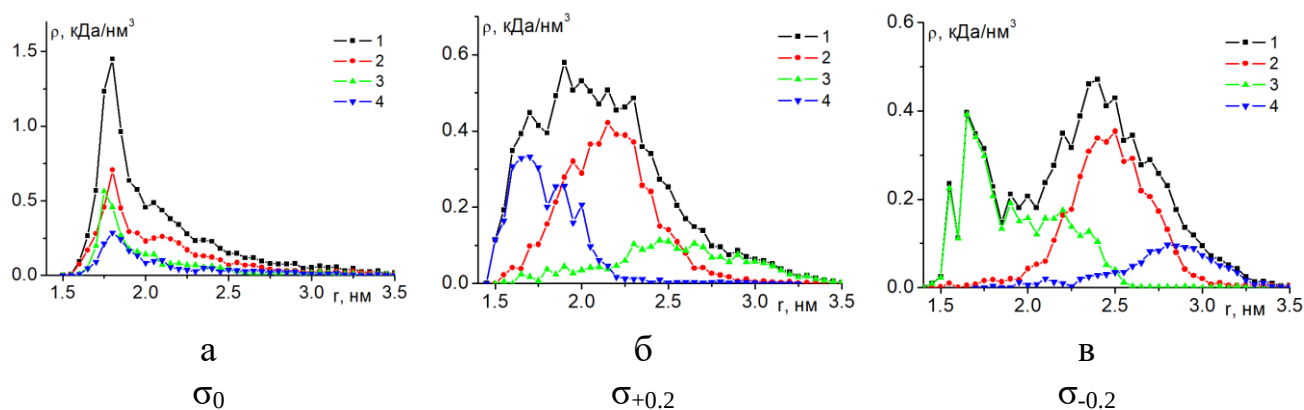


Рис. 4. Радиальные зависимости средней плотности атомов полипептида $(ADA_2RA)_{50}$ на нейтральной (а), положительно (б) и отрицательно (в) заряженной сферической золотой наночастице с поверхностной плотностью заряда $\sigma_{+0.2}$ (б) и $\sigma_{-0.2}$ (в). На рисунке: 1 – зависимость средней плотности по всем атомам полипептида; 2, 3 и 4 – усредненные плотности по типам аминокислотных остатков Ala, Arg и Asp.

Сформированные характерные радиальные распределения средней плотности атомов полипептида с максимумом радиальной плотности у поверхности наночастицы хорошо аппроксимируются кривыми, построенными на основе выражений, полученных методами статистической теории макромолекул [4, 12-14]. При этом радиальные зависимости средней плотности атомов по типам звеньев в целом повторяют профиль радиального распределения плотности по всем атомам полипептида.

При рассмотренном значении поверхностной плотности заряда на металлической наночастице формировалась упорядоченная конформационная структура адсорбированного полиамфолита, состоящая из трех слоев: двух разноименно заряженных и нейтрального, который располагался между ними (Рис. 4 б,в). Видно, что профили радиальных распределений средней плотности атомов различных аминокислотных остатков смещены относительно друг друга, а радиальное распределение средней плотности по всем атомам значительно отличается от случая нейтральной поверхности (рис. 4а). У положительно заряженной поверхности наночастицы (рис. 3б) располагается слой из отрицательно заряженных аминокислотных остатков Asp, посередине – из нейтральных звеньев Ala, а на периферии расположены положительно заряженные аминокислотные остатки Arg (рис. 4б). Для отрицательно заряженной поверхности наночастицы (рис. 3в) наблюдается зеркальное расположение слоев аминокислотных остатков (рис. 4в). На рисунках 4б и 4в видно, что происходит набухание обволакивающей опушки по всей поверхности сферической наночастицы, в отличие от случая поляризованной во внешнем статическом электрическом поле металлической наночастицы [14], где наблюдалось вытягивание макромолекулярной опушки полиамфолита вдоль направления вектора внешнего электрического поля. Толщина полипептидной опушки на заряженной поверхности наночастицы тем больше, чем больше число нейтральных звеньев между разноименно заряженными остатками в макроцепи. Для полипептида $(ADA_2RA)_{50}$ она составляет величину около 2 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., Чмерева Т.М. // Вестник ОГУ. 2008.-№9. -С. 177-184.
2. Кучеренко М.Г., Кручинин Н.Ю., Чмерева Т.М. // Вестник ОГУ. 2010. -№5. -С. 124-135.
3. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистич. физика макромолекул. М.: Наука, 1989.
4. Кручинин Н.Ю., Кучеренко М.Г. // Коллоид. жур. 2019. –Т. 81. № 2. - С. 175–184.
5. Климов В.В., Дюклуа М., Летохов В.С. 2001. – Т. 31. - № 7. – С. 569-586.
6. Кучеренко М.Г., Измоденова С.В., Чмерева Т.М. // Вестник ОГУ. 2013. №1. С. 112-120.
7. Phillips J.C., Braun R., Wang W., at al. // J. Comput. Chem. 2005. V. 26. P. 1781.
8. MacKerell A.D. Jr., Bashford D., Bellott M.// J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102. P. 3586.
9. Heinz H., Vaia R.A., Farmer B.L., at al. // J. Phys. Chem. C. 2008. V. 112. P. 17281.
10. Darden T., York D., Pedersen L. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 10089.
11. Jorgensen W.L., Chandrasekhar J., Madura J.D., Impey R.W., Klein M.L. // J. Chem. Phys. 1983. V. 79. P. 926.
12. Kucherenko M.G., Rusinov A.P., Chmereva T.M., at al. // Optics. and Spectr., 107 2009. 480. <https://doi.org/10.1134/S0030400X0909029X>.
13. Kucherenko M. G., Izmodenova S. V., Kruchinin N.Yu., at al. // High Energy Chemistry, 43 (2009) 592. <https://doi.org/10.1134/S0018143909070169>.
14. Kruchinin N.Yu., Kucherenko M.G. Colloid Journal, 82 (2020) 136. <https://doi.org/10.1134/S1061933X20020088>

СПИН-СЕЛЕКТИВНОЕ ТУШЕНИЕ ВОЗБУЖДЕННЫХ Т-ЦЕНТРОВ МОЛЕКУЛЯРНЫМ КИСЛОРОДОМ НА ПОВЕРХНОСТИ ЛЮМИНЕСЦИРУЮЩЕЙ ФЕРРОМАГНИТНОЙ НАНОЧАСТИЦЫ

Кучеренко М. Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Пеньков С.А., Неясов П.П.

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

В случае кислородсодержащих растворов наночастиц (НЧ), с адсорбированными на их поверхности органическими молекулами, реакции этих молекул в триплетном (Т) электронно-возбужденном состоянии с молекулами O_2 , т.е. $T + {}^3\Sigma_g^-(O_2)(i)$ и $T + {}^1\Delta_g(O_2)(ii)$ протекают на поверхности частицы [1]. В силу нанометрового радиуса частицы, ее поверхность имеет существенную кривизну, что находит отражение в специфике диффузионных перемещений молекул O_2 по этой поверхности. Для сферических частиц вектор нормали $\mathbf{n}'$ в любой точке поверхности направлен по радиусу R частицы. Во внешнем магнитном поле напряженности $\mathbf{H}_0$ ферромагнитные наночастицы (ФНЧ) приобретают магнитный момент $\mathbf{m}$, который создает вокруг НЧ большое добавочное поле $\mathbf{H}_m(\mathbf{r})$ магнитодипольного типа. Тогда спин-селективная реакция (i) в результирующем поле $\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_m(\mathbf{r})$ на поверхности НЧ характеризуется специфической зависимостью от угловых координат точек поверхности сферы [2-4]. При наличии остаточной намагниченности ферромагнитной частицы вектор $\mathbf{m}$ ее магнитного момента может быть представлен следующим выражением [4]

$$\mathbf{m} = \frac{4\pi R_1^3}{2\mu_2 + \mu_1} \mathbf{M}_0 + \frac{\mu_1 - \mu_2}{2\mu_2 + \mu_1} R_1^3 \mathbf{H}_0, \quad (1)$$

где $\mathbf{M}_0$ – вектор остаточной намагниченности ФНЧ, $\mathbf{H}_0$ – напряжённость внешнего магнитного поля, μ_1, μ_2 – магнитные проницаемости ферромагнитной частицы и ее окружения (среды). Первое слагаемое в правой части (1) учитывает вклад остаточной намагниченности в суммарный магнитный момент $\mathbf{m}$ ФНЧ. При выключении внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_0$, в пространстве вне частицы остаётся лишь магнитное поле, обусловленное остаточной намагниченностью $\mathbf{M}_0$.

Скорость генерации средней плотности n_Δ электронных ${}^1\Delta_g(O_2)$ – возбуждений в реакции (ii) на поверхности сферической ФНЧ определяется следующим выражением [1], [5] (верхние индексы у величин в скобках указывают на их соответствующую пространственную размерность d (3 или 2))

$$\left(\frac{dn_\Delta}{dt}\right)^+ = \left[K_\Sigma^{(3)}(\theta) + \frac{4\pi D_\Sigma^{(2)} \kappa b}{\ln(D_\Sigma^{(2)} t / r_0^2)} \right] n_{ox}^{(3)} n_T(t). \quad (2)$$

Кроме латерального тушения вклад в скорость генерации (2) могут давать акты радиальной атаки на Т-центр молекул O_2 , приходящих из объема растворителя. Эта доля может быть записана в виде $K_{\Sigma}^{(3)} n_T(t) n_{\Sigma} \approx K_{\Sigma}^{(3)} n_T(t) n_{ox}$. Верхний индекс «3» у константы скорости указывает на пространственную размерность процесса. Таким образом, $K_{\Sigma}^{(3)}$ – бимолекулярная (объемная) константа скорости тушения Т-центров кислородом из растворителя (жидкой фазы); κ – коэффициент растворимости молекул O_2 в $^3\Sigma_g^-$ состоянии внутри сферического приповерхностного слоя наночастицы, где $D_{\Sigma}^{(2)}$ – коэффициент диффузии невозбужденных молекул кислорода в слое; $n_{ox}^{(3)}$ – объемная плотность невозбужденных молекул кислорода в растворителе; r_0 – эффективный радиус для «латерального» тушения Т-центров. Знак «+» у производной в (2) означает, что учитываются лишь члены, способствующие появлению возбуждений, но не их дезактивации. Результирующая скорость генерации дельта-кислорода будет определяться суммой двух рассмотренных параллельных вкладов.

Временная зависимость концентрации триплетных центров в растворе будет иметь вид

$$n_T(t|\theta) = n_0 \exp\left\{-\frac{t}{\tau_T} - n_{ox}^{(3)} \left(K_{\Sigma}^{(3)}(\theta)\right) t + \int_0^t 4\pi D_{\Sigma}^{(2)} \frac{\kappa b}{\ln(D_{\Sigma}^{(2)} \tau / r_0^2)} d\tau\right\}, \quad (3)$$

Для описания специфической кинетики реакции (ii), как и в работе [5], введем плотность вероятности $\rho_{\Delta}(\vartheta|t, t')$ обнаружить отдельное $^1\Delta_g(O_2)$ -возбуждение на угловом расстоянии (параллели) ϑ в момент t , если оно было образовано в точке $\vartheta = 0$ в момент t' . Функция $\rho_{\Delta}(\vartheta|t, t')$ удовлетворяет уравнению [5]

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{\Delta}(\vartheta|t, t') = D_{\Delta}^{(2)} \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \rho_{\Delta}(\vartheta|t, t') - \tau_{\Delta}^{-1} \rho_{\Delta}(\vartheta|t, t') - K_{\Delta}(t) n_0 \exp(-t/\tau_T) \rho_{\Delta}(\vartheta|t, t'); \quad \rho_{\Delta}(\vartheta, t = t') = \delta(\cos \vartheta - 1)/(2\pi). \quad (4)$$

Простой заменой переменных

$$\rho_{\Delta}(\vartheta|t, t') = G_{\Delta}^{(2)}(\vartheta, t - t') \exp\left[-(t - t')/\tau_{\Delta} - n_0 \int_{t'}^t K_{\Delta}(\tau) \exp(-\tau/\tau_T) d\tau\right] \quad (5)$$

уравнение (4) сводится к уравнению свободной диффузии на сфере, с дельта-функциональным начальным условием для плотности $G(\vartheta, t - t')$, т.е. диффузионной функции Грина в угловом пространстве. Одночастичная функция Грина $G(\vartheta, \varphi, t|\vartheta', \varphi', \tau)$ уравнения диффузии на поверхности сферы радиуса

Рс коэффициентом диффузии $D_\Omega = D_R/R^2$ в угловом пространстве $\Omega = (\theta, \varphi)$ и начальным условием в момент $t=t'$

$$G(\theta, \varphi, t | \theta', \varphi', t') = (1/2\pi) \delta(\cos \theta - \cos \theta') \delta(\varphi - \varphi') (6)$$

имеет вид [6]

$$G(\theta, \varphi, t | \theta', \varphi', \tau) = \frac{1}{4\pi} \sum_l (2l+1) \exp[-D_\Omega l(l+1)(t-t')] P_l(\cos \beta), \quad (7)$$

где $\cos \beta(\Omega, \Omega') = \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\varphi - \varphi')$, $P_l(\cos \beta)$ – полином Лежандра степени l . Для аксиально-симметричной задачи с осью z и $\theta' = 0$ функция Грина (7) упрощается до $G(\vartheta, t - t')$ и принимает вид

$$G_\Delta^{(2)}(\vartheta, t - t') = \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\cos \vartheta) \exp[-l(l+1)D_\Delta^{(2)}(t-t')], \quad (8)$$

где $D_\Delta^{(2)}$ – коэффициент латеральной диффузии молекул дельта-кислорода.

Описание спиновой динамики системы в анизотропном магнитном поле индукции $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ наночастицы может быть произведено в рамках формализма спин-гамильтониана $\hat{H}(\Omega_1, \Omega_2)$ Т-Т-пары молекул [6-7]

$$\hat{H}(\Omega_1, \Omega_2) = g_1 \mu_B B(\Omega_1) \hat{S}_{1z} + g_2 \mu_B B(\Omega_2) \hat{S}_{2z} - 2J_{exc}(r_{12}) \hat{S}_1 \hat{S}_2 - \hat{S}_1 \vec{D}(\omega_1) \hat{S}_1 - \hat{S}_2 \vec{D}(\omega_2) \hat{S}_2. \quad (9)$$

Первые два слагаемых в (9) определяют зеемановское взаимодействие одиночных триплетов (с различными g -факторами g_1 и g_2) Т-Т-пары с локальным магнитным полем индукции $B(\Omega_j)$ на сферической поверхности с угловыми координатами $\Omega_j = (\theta_j, \varphi_j)$ (вектор $\mathbf{B}$ результирующего поля уже не направлен вдоль оси z), создаваемым ферромагнитной наночастицей в точках размещения молекул Т и ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$, третье – межмолекулярное обменное взаимодействие с обменным интегралом $J_{exc}(r_{12})$, зависящим от расстояния r_{12} между триплетными парами Т– ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$, а два последних – внутритриплетные спин-спиновые взаимодействия. Операторы $\hat{S}_1, \hat{S}_2$ – векторные операторы электронных спинов молекул Т и ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$; $\vec{D}(\omega_j)$ – тензор магнитного диполь-дипольного взаимодействия; ω_j – угловые параметры, задающие ориентацию молекулы Т или ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$; μ_B – магнетон Бора. Гамильтониан спин-спинового взаимодействия $\hat{V}_{SS} = -\hat{S}_1 \vec{D}_1 \hat{S}_1 - \hat{S}_2 \vec{D}_2 \hat{S}_2$ учитывает только магнитодипольные внутримолекулярные взаимодействия. Межтриплетное спин-спиновое взаимодействие предполагается малым $J_{exc}(r_{12}) \rightarrow 0$ из-за относительно большого радиуса молекулярной пары Т– ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$. Оператор обменного взаимодействия диагонален в парном базисе $|JM\rangle$ состояний суммарного электронного спина $\hat{J} = \hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ Т– ${}^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары реагентов (J, M – квантовые числа суммарного спинового момента и его z -проекции).

Общее решение задачи для спинового оператора $\hat{\rho}(t)$ плотности $T-^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары известно [4] даже в общем случае явного учета актов тушения (i) в спиновой динамике

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

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

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

а $\hat{\Lambda} = K_S |00\rangle\langle 00| = K_S \hat{P}_S$ – оператор $T-^3\Sigma_g^-(O_2)$ -тушения, K_S – скорость его элементарного акта, а $\hat{P}_S = |00\rangle\langle 00|$ – оператор проектирования на синглетное спиновое состояние $T-^3\Sigma_g$ -пары реагентов; K_{-1} – скорость распада когерентной Т-Т-пары после неосуществленного акта реакции (i). Тогда $\text{Tr}\{\hat{P}_S, \hat{\rho}\}_+ = \sum_{J,M} \langle JM | (\hat{P}_S \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{P}_S) | JM \rangle = \langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle$, а начальное условие для синглетного элемента $\langle 00 | \hat{\rho} | 00 \rangle$ матрицы плотности выбирается равным его равновесному значению, т.е. $\langle 00 | \hat{\rho}(0) | 00 \rangle = 1/9$. В некоторых случаях скорость K_{-1} такого распада может быть отождествлена со скоростью десорбции $^3\Sigma_g^-(O_2)$ -молекулы в объем растворителя (область вне приповерхностного слоя наночастицы), либо со скоростью ее спиновой релаксации – в зависимости от того, какая из двух этих скоростей становится определяющей в реакции (i). Спин-гамильтониан (9) позволяет проследить вклад различных механизмов в общую спиновую динамику $T-^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары, а также выявить эффекты интерференции между ними.

Для описания неселективной по спину реакции кросс-аннигиляции (ii) с помощью плотности вероятности $\rho_\Delta(\vartheta|t, t')$ можно построить функцию распределения $g_\Delta(\vartheta, t)$ системы Т-молекул, относительно отдельного $^1\Delta_g(O_2)$ -возбуждения, расположенного в центресферического сегментана S_R

$$g_\Delta(\vartheta, t) = \int_0^t \rho_\Delta(\vartheta | t, t') W(t - t') \frac{dn_\Delta}{dt} \Big|_{t=t'} dt', \quad (11)$$

с учетом кинетики десорбции-сорбции дельта-возбуждений приповерхностным слоем частицы, которая представлена подинтегральным фактором $W(t-t')$, определенным одномерной диффузионной функцией Грина в направлении $\mathbf{n}'$ с отражением на сфере S_R ФНЧ

$$G_\Delta^{(1)}(r - R, \xi; t - \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_\Delta^{(1)}(t - \tau)}} \exp\left[-\frac{(r - R - \xi)^2}{4D_\Delta^{(1)}(t - \tau)}\right] \exp\left[-\frac{(r - R + \xi)^2}{4D_\Delta^{(1)}(t - \tau)}\right] \quad (12)$$

($\xi \in [R, R + b]$)

Измеряемая в эксперименте интенсивность $I_{DF}(t)$ замедленной флуоресценции кислородонасыщенного коллоидного раствора наночастиц с адсорбированными молекулами люминофора определяется следующим интегралом от распределения (11)

$$I_{DF}(t) \sim n_T(t) \int_{4\pi} g_{\Delta}(\vartheta, t) \theta_H(\vartheta - \vartheta_0) d\Omega, \quad (13)$$

где единичная тета-функция $\theta_H(\vartheta)$ Хевисайда определяет свободный от Т-центров угловой сектор с характерным параметром ϑ_0 . Это обстоятельство необходимо учитывать, поскольку Т-центры органических молекул на сфере распределены коррелированно в результате процесса S-S-аннигиляции возбуждений, и не встречаются на относительных расстояниях меньших, чем $r = R\vartheta_0$.

Диффузионные блуждания молекул кислорода на поверхности наносферы

В условиях диффузии молекул O_2 по сфере S_R выражение для константы скорости $K_{\Sigma}(\Omega')$ бимолекулярной реакции $T + {}^3\Sigma_g^-(O_2)(i)$ на поверхности S_R принимает вид

$$K_{\Sigma}(\Omega') = K_S S_R \int_0^{\infty} dt \iint_{S_R} U(l(\Omega, \Omega')) \rho_{00}(\Omega, \Omega', t) G_{\Sigma}(\Omega, t | \Omega') \exp[-(K_S + K_{-1})t] R^2 d^2\Omega \quad (14)$$

где $d^2\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$, $l(\Omega, \Omega') = R\sqrt{2(1 - \cos \beta)}$ – расстояние между двумя точками на сфере радиуса R ; $\cos \beta(\Omega, \Omega') = \cos \vartheta \cos \vartheta' + \sin \vartheta \sin \vartheta' \cos(\varphi - \varphi')$; $U(l) = U_0 \exp(-2l/l_0)$ – скорость элементарного акта ТТА. Удельную скорость кросс-аннигиляции $K_{\Delta}(t|\Omega')$ можно записать в виде интеграла с переопределенными параметрами скорости U элементарного акта реакции (ii)

$$K_{\Delta}(t|\Omega', \xi) = S_R b \int_R^{\infty} dr' \iint_{S_R} U_{\Delta}(r, r') \theta_H(\vartheta - \vartheta_0) G_{\Delta}^{(2)}(\Omega, t | \Omega') G_{\Delta}^{(1)}(r' - R, \xi; t) R^2 d^2\Omega. \quad (15)$$

Меридиональный угол ϑ' задает ориентацию локального направления n' относительно вертикальной лабораторной оси z , параллельной постоянно-му внешнему полю индукции B_0 .

Неоднородное и анизотропное магнитное поле $B(r', \vartheta')$ ферромагнитной сферической наночастицы изменяет скорость восполнения постепенно формирующейся в ходе спин-селективной реакции (i) обедненной синглетной населенности $\langle 00 | \rho | 00 \rangle$ когерентной $T-{}^3\Sigma_g^-$ пары молекул [7-8].

Как было показано ранее в работах [8-9], влияние магнитного поля на тушение триплетного экситона молекулярным кислородом может зависеть от ряда различных факторов. Важным среди них является соотношение энергий E_{SS} внутритриплетных спин-спиновых взаимодействий Т- и $^3\Sigma_g^-(O_2)$ -молекул. Для молекулы кислорода в основном состоянии величина E_{SS} достигает значений $\sim 4 \text{ см}^{-1}$, тогда как типичное значение E_{SS} для многих органических молекул составляет $\sim 0.1 \text{ см}^{-1}$. При этом для наблюдения магнитных эффектов остается важной разница энергий для термов различной мультиплетности [9], определяемая обменным интегралом J_{exc} . С учетом этого обстоятельства, были проведены расчеты (рис. 1-2) эволюции населенности $\rho_{00}(t)$ синглетного состояния Т- $^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары молекул при одинаковой величине индукции $B = 0,35 \text{ Тл}$ магнитного поля (обе молекулы находятся на одной параллели сферы), но при различных значениях параметра J_{exc} обменного взаимодействия. Значения других параметров спин-гамильтониана (9), использованных при расчетах: $g_1 = 2$; $g_2 = 2.002$; $D_1 = 0.1, D_2 = 4 \text{ см}^{-1}$; $E_1 = 0,01, E_2 = 0,01 \text{ см}^{-1}$; $K_S = 0.02 \text{ см}^{-1}$. Дальнейшее увеличение параметра J_{exc} обменного взаимодействия от 1 до 10 см^{-1} приводило к уменьшению глубины модуляции населенности $\rho_{00}(t)$, вплоть до полного исчезновения осцилляций. На рис. 3 и 4 отражена спиновая динамика когерентной Т- $^3\Sigma_g^-$ -пары молекул в неоднородном магнитном поле ФНЧ. Расчеты проведены в условиях опустошенной населенности парного синглета в стартовый момент и с учетом градиентного механизма влияния магнитного поля на спиновую динамику. В случае отсутствия внешнего магнитного поля спиновая динамика Т- $^3\Sigma_g^-$ -пары определяется лишь внутримолекулярным спин-спиновым взаимодействием. Во внешнем магнитном поле имеет место поляризация ФНЧ. Представлена кинетика населенности $\langle 00|\rho(t)|00\rangle$ синглетного спинового состояния Т- $^3\Sigma_g^-$ -пары молекул, адсорбированных на ферромагнитной наночастице при различных вариантах локализации этих молекул. Параметры моделирования: $K_{-1} = 10^7 \text{ с}^{-1}$, $\omega_{exc} = 10^7 \text{ с}^{-1}$, $\Delta g = 0$, $\omega_{ss}^{(1)} = \omega_{ss}^{(2)} = 10^7 \text{ с}^{-1}$, $K_s = 10^8 \text{ с}^{-1}$, $R = 10 \text{ нм}$, $B_0 = 0.1 \text{ Тл}, B \approx 240 \text{ мТл}$.

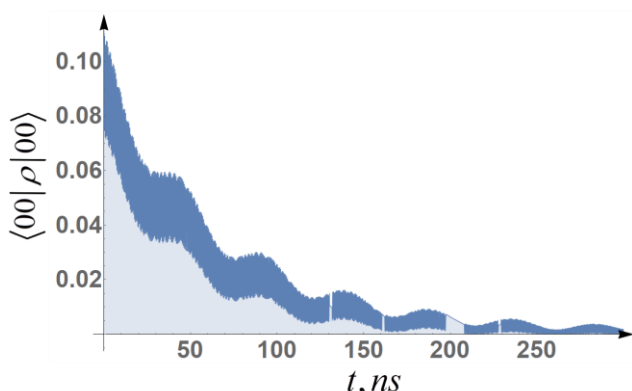


Рис. 1. Эволюция населенности синглетного спинового состояния Т- $^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары молекул вблизи ферромагнитной наночастицы при $J_{exc} = 0.01 \text{ см}^{-1}$;

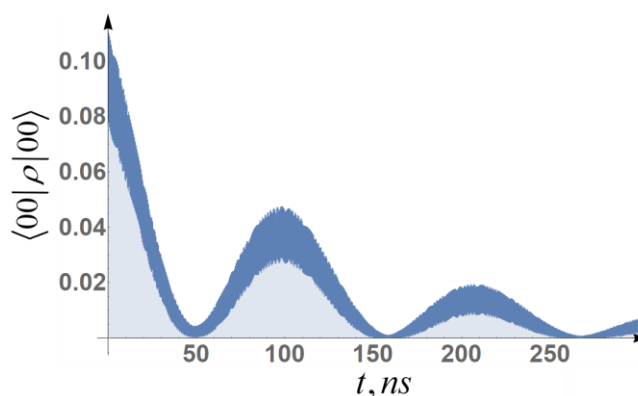


Рис. 2. Эволюция населенности синглетного спинового состояния Т- $^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары молекул вблизи ферромагнитной наночастицы при $J_{exc} = 0.1 \text{ см}^{-1}$;

Таким образом, магнитная модуляция скорости (14) реакции (i) будет обуславливать магнитную зависимость выхода (13) реакции (ii).

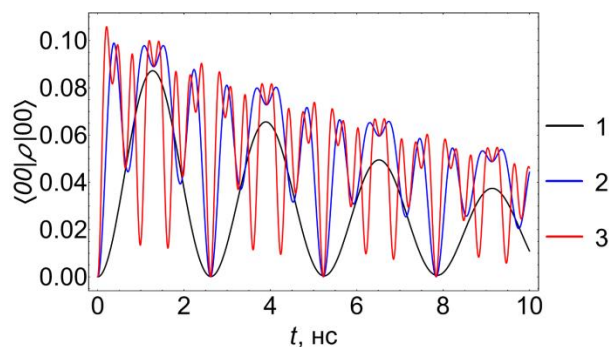


Рис. 3. Кинетика населенности синглетного спинового состояния $T-{}^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары молекул при их локализации в различных областях поверхности ферромагнитной наночастицы: (1) – обе молекулы – на полюсе, угол $\theta=0^\circ$, индукция локального поля $B\approx 240$ мТл; (2) – Т молекула – на полюсе, а O_2 – на параллели с углом $\theta=45^\circ$, $B\approx 70$ мТл; (3) – Т молекула – на полюсе, O_2 – на экваторе с $\theta=90^\circ$, $B\approx 100$ мТл.

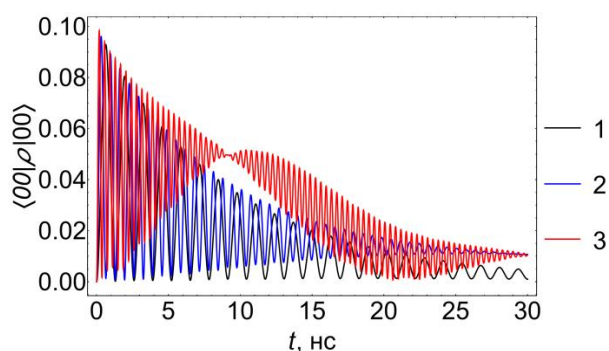


Рис. 4. Кинетика населенности синглетного спинового состояния $\langle 00|\rho(t)|00\rangle T-{}^3\Sigma_g^-(O_2)$ -пары молекул при их локализации на магнитном полюсе ферромагнитной кобальтовой наночастицы и различных частотах спин-спинового взаимодействия ω_{ss} : (1) – $\omega_{ss}^{(1)} = \omega_{ss}^{(2)} = 1 \cdot 10^7$ с $^{-1}$; (2) – $\omega_{ss}^{(1)} = 1 \cdot 10^7$ с $^{-1}$, $\omega_{ss}^{(2)} = 3 \cdot 10^7$ с $^{-1}$; (3) – $\omega_{ss}^{(1)} = 1 \cdot 10^7$ с $^{-1}$, $\omega_{ss}^{(2)} = 6 \cdot 10^7$ с $^{-1}$.

Форма импульса сигнала кросс-аннигиляционной замедленной флуоресценции $I_{DF}(t)$, индуцированной синглетным кислородом, определяется выражением (13), отражающим суммарную по поверхности наночастицы интенсивность свечения адсорбированных органических молекул.

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

Список литературы

1. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М. Процессы с участием электронно - возбужденных молекул на поверхностях твердых адсорбентов. Оренбург: Оренбургский государственный университет. Монография. 2010. -346 с.
2. Кучеренко М. Г., Неясов П. П. Особенности спиновой динамики и аннигиляции триплетных молекулярных возбуждений в нанореакторах с ферромагнитными частицами // Химическая физика и мезоскопия. 2018. Т. 20, № 1. С. 33-48.
3. Кучеренко М. Г., Алимбеков И.Р., Неясов П.П. Особенности аннигиляционной замедленной флуоресценции органических молекул вблизи сферического ферроплазмонного нанокомпозита// Всеросс. научно-метод. конфер. Университет. комплекс как регион. центр образования, науки и культуры. Оренбург: ОГУ. 2020. – С. 2222-2229.

4. Кучеренко М. Г., Алимбеков И. Р., Неясов П. П. Замедленная флуоресценция молекул на поверхности слоистой ферроплазмонной наночастицы // Химическая физика и мезоскопия. 2021. Том 23, № 3 С. 272-291. <https://doi.org/10.15350/17270529.2021.3.25>
5. Кучеренко М.Г. О кинетике реакции синглетного кислорода с неподвижными сенсбилизаторами // Химическая физика. 2001 . Т .20. №3. С. 31-36.
6. Кучеренко М.Г., Чмерева Т.М., Человечков В.В. Кинетика кросс - аннигиляции локализованных электронных возбуждений в потенциальном поле стенок пористой наноструктуры // Химическая физика и мезоскопия.- 2011.- Т.13.- № 4.- С. 483-493.
7. Кучеренко М.Г., Пеньков С.А. Особенности фотолюминесценции кислородонасыщенных пленок метокси-полифениленвинилена (МЕН-PPV) // Оптика и спектроскопия. 2022. -Том 130. Вып. 5. –С. 690-697.
DOI: 10.21883/OS.2022.05.52422.12-22
8. Kucherenko M.G., Penkov S.A. Triplet exciton reactions in MEH-PPV films registered by accompanying magneto-sensitive photoluminescence // Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry. 437 (2023) 114440. 1010-6030/© 2022 Elsevier B.V.doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114440.
9. Geacintov N.E., Swenberg C.E. Possible Effects of Magnetic Fields on the Quenching of Triplet Excited States of Polynuclear Hydrocarbons by Oxygen // J. Chem. Phys., 1972, N57, pp. 378-389.

ИНДУЦИРОВАННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ КРАСИТЕЛЯ В МОДИФИЦИРОВАННОЙ ПЛЕНКЕ ХИТОЗАНА

**Лантух Ю.Д., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Летута С.Н., доктор 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»**

Введение

В настоящей работе получены образцы полимерных пленок хитозана с добавками желатина, активированные смесью органических красителей эозина и родамина С, которые могут рассматриваться в качестве активной лазерной среды.

Одним из применений материалов на основе системы биополимер – органический краситель является создание высокоэффективных лазеров. Лазеры на красителях с плавной непрерывной перестройкой длины волны излучения на протяжении многих лет используются для спектроскопических исследований, в том числе для диагностики медико-биологических объектов. В настоящее время создаются лазерные биополимерные структуры, которые смогут стать рабочими элементами для устройств микро- и оптофлюидики (ДНК-лазеры [1]), lab-on-chip лабораторий, микроаналитических систем.

Актуальными задачами в совершенствовании лазеров на красителях являются увеличение мощности и расширение спектра их генерации. Один из способов решения таких задач это использование двух- и многокомпонентных растворов красителей, в которых энергия электронного возбуждения от молекул люминофора-донора передаётся молекулам акцептора, обеспечивающего генерацию. Процесс индуктивно-резонансного переноса энергии получил название «Фёрстеровский резонансный перенос энергии» (Förster resonance energy transfer, FRET). Использование Д–А (Д – донор, А – акцептор энергии возбуждения) растворов красителей позволяет получить лазерное излучение таких веществ, которые имеют малый коэффициент поглощения на длине волны возбуждения и, поэтому, в однокомпонентных растворах не генерируют. Уже в первых работах, посвящённых влиянию переноса энергии электронного возбуждения на генерацию двухкомпонентных систем [2] (родамин 6Ж – крезиловый фиолетовый), при накачке азотным лазером была получена генерация на акцепторной компоненте в видимой области спектра.

Ранее, в работе [3] нами были получены структуры типа «гость-хозяин» с управляемыми свойствами на основе комплексов красителя акридинового оранжевого с ДНК для применений в молекулярной фотонике. В работе [4] предложен способ существенного увеличения выхода люминесценции красите-

лей акридинового оранжевого и сульфородамина В в желатин-хитозановых пленках за счет модификации структуры желатина добавкой катионного полимера хитозана.

Целью настоящей работы является демонстрация метода управления структурой хитозан-желатиновой пленки для получения биополимерной лазерной среды. В такой среде наблюдается эффективный индуктивно-резонансный перенос энергии возбуждения от донора (эозин) на акцептор (родамин С), что может быть положено в основу создания непрерывного и импульсного FRET лазеров.

Материалы и методы исследования

В работе использовались биополимеры: фотографический желатин марки А, хитозан из панцирей креветок со степенью деацетилирования $\geq 75\%$ (MP Biomedicals). Красители (Кр) эозин Y (Э) и родамин С (РС) (Sigma-Aldrich) использовали без дополнительной очистки.

Желатин (Ж) заливали дистиллированной водой (10% по массе), после набухания получали однородный золь при 60°C. Хитозан (Х) растворялся в слабой уксусной кислоте. Для приготовления смеси желатина с хитозаном растворы желатина и хитозана смешивались в нужной пропорции. В растворы полимеров вводили растворенные в воде красители. Плёнки готовили методом полива на стеклянные пластинки. Толщину пленок определяли исходя из объема и площади (а также измеряли микрометрическим индикатором), и в сравнительных экспериментах с Кр в матрицах Ж, Х и Х/Ж поддерживали одинаковой. Концентрация красителей в сухой пленке оценивалась расчетным методом и составляла порядка 1.5×10^{-2} моль/л (точные значения указаны в описании соответствующих экспериментов).

Спектры поглощения и флуоресценции пленок регистрировали на оптоволоконном спектрометре AvaSpec 2048 (Avantes), работающем в режиме полихроматора. Для возбуждения стационарной флуоресценции использовали DPSS cw лазер KLM-473 (473 нм) (ФТИ-Оптроник). Схема возбуждения образца – фронтальная. В качестве импульсного источника возбуждения флуоресценции использовали YAG-Nd лазер LQ-129 (532 нм, энергия импульсов 1-5 мДж) (Солар ЛС).

Для исследования суперлюминесценции образцов использовалась схема с поперечной накачкой, подобная схеме из работы [4]. Пучок излучения импульсного лазера накачки фокусировался цилиндрической линзой на поверхности образца. Область возбуждения имела форму полосы шириной менее миллиметра. Флуоресценция снималась с торца пленки.

Результаты и обсуждение

На рисунке 1 приведены спектры люминесценции родамина С, эозина и смеси красителей с соотношением РС/Э = 0,25 в хитозан-желатиновой матрице,

полученные при возбуждении излучением длины волны 473 нм (DPSS cw лазер, 640 мкВт). Молярная концентрация эозина $(1.5 \pm 0.1) \times 10^{-2}$ М, молярная концентрация родамина С $(0.4 \pm 0.1) \times 10^{-2}$ М.

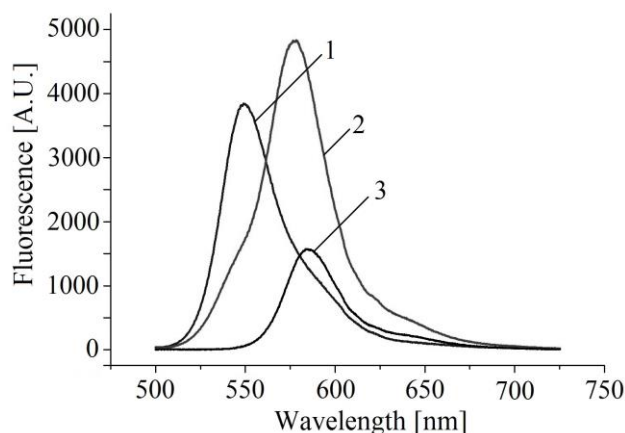


Рисунок 1 – Спектры люминесценции родамина С, эозина и смеси красителей в хитозан-желатиновой матрице, отношение Ж/Х = 0,67.

1 – эозин; 2 – смесь красителей РС/Э = 0,25; 3 – родамин С

Из рисунка видно, что в смешанной хитозан-желатиновой матрице происходит резкое ($> 300\%$!) увеличение флуоресценции родамина С. Максимум этой флуоресценции приходится на 580 нм, а флуоресценция донора (Э) в значительной степени потушена.

Полученный результат свидетельствует о высокой эффективности процесса безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения между Э и РС и может быть положен в основу создания непрерывного FRET лазера в рассматриваемой системе.

Увеличению эффективности переноса энергии способствовал специальный подбор соотношения компонентов полимерной матрицы, что позволило использовать исключительно высокие ($> 10^{-2}$ М) концентрации Д и А без заметного проявления ассоциации красителей в системе, а также применять для возбуждения флуоресценции низкоинтенсивное излучение.

Адаптация полимерной матрицы под решаемую задачу основывалась на следующих положениях. И эозин и родамин С являются анионными красителями и поэтому активно связываются с катионными аминок группами хитозана. Положение и форма спектров флуоресценции Э и РС свидетельствует в пользу последнего утверждения. Однако в растворах хитозана на этапе формирования пленок контакт Кр и аминок групп затруднен вследствие высокой вязкости растворов. В то же время известно [5], что в золе хитозана при добавлении некоторого количества желатина вязкость раствора существенно уменьшается. Этот эффект обусловлен образованием полиэлектролитных комплексов (ПЭК) хитозан-желатин в растворе. ПЭК формируются в результате электростатических взаимодействий между положительно заряженными аминок группами хитозана и

отрицательно заряженными аминокислотными остатками (глутаминовой Glu и аспарагиновой Asp кислот) желатина. Если массовая доля Ж меньше, чем Х, то такие ПЭК являются нестехиометричными и размеры их относительно малы, что и служит причиной уменьшения вязкости.

Другая возможная причина понижения вязкости раствора Х при добавлении Ж следующая. Макромолекулы хитозана в кислой среде (раствор уксусной кислоты, $\text{pH} \approx 4$) сильно вытянуты благодаря электростатическому отталкиванию положительно заряженных аминогрупп. Вязкость такого раствора в значительной мере обусловлена водородными связями между цепями хитозана. При добавлении желатина отрицательно заряженные аминокислотные остатки желатина экранируют положительные заряды аминогрупп хитозана, что приводит к ослаблению водородных связей [6]. Желатин в этом случае выступает в роли «пластификатора».

Таким образом, добавка небольших концентраций желатина в раствор при приготовлении пленок хитозана с анионными Кр может облегчить заполнение катионных сайтов связывания красителем, не приводя, однако, к заметному взаимодействию Кр с желатином.

Представляло интерес исследование импульсного режима возбуждения флуоресценции в рассматриваемой системе.

На рисунке 2 приведен спектр флуоресценции смеси красителей родамин С и эозин в хитозан-желатиновой матрице при импульсном возбуждении излучением на длине волны 532 нм второй гармоники Nd:YAG лазера.

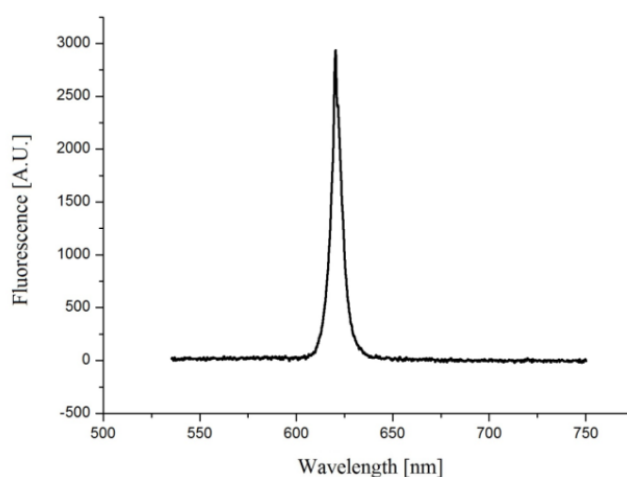


Рисунок 2 – Спектр флуоресценции смеси красителей родамин С и эозин в соотношении РС/Э = 1/4 в хитозан-желатиновой матрице с соотношением Ж/Х = 0,67. Энергия импульса возбуждения 4,5 мДж

Наблюдаемая флуоресценция имеет все признаки суперлюминесценции акцептора: сужение индикатрисы генерации и ее спектра, положение максимума на 620 нм. При этом люминесценции донора не наблюдалось.

Смещение суперлюминесценции РС в длинноволновую область относительно максимума спектра обычной флуоресценции красителя объясняется па-

раметрами пленки-волновода, схемой возбуждения суперлюминесценции и является типичным для подобных экспериментов [7, 8].

Заключение

В работе предложен способ формирования функциональной биополимерной матрицы, основанный на специфическом смешивании хитозана с желатином. Это позволило получить комплексы связывания с хитозаном органических красителей – эозина (донор энергии) и родамина С (акцептор), благоприятные для реализации индуктивно-резонансного переноса энергии электронного возбуждения между этими красителями. В такой системе наблюдалась эффективная сенсibilизированная стационарная флуоресценция родамина С и суперлюминесценция этого красителя при импульсном возбуждении. Полученные результаты могут быть использованы при разработке двухкомпонентных твердотельных лазеров на красителях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России, проект № FSGU-2020-0003

Список литературы

1. YuzeSun, SiykaI. Shopova, Chung-ShiehWu. *etal.* Bioinspired optofluidic FRET lasers via DNA scaffolds // Proceedings of the National Academy of Sciences. 2010. V. 107. №.37. P. 16039-16042.
2. Лёвшин, Л.В. Салецкий А.М. Лазеры на основе сложных органических соединений // М.: МГУ, 1992. 329 с.
3. Лантух Ю.Д., Пашкевич С.Н., Летута С.Н. и др. Спектроскопические свойства биополимерных пленок ДНК – акридиновый оранжевый // Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 110. № 6. С. 932–937.
4. Лантух Ю.Д., Летута С.Н., Пашкевич С.Н., и др. Высокоэффективный излучатель на основе пленок желатина с модифицированной структурой // Оптический журнал. 2019. Т. 86. № 9. С. 63-67.
5. El-Nagar Kh., Amer M., Mekawy M. *et al.* Development of Viscosity Transfer Standards from Chitosan/gelatin Mixtures // MAPAN-Journal of Metrology Society of India. 2010. V. 25. № 4. P. 251-257.
6. Voron'ko N., Derkach S., Kuchina Y., *et al.* The chitosan-gelatin (bio)polyelectrolyte complexes formation in an acidic medium // Carbohydr Polym. 2016. V.138. P. 265-72.
7. Дерюгин Л. Н., Овчаренко О. И., Сотин В. Е. и др. Тонкопленочный лазер на родамине 6Ж на волноводе с гофрированной подложкой // Квантовая электроника. 1975. Т. 2. № 9. С. 2073-2075.
8. Лантух Ю.Д., Пашкевич С.Н. Суперлюминесценция в пленочных системах ДНК-краситель // Вестник ОГУ. 2012. №12. С. 113-116.

ГИСТЕРЕЗИСНЫЕ СВОЙСТВА ДИСПЕРСНЫХ СПЛАВОВ ОДНООСНЫХ ВЫСОКОАНИЗОТРОПНЫХ МАГНЕТИКОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ

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

Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Аннотация: в настоящей работе приводится классификация структурно изотропных сплавов одноосных высокоанизотропных магнетиков по гистерезисным свойствам.

Методы быстрой закалки из жидкого состояния позволяют получать спектр сплавов с разной степенью дисперсности микроструктуры. Для обозначения этих сплавов используются термины: ультрадисперсные, мелкозернистые, мелкокристаллические, микрокристаллические, нанокристаллические, аморфные и т.п. Причем к настоящему времени общепринятыми стали лишь термины аморфные и нанокристаллические, а остальные используются как синонимы. Это затрудняет градацию быстрозакаленных сплавов (БЗС) по степени дисперсности и по свойствам в зависимости от степени дисперсности. А между тем в работе [1] была предложена естественная градация БЗС по степени дисперсности, представленная в таблице 1.

Таблица 1 – Градация БЗС в зависимости от среднего размера кристаллитов в сплаве[1]

№ группы	Характеристика структурного состояния	Средний размер кристаллитов, мкм
1	аморфные	-
2	нанокристаллические	~ 0,01
3	субмикрокристаллические	~ 0,1
4	микрокристаллические	~ 1,0
5	мелкокристаллические	10,0 - 50,0

Если рассматривать магнитные свойства БЗС, например, процессы их перемагничивания, то следует разграничить сплавы на группы в зависимости от соотношения среднего размера кристаллитов L и характеристических микромагнитных параметров: δ - ширина доменной границы, d_c – критический размер абсолютной однодоменности, d_k - критический размер однодоменности. Градация приведена в таблице 2.

Таблица 2 – Градация БЗС в зависимости от соотношения среднего размера кристаллитов с характеристическими параметрами δ , d_c и d_k

№ группы	Средний размер кристаллитов
1	-
2	$L \approx \delta$
3	$L \approx d_c$
4	$L \approx d_k$
5	$L \geq 10 d_k$

Анализ результатов исследований, представленных в работах [1,3-5], позволяет, на основе градации БЗС по группам в зависимости от степени дисперсности, провести классификацию структурно изотропных сплавов одноосных высокоанизотропных магнетиков по основным параметрам гистерезиса: коэрцитивной силе относительно поля магнитокристаллической анизотропии H_c/H_A , относительной остаточной намагниченности M_r/M_s и основному механизму перемагничивания.

Если в качестве примера взять параметры хорошо известного сплава $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ [2], то таблицы 1 и 2 совмещаются.

Таблица 3 – Градация БЗС $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ в зависимости от среднего размера кристаллитов в сплаве

№ группы	Характеристика структурного состояния	Средний размер кристаллитов в сравнении с δ и d_k	Средний размер кристаллитов, мкм
1	аморфные	-	-
2	нанокристаллические	$L \approx \delta$	0,01 ÷ 0,1
3	субмикроркристаллические	$L \approx d_c$	0,1 ÷ 1,0
4	микроркристаллические	$L \approx d_k$	1,0 ÷ 10,0
5	мелкокристаллические	$L \geq 10 d_k$	10,0 ÷ 50,0

Согласно представлениям, сложившимся на основе теоретического анализа многослойных систем [6], перемагничивание нанокристаллических сплавов складывается из трех процессов, относительный вклад которых изменяется в зависимости от соотношения среднего размера кристаллитов и $\sqrt{\frac{A}{K}}$ (где A – константа обменного взаимодействия, K – константа магнитокристаллической анизотропии).

Причем:

1. При $L \geq 7 \sqrt{\frac{A}{K}}$ преобладает индивидуальное вращение намагниченности кристаллитов, корректируемое обменной связью между ними с $H_c \sim 0,2 H_A$;

2. При $L \sim (3 \div 7) \sqrt{\frac{A}{K}}$ преобладает вращение намагниченности блокакристаллитов (домена обменного взаимодействия) как целого;

3. При $L \leq 3 \sqrt{\frac{A}{K}}$ преобладает последовательное перемагничивание пограничных кристаллитов, которое можно интерпретировать как смещение границ доменов обменного взаимодействия.

Таким образом, в целом перемагничивание этих сплавов не сводится к какому-либо из ранее известных механизмов перемагничивания. Учитывая малый размер кристаллитов ~ 10 нм и доменов обменного взаимодействия < 1 мкм, представляющих «элементарные» перемагничиваемые объемы, можно говорить о микромагнитном характере процесса перемагничивания структурно изотропных нанокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков. Сложный микромагнитный механизм перемагничивания определяет особенности гистерезиса БЗС группы сплавов [5].

В субмикрокристаллических сплавах, несмотря на огромную магнитокристаллическую анизотропию, реализуется механизм неоднородного вращения намагниченности отдельных кристаллитов. В таблице 4 приведены хорошо известные теоретические значения параметров гистерезиса для ансамбля однодоменных невзаимодействующих частиц со случайной ориентацией осей легкого намагничивания [7] и экспериментальные значения этих параметров для исследованных пленок SmCo_5 [8].

Таблица 4 – Теоретические и экспериментальные значения коэрцитивной силы H_c , относительной остаточной намагниченности M_r/M_s , начальной магнитной восприимчивости после размагничивания убывающим знакопеременным полем $\chi_{РПП}$, максимальной дифференциальной восприимчивости χ_m и отношения коэрцитивной силы по остаточной намагниченности к коэрцитивной силе по намагниченности H_{cr}/H_c для субмикрокристаллических пленок SmCo_5 ; (H_a – поле магнитокристаллической анизотропии)

Параметр	Теоретические значения [10]	Экспериментальные значения [11]
H_c	$0,48 \cdot H_a$	$(0,05 \div 0,10) H_a$
M_r/M_s	0,5	$\sim 0,5$
$\chi_{РПП}$	$0,667 \cdot M_s/H_a$	$(0,9 \div 2,7) M_s/H_a$
χ_m	$1,12 \cdot M_s/H_a$	$(1,8 \div 5,0) M_s/H_a$
H_{cr}/H_c	1,094	$1,2 \div 1,8$

Расхождение между приведенными в таблице 4 значениями параметров гистерезиса легко объясняются влиянием на процесс перемагничивания межкристаллитных прослоек, удельный объем которых достаточно велик. С учетом этих прослоек, образцы можно рассматривать как ансамбль квазиоднодомен-

ных частиц с поверхностным слоем, в котором резко снижается константа магнитокристаллической анизотропии.

Как известно, устойчивость однородно намагниченного состояния квазиоднодоменных частиц с низкоанизотропным поверхностным слоем резко снижается даже при незначительной толщине последнего, что неизбежно приводит к уменьшению поля перемагничивания частиц путем неоднородного вращения намагниченности [9,10]. То есть процесс перемагничивания высокодисперсного сплава будет начинаться с межкристаллитных прослоек, инициируя неоднородное вращение намагниченности кристаллитов и приводя к снижению H_c и увеличению отношения H_{cr}/H_c , χ_{rpp} и максимальной дифференциальной восприимчивости χ_m . Естественно, что эти параметры должны быть весьма чувствительными к размеру кристаллитов. Широкий диапазон экспериментальных значений перечисленных выше параметров как раз свидетельствует об этом (таблицу 4).

У микрокристаллических БЗС SmCo_5 и $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ был обнаружен достаточно высокий эффект термического намагничивания [11]. Было проведено теоретическое исследование этого эффекта на модели многослойной структуры [12-14]. Теоретическое исследование показало, что наблюдаемое в дисперсных структурно изотропных быстрозакаленных сплавах высокоанизотропных магнетиков термическое намагничивание может быть объяснено исключительно обменным взаимодействием по границам кристаллитов, а не магнитостатическим взаимодействием, как в спеченных магнитах [15].

По мере уменьшения степени дисперсности микрокристаллических БЗС в результате уменьшения скорости закалки, вместо равноосных кристаллитов появляются пластинчатые, игольчатые в виде сфероидов и дендритные. Нарушение равноосности кристаллитов повышает локальные размагничивающие поля, что вместе с увеличением их размера приводит к резкому уменьшению полей зародышеобразования обратных доменов и росту полей смещения доменных границ (ДГ). Об этом свидетельствует уменьшение начальной восприимчивости после термического размагничивания. В итоге поля закрепления доменных границ на поверхностных неоднородностях кристаллитов становятся больше полей зародышеобразования обратных доменов. Поэтому и происходит смена основного механизма перемагничивания при переходе от микрокристаллических сплавов к мелкокристаллическим от зародышеобразования обратных доменов к задержке смещения доменных границ, что сопровождается уменьшением уровня коэрцитивной силы до $\sim 0,03H_a$. А это существенно меньше максимальных значений H_c у микрокристаллических и субмикрокристаллических сплавов.

Таблица 5 – Классификация структурно изотропных сплавов одноосных высокоанизотропных магнетиков по гистерезисным свойствам в зависимости от степени их дисперсности

	Характеристика структурного состояния		Средний размер кристаллитов	H_c/H_a	M_r/M_s	Механизм перемагничивания
	аморфные		-	-	$0,3 \div 0,5$	смещение ДГ
	нанокристаллические		$L \sim \delta$	$\leq 0,1 H_a$	$0,6 \div 0,8$	микромагнитный
	субмикрокристаллические		$\delta < L < d_k$ ($L \sim d_c$)	$(0,05 \div 0,2) H_a$	$\sim 0,5$	неоднородное вращение
	микрокристаллические		$L \sim d_k$	$(0,22 \div 0,01) H_a$	0,5	зародышеобразование
	мелкокристаллические		$L \geq 10 d_k$	$\leq 0,03 H_a$	$\leq 0,5$	смещение ДГ

Таким образом, на основе вышеизложенного мы приходим к классификация структурно изотропных сплавов одноосных высокоанизотропных магнетиков по гистерезисным свойствам в зависимости от степени их дисперсности (таблицу 5).

Список литературы

1. Манаков Н. А., Пастушенков Ю. Г. Механизм высококоэрцитивного состояния дисперсных редкоземельных магнетиков //Тверь: Издво Твер. ун-та, 1992. – 43 с.
2. Coleman P. et al. Handbook of magnetism and advanced magnetic materials. – 2007.
3. Манаков Н. А. Степень дисперсности и магнитные свойства микрокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков //Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. – 1990. – №. 10. – С. 39-40.
4. Манаков Н. А. и др. Дисперсность микроструктуры и гистерезисные свойства быстрозакаленных сплавов FeNdB //Физика металлов и металловедение. – 1991. – №. 6. – С. 109-113.
5. Manakov N. A., Vakulenko V. N. Dispersity of the microstructure and hysteretic properties of alloys of highly anisotropic rare-earth magnetic materials //Physics of metals and metallography. – 1997. – Т. 84. – №. 1. – С. 33-35.
6. Манаков Н. А. и др. Численное моделирование микромагнитных свойств многослойных структур //Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2004. – Т. 1. – №. 2. – С. 96-102.
7. Wohlfarth E. P. (ed.). Handbook of magnetic materials. – Elsevier, 1986. – Т. 2.

8. Манаков Н. А. О возможности перемагничивания сплавов типа SmCo_5 неоднородным вращением намагниченности //Физика металлов и металловедение. – 1990. – №. 12. – С. 67-71.
9. Крюков И. И., Манаков Н. А. Микромагнетизм двухфазных квазиодно-доменных частиц //Физика металлов и металловедение. – 1983. – Т. 56. – №. 1. – С. 5-8.
10. Крюков И. И., Манаков Н. А. Микромагнетизм двухфазных квазиодно-доменных частиц //Физика металлов и металловедение. – 1983. – Т. 56. – №. 1. – С. 5-8.
11. Манаков Н. А. Термическое намагничивание быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков //Физика магнитных материалов. – 1993. – С. 42-45.
12. Манаков Н. А., Плетнева М. В., Толстобров Ю. В. О возможном механизме термического намагничивания быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков //Физика металлов и металловедение. – 2005. – Т. 99. – №. 1. – С. 14-17.
13. Плетнева М. В., Толстобров Ю. В., Манаков Н. А. К вопросу о роли магнитостатического взаимодействия в эффекте термического намагничивания мелкокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков //Письма в ЖТФ. – 2005. – Т. 31. – №. 19. – С. 84-87.
14. Плетнева М. В., Манаков Н. А., Толстобров Ю. В. Роль обменного и магнитостатического взаимодействий в эффекте термического намагничивания мелкокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков //Известия высших учебных заведений. Физика. – 2007. – Т. 50. – №. 8. – С. 8-11.
15. Лившиц Б. Г. и др. Исследование термического намагничивания сплавов SmCo_5 //Изв. вузов. Черная металлургия. – 1976. – №. 11. – С. 131-134.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ДУГ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ В АТМОСФЕРНЫХ РАДУГАХ

Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук

Яшин А.Г., рендер-разработчик

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

ООО «БИМЭЙСТЕР ХОЛДИНГ», г. Москва

Как известно, тема дисперсии и интерференции входит в курс физики для всех направлений физико-математических и технических специальностей. Однако, вопрос визуализации многих теоретических аспектов волновой оптики имеет определенные проблемы, как в фундаментальной физике, так и в методике преподавания физики.

В работе рассмотрены примеры визуализации и моделирования дуг высших порядков в атмосферных радугах, полученных в результате интерференции и дисперсии от шарообразных капель воды.

Дуги (радуги) высших порядков в теории атмосферной радуги – это радуги низкой интенсивности, попадающие в темную зону, образующиеся в результате дисперсии и интерференции света (рис. 1).



Рисунок 1 – Дуги высших порядков около основной (первичной) радуги [1]

Подобные визуализации в литературе встречаются, например [2, 3], но они очень схематичны и не отражают всю полноту явления (рис. 1). Стоит заметить, что теория атмосферной радуги может быть рассмотрена с использованием понятия каустики и описана терминами теории катастроф [4], что уточняет описание физических процессов, но усложняет их понимание. Это подчеркивает актуальность визуализации для лучшего понимания теоретического материала.

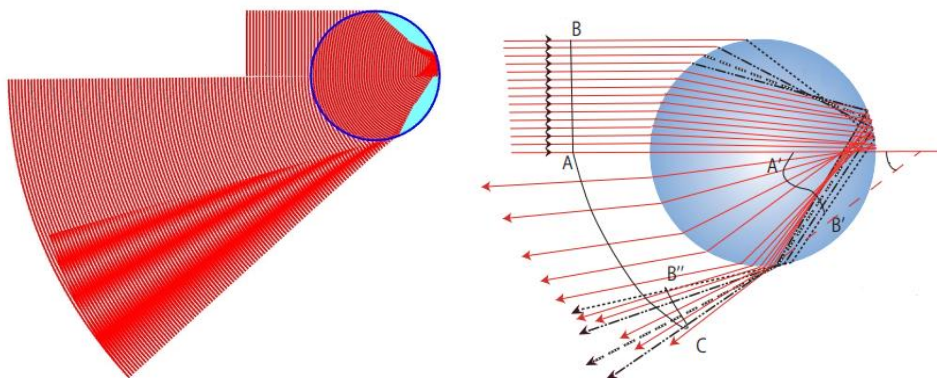


Рисунок 2 - Капля за счет двукратного преломления и внутреннего отражения перерабатывает семейство плоских волновых фронтов в семействоинтерферирующих волновых фронтов, образуя дуги высших порядков [2,3]

Для визуализации процессов волновой оптики в качестве базового элемента выбрано колебание механического гармонического осциллятора, колебания которого описываются гармонической функцией:

$$x(t) = X \sin(\omega_0 t + \varphi).$$

Для моделирования неподвижных или малоподвижных элементов используется изменение массы, причем для неподвижных элементов $m \rightarrow \infty$. Этот объект выбран в качестве базового элемента, так как теория электромагнитного поля в координатном пространстве принимает вид теории неразрывных гармонических осцилляторов в k-пространстве [5]. Данный подход к моделированию дуг высших порядков удовлетворяет теории атмосферной радуги Юнга-Эйри [1].

Для создания программного продукта использовался язык программирования Javascript. Для графического изображения используется «canvas 2d», цвета пикселей записываются в «ImageData». С текстом кода можно ознакомиться в [6]. Программа позволяет получать визуализацию дуг высших порядков атмосферной радуги. Отрисовка изображения производилась на компьютере с процессором IntelCorei7.

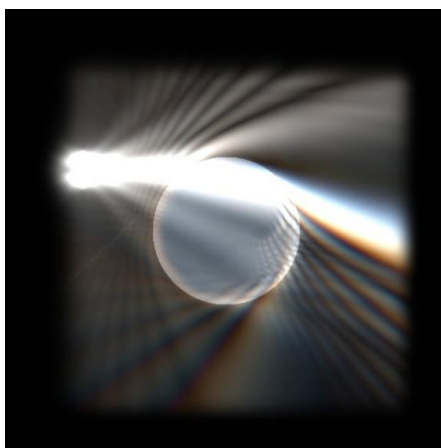


Рисунок 3 – Визуализация дуг высших порядков методами теории Юнга-Эйри

На рисунке 3 видно следствие явления рефракции лучей света, а также интерференции и дисперсии света. Приведенный результат более явно визуализирует рассматриваемое физическое явление, чем на рисунке 1, причем хорошо согласуется с рисунком 1 и экспериментальными результатами, описанными в работе [7].

Также представляет интерес рассмотреть задачу визуализации дуг высших порядков в атмосферной радуге, используя теорию Лоренца-Ми. Как известно [8], теории атмосферной радуги Юнга-Эйри и Лоренца-Ми дают очень близкие результаты. Используя рассмотренный в работе метод моделирования, получим визуализацию дуг высших порядков в атмосферных радугах в рамках теории Лоренца-Ми.

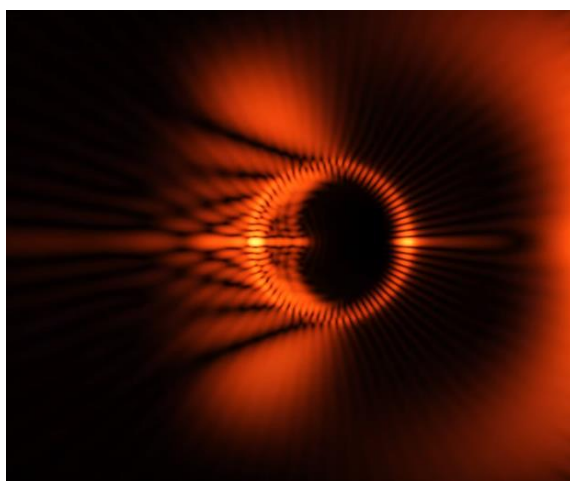


Рисунок 4 – Визуализация дуг высших порядков методами теории Лоренца-Ми

Рисунки 3 и 4 хорошо согласуются между собой, однако, на рисунке 4 можно заметить наличие краевых эффектов. Визуализация дисперсии методами теории Лоренца-Ми очень сложна и в рамках данной работы не рассматривалась.

Таким образом, были получены визуализация дуг высших порядков атмосферной радуги в рамках теории Юнга-Эйри и Лоренца-Ми.

Авторы работы выражают благодарность доктору физико-математических наук, профессору Каныгиной О.Н. за ценные советы по написанию работы.

Список литературы

1. Haußmann A. Rainbows in nature: recent advances in observation and theory // European Journal of Physics. – 2016. – Т. 37. – №. 6. – P. 063001.
2. Kanamori S. et al. Physically based rendering of rainbows under various atmospheric conditions // 2010 18th Pacific Conference on Computer Graphics and Applications. – IEEE, 2010. – P. 39-45.

3. Зайцев А. А., Панов А. А., Попиченко В. А. Теории радуги от Декарта до Эйри //Известия высших учебных заведений. Геодезияиаэрофотосъемка. – 2004. – №. 6. – С. 41-53.

4. Kaduchak G., Marston P. L., Simpson H. J. Observation of the E6 diffraction catastrophe associated with the primary rainbow of oblate drops //Light and Color in the Open Air. – 1993. – P. WB. 2.

5. Цвелик А.М. Квантовая теория поля в физике конденсированного состояния. – Физматлит, 2002.

6. <https://github.com/ArtemOnigiri/Light-Simulation-JS>

7. Casini G., Covello A. The “rainbow” in the drop //American Journal of Physics. – 2012. – Т. 80. – №. 11. – P. 1027-1034.

8. Lee R. L. Mie theory, Airy theory, and the natural rainbow //Applied Optics. – 1998. – Т. 37. – №. 9. – P. 1506-1519.

РОЛЬ И ОБРАЗ МОЛОДОГО УЧИТЕЛЯ ФИЗИКИ В СОВРЕМЕННОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЕ

Мушин Ф.Ю.

**Федеральное государственное казённое образовательное учреждение
«Оренбургское президентское кадетское училище»**

События последних лет ускорили темпы изменений в образовании, поскольку школы оказались вынуждены осваивать и внедрять дистанционные технологии обучения [1]. Но, заглядывая в будущее, становится понятно, что общество понимает, что никогда ранее не было так важно повышать уровень престижа профессии педагога, расширять возможности современного образования. Также важно убедиться, что у учителей есть решения для реальных проблем, методы и инструменты для использования современных технологий удаленного и смешанного обучения [2].

Однако, есть опасение, что общество неоднозначно определяет место профессии учителя в своей структуре. Разработан «Атлас новых профессий», который меняет наше представление о месте современных профессий в будущем: игропедагог, тьютор, разработчик образовательных траекторий, организатор проектного обучения и так далее [3]. Не вольно возникает вопросы: А где само учение? Где учитель?

Да стандарт сегодня требует от выпускника школы не только предметных, но и метапредметных, и личностных результатов [4]. Но, как молодому специалисту, понять, как за отведенное время урока можно исполнить требования государства?

С одной стороны, государственная образовательная политика ставит задачей обучения - направленность образования на формирование у обучающихся индивидуального опыта решения различных проблем, с целью освоения социальной практики, с другой, устанавливает требование для получения аттестата о среднем общем образовании - сдачу государственной итоговой аттестации в форме ЕГЭ [5].

Что приводит к противоречию! Как в сегодняшних реалиях организовать учебный процесс, чтобы удовлетворить всех потребителей? Какую позицию занимает государство для разрешения сложившихся противоречий в системе образования? Что произойдет с моей профессией учителя в будущем?

Сегодня учитель должен иметь непосредственную связь с учебным процессом, который становится частью их жизни. Находиться в зоне комфорта – не для людей этой профессии. Их окружение – это идейные, талантливые и творческие коллеги, с которыми интересно решать сложные задачи. Необходимо постоянно учиться, чтобы быть «в тренде» новых научных изысканий, чтобы ученики имели представление о них, качестве и уровне их применения. Прохождение курсов повышения квалификации, учеба в аспирантуре приподнимает учителя над предметом, помогает видеть фундаментальные связи между отдельными темами, устанавливать общие принципы решения предметных задач.

Безусловно, необходимо понимание того, что учеба не должна заканчиваться лишь на приобретении предметных навыков, наоборот, сегодня успешная практика, деятельность, демонстрирующая конкретный результат, доставляющая удовлетворение ценится у подрастающего поколения выше!

Образовательный процесс всё еще обедняется очень узким характером постановки целей и задач, направленных на по-прежнему репродуктивное усвоение информации, которую кто-то по наивности полагает необходимым записать в единый учебник, в единые списки произведений, в единый перечень фактов, формул, которые нужно знать. Появились даже единые тексты Всероссийских проверочных работ (пресловутые ВПР). И поэтому ответить на вопрос молодых людей: а почему именно это им нужно знать, а не что-то иное, мы нередко можем только нарративно, подразумевая, что наш ответ должен быть априори принят на веру. Нужно считать, что качественное образование – это пакет знаний.

Молодой учитель, пусть с небольшим опытом, не должен сомневаться, что необходимо усиливать роль тех подходов в педагогике, которые поддерживают индивидуализацию ребёнка.

В практике нашего училища активную образовательную позицию занимает внеурочная деятельность. Для заинтересованных кадет с задатками к предмету «ФИЗИКА» реализуется индивидуальный образовательный маршрут. Воспитанники могут самостоятельно выбирать темп изучения темы, углубиться в особенности физического явления, самостоятельно выявлять проблемы, возникающие в процессе освоения темы. Кадеты учатся находить и реализовывать межпредметные связи, причём самостоятельно. Технология «перевёрнутый класс» – то, что нужно [6]. В итоге добиваемся того, что воспитанник самостоятельно формирует знание, устанавливая для себя понимание смысла учебного задания и способов его выполнения, а роль учителя сводится к корректированию и направлению его деятельности. А ещё кадеты учатся самостоятельно определять уровень своего успеха (используя технологию формирующего оценивания) [7]. Успех для них – это не только победы и призерства в различных конкурсах (хотя для повышения своей самооценки для подростка это имеет большое значение), а внутренняя уверенность в самом себе. «Нужно любить то, что делаешь, и тогда труд... возвышается до творчества», – писал Максим Горький.

Поэтому каждый успех кадета является достоянием всего взвода, поддержание инициатив и начинания воспитанников позволяет создать ситуацию успеха на уроке. Урок прошёл отлично, если каждый ушёл с новым открытием для себя, с желанием поделиться этим открытием, узнать ещё больше.

В национальном проекте «Образование» [8] очень большое внимание уделено формированию у подростков духовности, самоопределению личности, формированию самостоятельности, гражданской идентичности и интеграции ее в национальную и общемировую культуру. Подпроекты «Успех каждого ребенка» [9], «Учитель будущего» [10] очень взаимосвязаны и устанавливают ряд конкретных требований к современным работникам образования: готовность

непрерывно и планомерно повышать свою квалификацию, в том числе с применением современных цифровых образовательных технологий, участие в профессиональных ассоциациях, программах обмена опытом и лучшими практиками; участие в образовательных Центрах непрерывного развития профессионального мастерства, в которых будет реализовано «горизонтальное обучение» учителей, через сетевые профессиональные сообщества. Внедрение добровольной и независимой оценки профессиональной квалификации педагогических работников позволит оценить свои профессиональные дефициты, выстроить свой план дальнейшего развития. Реализация тьюторского сопровождения со стороны специалистов-практиков, а также профессорско-преподавательского состава вузов над молодыми специалистами особенно поможет повысить уровень профессионального мастерства и качество преподавания. Сейчас от учителя, как и во времена Древней Греции (метод майевтики Сократа), требуется выяснить в диалоге объемы знания и незнания собеседника (ученика), а также дать ему представления о том, где и как искать информацию, как её оценивать и как интерпретировать. Кроме всего прочего, информация, которая встречается ученику во время поисков (особенно в глобальной сети Интернет), может быть не только недостоверной, но и вредоносной — здесь возникает запрос на поддержание безопасности ребёнка.

Одно, что можно утверждать точно, учитель, в арсенале которого будут только средства трансляции материала своего учебника, станет ненужным. Но это вовсе не означает, что потребность в настоящем учителе исчезнет. Наоборот, она будет только возрастать. Только настоящий учитель – это тот, кто сумеет наладить языковой и культурный канал, будучи способным говорить на языке, на котором говорят подростки, который они понимают и в котором они выстраивают свои маршруты, и на языке, на котором созданы культурные образцы прошлого и настоящего и которые важно передать молодым людям. Настоящий учитель тот, который сможет это делать, не просто заставляя принять на веру важность такой передачи, но доступно и убедительно показывая и объясняя значение и ценность каждого образца и каждого действия. Настоящий учитель тот, кто будет понимать сигналы, идущие от учеников, и уважать их выбор, отвечая на это как равный. Наконец, настоящий учитель сможет направить свои усилия на передачу тех навыков, которые будут полезны и важны для быстро появляющихся новых видов грамотности и активности. И это все сделает профессию учителя все более сложной и элитной в будущем. К такому учителю будет не просто попасть, поскольку он – не просто стандартный обязательный набор знаний и навыков, он не должен будет работать с большой нагрузкой, выматывающей его и его учеников.

И тут только присоединиться к сказанному Александром Изотовичем Адамским, говорящим об образовании через 30 лет. Хотя возможно, что он ошибся, и это будущее случится еще раньше.

Таким образом, на вопрос о том, будет ли в будущем востребована профессия учителя, можно ответить однозначно – будет! Педагог – это тот, кто курирует образовательный процесс в зависимости от многих обстоятельств,

включая человеческий фактор; ни одна машина на такое не способна. Компьютерные технологии, дистанционное обучение, которое необходимо в силу новых непредвиденных обстоятельств, будут лишь инструментом человека, с помощью которых он будет делиться знаниями с учениками. Но только общение с учителем влияет на развитие юных умов. По моему мнению, роль педагогов в обществе хорошо продемонстрирована в таких произведениях литературы, как «Профессия» Айзека Азимова и «Полдень, XXII век» братьев Стругацких.

Можно быть уверенным в том, что сегодня никто не может сказать наверняка, какими будут выпускники будущего. Мир меняется настолько стремительно, что делать какие-то прогнозы на большие отрезки времени невозможно. Самостоятельность, готовность к серьёзным изменениям и стремление превращать перемены в возможности должны стать приоритетными в портрете выпускника. Учит ли школа сегодня этому?

Нельзя допустить, чтобы деятельность учителя рассматривалась в обществе исключительно для функции подателя информации и даже тестера, проверяющего успешность результатов освоения новых знаний или умений. В противном случае всё может быть успешно передано искусственному интеллекту. «Учитель живет до тех пор, пока он учится; как только он перестает учиться, в нем умирает учитель», — так писал классик отечественной педагогики XIX века Константин Ушинский. С тех пор учительская профессия сильно изменилась, но эта истина не устарела: от учителя сегодня, как никогда, требуется непрерывное самообразование, быстрое освоение передовых знаний, технологий и практик. Учитель — профессия творческая, как художник, поэт, музыкант. Творческий человек не может работать по одному сценарию годами. Учитель всегда идет в ногу со временем.

Список литературы

1. Калиновская Н. А. Дистанционные образовательные технологии в высшей школе в условиях пандемии коронавируса COVID-19: практические аспекты и направления совершенствования //АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ НАУКИ И ТЕХНИКИ. — 2020. — С. 210-218.

2. Григорьева И. В. Развитие и внедрение технологии смешанного обучения (Blended Learning) и онлайн-обучения, как важной составляющей цифровизации образования //Вестник Университета Российской академии образования. — 2021. — №. 3. — С. 34-45.

3. Бакулина А. А., Еремкина О. В. Рассмотрение вопроса профориентации школьников в разрезе сопоставления работы ЕА Климова «Путь в профессию» и Атласа новых профессий //НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ И ПРОИЗВОДСТВЕ. — 2021. — С. 252-254.

4. Десненко С. И. Система методической подготовки будущего учителя физики в условиях реализации новых образовательных стандартов //Ученые записки Забайкальского государственного университета. Серия: Профессиональное образование, теория и методика обучения. — 2016. — Т. 11. — №. 6. — С. 13-22.

5. Зборовский Г. Е., Амбарова П. А. Риски образовательной неуспешности учащейся молодежи //Социологический журнал. – 2020. – №. 2. – С. 60-81.
6. Селевко Г. К. Современные образовательные технологии [Электронный ресурс] //Режим доступа: [https://www. studmed. ru.](https://www.studmed.ru)–Дата доступа. – 2022. – Т. 2. – С. 21.
7. Крылова О., Бойцова Е. Технология формирующего оценивания в современной школе. Учебно-методическое пособие. – Litres, 2022.
8. Леонидова Г. В., Головчин М. А. Национальный проект «Образование» и возможность его влияния на развитие человеческого капитала //Проблемы развития территории. – 2019. – №. 4 (102). – С. 7-25.
9. Рылова Н. Т., Ласкожевская Е. В., Белослудцева Н. В. УСПЕХ КАЖДОГО РЕБЕНКА //ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ ОБРАЗОВАНИЕ И ЗАНЯТОСТЬ МОЛОДЕЖИ: XXI ВЕК. – 2020. – С. 65.
10. Авво Б. В. и др. Учитель будущего: инновационный опыт и успешные педагогические практики. – 2020.

СКОРОСТЬ БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ ОТ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ К СЛОИСТОЙ НАНОЧАСТИЦЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

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

Налбандян В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Слоистые проводящие наночастицы (НЧ), как элементы управляющих систем, по сравнению с аналогичными сплошными однородными НЧ, позволяют более гибко регулировать как скорости межмолекулярного безызлучательного переноса энергии электронного возбуждения [1], так и интенсивности люминесценции молекулярных и полупроводниковых излучателей [2-3]. В [3] экспериментально исследовано усиление излучательной способности квантовых точек (КТ) вблизи слоистых НЧ с диэлектрической оболочкой. Продемонстрирована возможность усиления излучения КТ в зависимости от толщины оболочки НЧ. В работе [4] было экспериментально обнаружено, что спектры фотолюминесценции двухкомпонентной системы из КТ и НЧ изменяются во внешнем магнитном поле. В [5-6] был предложен механизм наблюдаемого полевого эффекта, основанный на замагничивании электронной плазмы металла НЧ.

В данной работе, как и в работе [5], объектом исследования является двухчастичная система, образованная из экситон-активированной полупроводниковой квантовой точки и двухслойной плазмонной наночастицы. Однако, в отличие от работы [5], где рассмотрение производилось в рамках приближения дипольной поляризуемости слоистого нанокомпозита, здесь, выходя за рамки приближения квазиоднородного поля, мы будем производить учет мультиполей более высокого ранга.

Исследуемая двухчастичная система представляет собой экситон-активированную сферическую полупроводниковую квантовую точку радиуса R_{QD} , с содержащейся в ней электрон-дырочной парой или экситоном Ванье-Мотта, и глобулярную слоистую металлогибридную наночастицу R_2 с ядром радиуса R_1 , расположенную на расстоянии $r_0 > R_{\text{QD}}, R_2$ от КТ. Поле $\mathbf{E}$ дипольного источника КТ с моментом $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 \exp(-i\omega t)$ осциллирует с частотой ω . В простейшем квазиоднородном приближении оно наводит в наночастице дипольный момент $\mathbf{p}_2 = \vec{\alpha}(\omega|\mathbf{B})\mathbf{E}$, где $\vec{\alpha}(\omega|\mathbf{B})$ – магнито-зависимый тензор дипольной динамической поляризуемости слоистой НЧ. В монохроматическом поле $\mathbf{E}$ частоты ω возникают плазмонные колебания в металлических компонентах наночастиц. Диэлектрическая проницаемость $\epsilon_{\text{QD}}^{\text{КТ}}$ принималась постоянной в области частот экситонного перехода. Окружающая среда предполагается прозрачной на экситонных частотах и характеризуется диэлектрической постоянной ϵ_3 . Далее для слоистой сферической наночастицы будем рассматривать случай с

диэлектрической оболочкой из материала без дисперсии $\varepsilon_2 = \text{const}$. Ядро представляет собой проводящий слой с сильной частотной дисперсией $\varepsilon_1(\omega)$.

Во внешнем магнитном поле индукции $\mathbf{B}$ электронная плазма металла приобретает анизотропные свойства, и диэлектрическая проницаемость проводящей части НЧ становится тензором второго ранга $\varepsilon_1(\omega) \rightarrow \vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B})$ [7]

$$\vec{\varepsilon}_1(\omega|\mathbf{B}) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\omega_p^2(\omega + i\gamma)}{\omega((\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2)} & i \frac{\omega_p^2 \Omega_L}{\omega((\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2)} \\ 0 & -i \frac{\omega_p^2 \Omega_L}{\omega((\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2)} & 1 - \frac{\omega_p^2(\omega + i\gamma)}{\omega((\omega + i\gamma)^2 - \Omega_L^2)} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где γ – частота электронных столкновений (коэффициент диссипации), $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n_e / m^*}$ – ленгмюровская (плазменная) частота электронов металла, $\Omega_L = eB/m^*c$ – ларморовская (циклотронная) частота электрона с эффективной массой m^* в магнитном поле индукции B . Тензор диэлектрической проницаемости $\vec{\varepsilon}(\omega|\mathbf{B})$ приобретает вид (1) при направлении вектора индукции $\mathbf{B}$ магнитного поля вдоль оси X декартовой системы координат, а в общем случае произвольной ориентации вектора индукции магнитного поля все девять компонент этого тензора являются ненулевыми.

В исследуемой системе наночастица находится в начале координат, квантовая точка расположена на расстоянии r_0 вдоль оси Z . Так же, параллельно вектору $\mathbf{r}_0$ направлен вектор дипольного момента $\mathbf{p}$ квантовой точки. Для наблюдения влияния внешнего магнитного поля на оптические свойства наносистемы должно выполняться такое условие, при котором вектор $\mathbf{B}$ не параллелен векторам $\mathbf{p}$ и $\mathbf{E}$. Поэтому выбирается направление вектора магнитного поля вдоль оси X .

Описание неоднородного электрического поля КТ

На достаточно малых расстояниях r_0 от КТ или сравнительно больших радиусах $R_2 \sim r_0$ НЧ поле $E(\omega)$ диполя $\mathbf{p}$ уже нельзя считать однородным, и часто используемое для описания отклика на это поле электрической дипольной поляризуемости НЧ становится недостаточным. В связи с этим необходим переход от дипольного к мультипольному описанию электрического поля, образуемого вокруг КТ [8]. Ниже дано описание модели с неоднородным квазистационарным полем КТ.

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

$$\delta\varphi_1(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = - \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{p}_0 \times \left[\vec{I} + l[\vec{\varepsilon}_2(\omega) - \varepsilon_1 \vec{I}][\vec{\eta}_1^l(\omega|\mathbf{B})]^{-1} \right] \vec{p}_l r_0 \cdot \frac{(2l+1)(l+1)R_2^{l-1}r^l}{r_0^{l+3}R_1^l} \cdot P_l(\cos \theta), r < R_1 \quad (2)$$

$$\delta\varphi_2(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = - \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)(l+1)R_2^{l-1}}{r_0^{l+3}} \times \\ \times p_0 \left[\frac{r^l}{R_1^l} \vec{I} + [\vec{\varepsilon}_2(\omega) - \varepsilon_1 \vec{I}] [\vec{\eta}_1^l(\omega | \mathbf{B})]^{-1} l \cdot \frac{R_1^{l+1}}{r^{l+1}} \right] \vec{\rho}_l r_0 \cdot P_l(\cos \theta), R_1 < r < R_2 \quad (3)$$

$$\delta\varphi_3(r, \theta; r_0 | \mathbf{B}) = \frac{p_0}{\varepsilon_3 R_M^3} (r \cos \theta - r_0) - \sum_{l=0}^{\infty} p_0 \frac{(l+1)}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) \times \\ \times \left\{ - \frac{R_2^{2l+1}}{\varepsilon_3 r_0^{l+3}} \vec{I} + \left[\xi^{-l} \vec{I} + \xi^{l+1} [\vec{\varepsilon}_2(\omega) - \varepsilon_1 \vec{I}] [\vec{\eta}_1^l(\omega | \mathbf{B})]^{-1} \right] \frac{(2l+1)lR_2^{2l}}{r_0^{l+3}} \vec{\rho}_l \right\} r_0, r > R_2 \quad (4)$$

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

$$\vec{\rho}_l(\omega) = \left\{ \vec{\eta}_2^l(\omega | \mathbf{B}) \frac{R_2^{l-1}}{R_1^l} + [\varepsilon_3 \vec{I} - \vec{\varepsilon}_2(\omega)] [\vec{\eta}_1^l(\omega | \mathbf{B})]^{-1} [\vec{\varepsilon}_2(\omega) - \varepsilon_1 \vec{I}] \frac{l(l+1)}{R_2} \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^{l+1} \right\}^{-1},$$

$\vec{\eta}_j^l(\omega | \mathbf{B}) = (l+1) \vec{\varepsilon}_{j+1}(\omega | \mathbf{B}) + l \vec{\varepsilon}_j(\omega | \mathbf{B})$, $\vec{\varepsilon}_3 = \varepsilon_3 \vec{I}$, $\vec{\varepsilon}_1 = \varepsilon_1 \vec{I}$ а тензор $[\vec{\eta}_j^l(\omega | \mathbf{B})]^{-1}$ обратен тензору $\vec{\eta}_j^l(\omega | \mathbf{B})$. Тензор $\vec{\rho}_l$ имеет размерность длины.

Скорость $U(\omega | \mathbf{B}, r_0)$ безызлучательной передачи энергии от КТ к НЧ может быть представлена суммой двух интегралов от мнимых частей квадратичных форм векторов напряженности локального поля $-\vec{\nabla}_r \delta\varphi_{1,2}(r, \theta | \mathbf{B}) = E_{1,2}(r, \theta | \omega)$ внутри слоистой НЧ

$$U(\omega | \mathbf{B}, r_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_0^{R_1} \int_0^\pi \text{Im} \mathbf{E}_1^*(r, \theta | \omega) \varepsilon_1 \mathbf{E}_1(r, \theta | \omega) \sin \theta d\theta r^2 dr + \\ + \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{R_1}^{R_2} \int_0^\pi \text{Im} \mathbf{E}_2^*(r, \theta | \omega) \vec{\varepsilon}_2(\omega) \mathbf{E}_2(r, \theta | \omega) \sin \theta d\theta r^2 dr. \quad (5)$$

Интегралы в (5) для скорости $U(\omega | \mathbf{B}, r_0)$ содержат квадратичную форму градиента потенциалов, а это означает, что ненулевой вклад в общую скорость $U(\omega | \mathbf{B}, r_0)$ будут давать теперь и высшие члены ряда потенциалов (2) и (3).

Обсуждение полученных результатов

При проведении расчетов физических величин были использованы следующие значения параметров компонентов системы:

$\omega_p = 13.87 \cdot 10^{15} \text{с}^{-1}$, $\gamma = 1.6 \cdot 10^{14} \text{с}^{-1}$, $B = 0 \text{ Т}$, $R_1 = 5 \text{ нм}$, $R_2 = 8 \text{ нм}$, $R_c = 4 \text{ нм}$, $R_{\text{QD}} = 5 \text{ нм}$, $r_B = 5 \text{ нм}$, $r_0 = R_2 + R_{\text{QD}} + 2 \text{ нм}$, $p_0 = 12 \text{ Д}$, $\varepsilon_2 = 1.2$, $\varepsilon_3 = 2$, $\varepsilon_{\text{QD}} = 6$.

Значения величин, которые изменялись по ходу расчетов, будут указаны дополнительно в подписях к рисункам.

Ниже рассмотрим подробно случай двухчастичного комплекса, образованного из КТ и композитной НЧ с металлическим ядром и диэлектрической оболочкой.

Рассмотрим зависимость скорости безызлучательного переноса энергии от НЧ к КТ при учете нескольких первых мультиполей (1-5 порядка) в отсутствие магнитного поля. Учет вклада членов различного порядка для потенциалов электрического поля внутри наночастицы осуществлялся суммированием по индексу l конечного числа n первых членов ряда $\sum_{l=0}^{\infty} \rightarrow \sum_{l=0}^n$ в формулах (2) и (3).

На рисунке 1 показаны спектры скорости безызлучательного переноса энергии КТ - НЧ, в случае учета только мультиполя первого порядка ($n = 1$). При этом в каждом из приведенных спектров наблюдается лишь одна спектральная полоса на резонансной частоте $\omega \sim 6.2 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – для сплошной НЧ, и $\omega \sim 7.2 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$ – для НЧ с диэлектрической оболочкой.

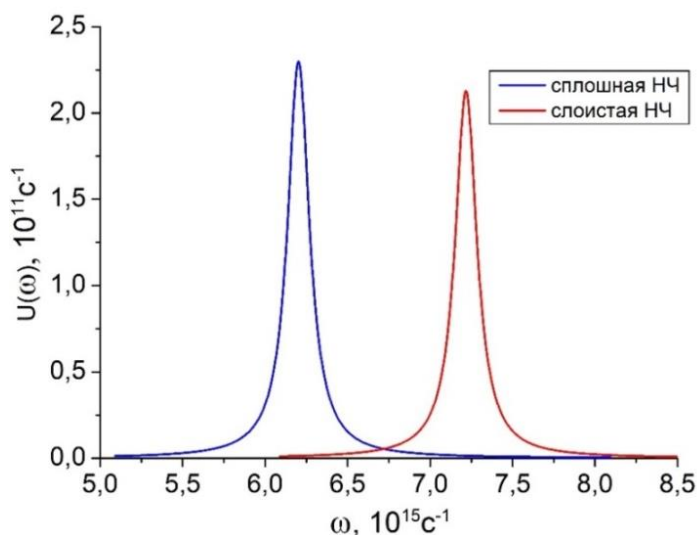


Рисунок 1 – Спектры скорости безызлучательного переноса энергии от КТ к сплошной и слоистой НЧ при $n = 1$

Возникновение плазмонных пиков обусловлено дипольными колебаниями электронного газа в металлической части НЧ. При добавлении диэлектрического слоя к проводящему ядру НЧ спектр скорости безызлучательного переноса энергии смещается в высокочастотную область.

С увеличением порядка мультиполя, т.е. уже при $n = 2$, в высокочастотной области спектра появляется дополнительная полоса, амплитуда которой меньше примерно в 2 раза максимума основной – первой спектральной полосы. Данный спектральный пик обусловлен квадрупольным колебанием электронной плотности. Резонансная частота второй полосы имеет значение $\omega \sim 8.17 \times 10^{15} \text{ с}^{-1}$. При дальнейшем увеличении порядка мультиполя в высокочастотной области будут появляться дополнительные спектральные линии, обусловленные мультиполем третьего ($n = 3$) и более высоких порядков (рис. 2).

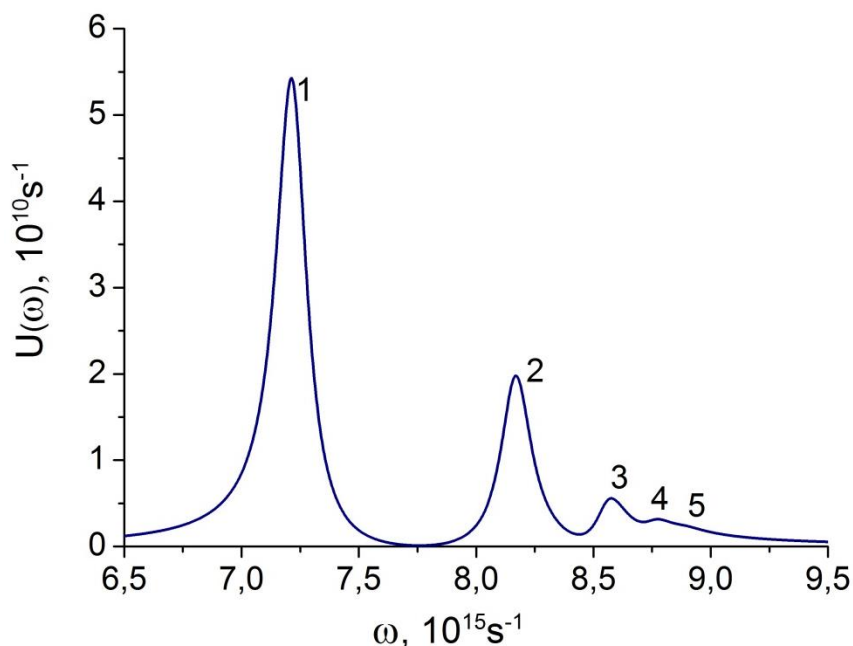


Рисунок 2 – Спектр скорости безызлучательного переноса энергии от КТ к НЧ при разных значениях n (со спектральными полосами от мультиполей различного порядка): 1 – 1, 2 – 2, 3 – 3, 4 – 4, 5 – 5.

На рисунке 3 показан спектр скорости переноса энергии от КТ к НЧ при увеличении радиуса ядра НЧ от 2 до 5 нм. С увеличением радиуса ядра все спектральные полосы уменьшаются по амплитуде и смещаются в низкочастотную область. Дальнейшее увеличение радиуса НЧ приводит к уменьшению скорости переноса на всех резонансных частотах.

С увеличением диэлектрической проницаемости ε_3 окружающей среды в низкочастотной области происходит уменьшение амплитуды скорости переноса и смещение основной резонансной частоты влево по частотной оси. Остальные спектральные полосы, соответствующие высшим мультиполям также уменьшаются по амплитуде.

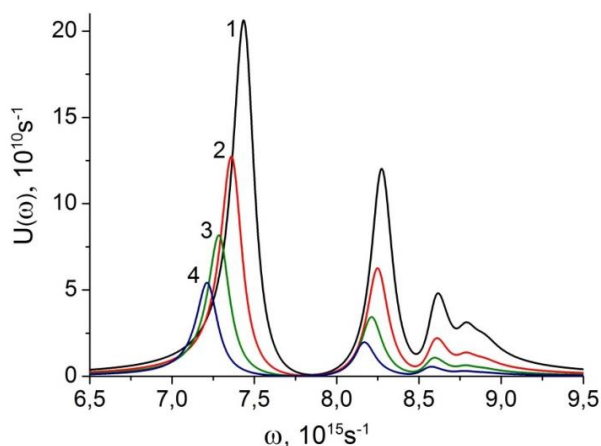


Рисунок 3 – Спектры скорости безызлучательного переноса энергии в зависимости от радиуса R_1 проводящего ядра наночастицы. Значения R_1 : 1 – 2, 2 – 3, 3 – 4, 4 – 5 nm

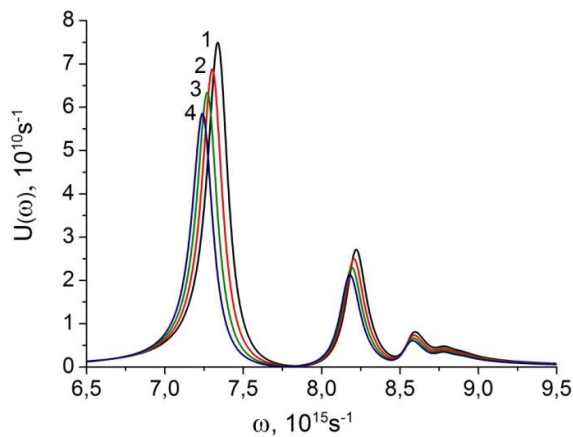


Рисунок 4 – Спектры скорости безызлучательного переноса энергии от КТ к НЧ в зависимости от величины диэлектрической проницаемости среды ε_3 . Значения ε_3 : 1 – 1.6,

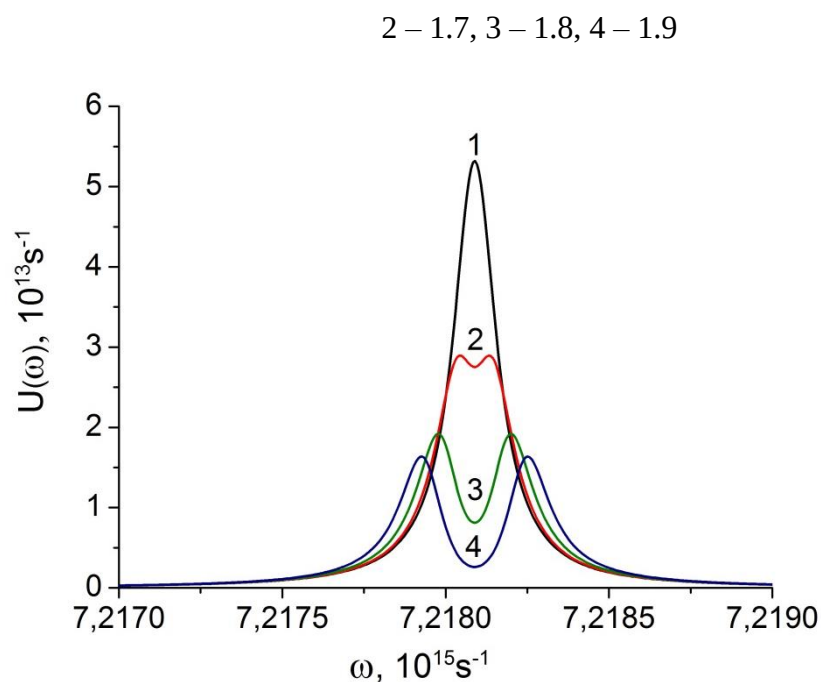


Рисунок 5 – Спектры скорости безызлучательного переноса энергии от КТ к НЧ в магнитном поле с индукцией B , $\gamma = 1.6 \times 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Значения B : 1 – 0, 2 – 1, 3 – 2, 4 – 3 Т.

На рисунке 5 показано, как внешнее магнитное поле изменяет величину скорости безызлучательного переноса энергии и ее резонансную частоту. Видно, что спектральная кривая деформируется в магнитном поле, вначале уменьшается по амплитуде, а затем, расщепляется на две компоненты, расстояние между которыми увеличивается с ростом магнитного поля.

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

Список литературы

1. P. Rajput, M.S. ShishodiaFörster. Resonance Energy Transfer and Molecular Fluorescence near Gain Assisted Refractory Nitrides Based Plasmonic Core-Shell Nanoparticle //Plasmonics. – 2020. – Т. 15. – №. 6. – С. 2081-2093.
2. Д.В. Гузатов, С.В. Гапоненко. Фотолюминесценция молекул вблизи металлических наночастиц с диэлектрической оболочкой //Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2020. – Т. 63. – №. 6. – С. 689-694.
3. A.K. Tobias, M. Jones Metal-enhanced fluorescence from quantum dot-coupled gold nanoparticles // The Journal of Physical Chemistry C. – 2018. – Т. 123. – №. 2. – С. 1389-1397.
4. Ч.М.Брискина, А.П.Тарасов, В.М.Маркушев, М.А. Ширяев. Усиление краевого излучения наностержней ZnO в магнитном поле // Ж. прикл. спектр. – 2018. –Т. 85. –№ 6. –С. 1018-1020.

5. М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян, Т.М. Чмерева. Люминесценция комплекса "Квантовая точка - слоистая плазмонная наночастица" в магнитном поле // Оптический журнал. –2021. – Т. 88. – № 9. – С. 9-19.

6. М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян. Люминесценция двухчастичного комплекса из сферической квантовой точки и плазмонной наноглобулы во внешнем магнитном поле // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128. – Вып. 11. – С. 1776-1783.

7. В.Л. Гинзбург, А.А. Рухадзе. Волны в магнитоактивной плазме. М.: Наука, 1975. 256 с.

8. М.Г. Кучеренко, В.М. Налбандян, Т.М. Чмерева. Особенности формирования спектров излучения двухчастичных наносистем в магнитном поле // Оптика и спектроскопия. –2022. – Т. 130.–№ 5. – С. 745-753.

«ЗЕЛЕНый» СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ

Никитина А.С., Баранова А.П., Хадиева Э.Р., Блиялкина Д.К.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

В последние года нанотехнология развивается от мультидисциплинарной сферы изучения до основной научной области. В дополнении к химическим и физическим подходам новая, несложная и наиболее дешевая стратегия синтезировать металлические наночастицы использует биологические инструменты, такие как бактерии, дрожжи, грибы и растения и называется «зеленая» нанотехнология. Большинство исследований посвящены синтезу наночастиц в растениях, потому что этот метод исследования экономически целесообразен для крупномасштабного производства наночастиц [1]

«Зеленый» синтез – метод получения металлических наночастиц различной морфологии из солей соответствующих металлов с использованием в качестве восстанавливающих и стабилизирующих агентов экстракты растений. Метод позволяет получать металлические наночастицы размером от 10 до 500 нм сферической, трехгранной, пентагональной и гексагональной форм.

Синтез наночастиц требует три ключевых компонента – растворяющая среда, восстанавливающие и стабилизирующие вещества. Водная среда используется для «зеленого» синтеза вместо органического растворителя.

Механизм синтеза металлических наночастиц в растительных экстрактах включает три основные фазы:

- 1) фазу активации, где происходит восстановление ионов металла;
- 2) фазу роста, в течение которой происходит формирование наночастиц за счет гетерогенной нуклеации и роста, что сопровождается увеличением термодинамической стабильности наночастиц;
- 3) фазу терминации процесса, определяющую окончательную форму наночастиц [1]

Восстановление солей сопровождается изменением цвета раствора от желтого до фиолетового, темно-коричневого, черного и темно-зеленого в зависимости от используемых компонентов. Для получения высокого качества таких наночастиц используются различные концентрации экстрактов растения и солей, рН экстрактов, оптимальные условия проведения синтеза, интервал температур от 10 до 300°C. Данным методом получают различные металлические наночастицы; золото, серебро, платина, цинк, медь, окись титана, магнетит и никель. применяют разные части растений; стебель, корень, фрукты, семя, кожа, листья и цветок.

Растительный свежий экстракт включает в себя разные метаболиты; полифенолы, флавоноиды, алкалоиды и терпеноиды, фенольные кислоты, глюкоза и белки, в которых эти составы главным образом ответственны за восстановление ионов и формирование металлических наночастиц [1, с.

Различие растительных экстрактов, разновидностей солей металлов и способность изменять состав реакционной смеси и условия проведения реакции путем изменения температуры, pH реакционной смеси и включения добавок биологического происхождения (биоматриц) позволяют создавать наночастицы разнообразных металлов определенного размера и формы [2]

Наночастицы металлов используются в терапии онкологических заболеваний, в качестве антисептических средств, в направленной доставке лекарств, молекулярной визуализации, очистке сточных вод, катализе, создании биосенсоров, топливных элементов, покрытий и косметических средств [3]

Схема синтеза металлических наночастиц в растительном экстракте.

Ионы металла связываются с восстанавливающими метаболитами и стабилизирующими агентами, восстанавливаясь до атомов металлов.

Полученный комплекс атома металла с метаболитом взаимодействует с другими комплексами, формируя метаболическую наночастицу.

Затем происходит рост и слияние отдельных мелких наночастиц в более крупные за счет процесса переконденсации до тех пор, пока частицы не обретут нужный размер и форму, стабильные в данных условиях.

При увеличении длительности фазы роста наночастицы агрегируют между собой, образуя нанотрубки, нанопризмы, наношестиугольники, а так же множество других наночастиц нерегулярной формы [Kim et al. , 2010].

В настоящее время для синтеза металлических наночастиц используют различные физические и химические процессы, позволяющие получать наночастицы с заданными свойствами. Однако, несмотря на широкое распространение, это, как правило, дорогостоящие, трудоемкие способы, сопряженные с риском и потенциальной опасностью для окружающей среды и живых организмов. Таким образом, существует очевидная потребность в альтернативных экономически эффективных и в то же время экологически чистых методах производства наночастиц.[4]

При получении наночастиц необходимо учитывать их неустойчивость и высокую реакционную способность, которые могут привести к агрегации наночастиц, потере необходимых свойств при взаимодействии с окружающей средой, изменить структуру наночастиц. Это может нарушить эволюционный переход к наноматериалу и в конечном итоге определить низкий уровень качества эксплуатационных характеристик

Восстановление солей сопровождается изменением цвета раствора от желтого до фиолетового, темно-коричневого, черного и темно-зеленого в зависимости от используемых компонентов. Для получения высокого качества таких наночастиц используются различные концентрации экстрактов растения и солей, pH экстрактов, оптимальные условия проведения синтеза, интервал температур от 10 до 300°C. Данным методом получают различные металлические наночастицы; золото, серебро, платина, цинк, медь, окись титана, магнетит и никель. применяют разные части растений; стебель, корень, фрукты, семя, кожа, листья и цветок.

Растительный свежий экстракт включает в себя разные метаболиты; полифенолы, флавоноиды, алкалоиды и терпеноиды, фенольные кислоты, глюкоза и белки, в которых эти составы главным образом ответственны за восстановление ионов и формирование металлических наночастиц [1, с.

Различие растительных экстрактов, разновидностей солей металлов и способность изменять состав реакционной смеси и условия проведения реакции путем изменения температуры, pH реакционной смеси и включения добавок биологического происхождения (биоматриц) позволяют создавать наночастицы разнообразных металлов определенного размера и формы [5, с.

Наночастицы металлов используются в терапии онкологических заболеваний, в качестве антисептических средств, в направленной доставке лекарств, молекулярной визуализации, очистке сточных вод, катализе, создании биосенсоров, топливных элементов, покрытий и косметических средств [2, с.

Схема синтеза металлических наночастиц в растительном экстракте.

Ионы металла связываются с восстанавливающими метаболитами и стабилизирующими агентами, восстанавливаясь до атомов металлов.

Полученный комплекс атома металла с метаболитом взаимодействует с другими комплексами, формируя метаболлическую наночастицу.

Затем происходит рост и слияние отдельных мелких наночастиц в более крупные за счет процесса переконденсации до тех пор, пока частицы не обретут нужный размер и форму, стабильные в данных условиях.

При увеличении длительности фазы роста наночастицы агрегируют между собой, образуя нанотрубки, нанопризмы, наношестиугольники, а так же множество других наночастиц нерегулярной формы [5]

В настоящее время для синтеза металлических наночастиц используют различные физические и химические процессы, позволяющие получать наночастицы с заданными свойствами. Однако, несмотря на широкое распространение, это, как правило, дорогостоящие, трудоемкие способы, сопряженные с риском и потенциальной опасностью для окружающей среды и живых организмов. Таким образом, существует очевидная потребность в альтернативных экономически эффективных и в то же время экологически чистых методах производства наночастиц

При получении наночастиц необходимо учитывать их неустойчивость и высокую реакционную способность, которые могут привести к агрегации наночастиц, потере необходимых свойств при взаимодействии с окружающей средой, изменить структуру наночастиц. Это может нарушить эволюционный переход к наноматериалу и в конечном итоге определить низкий уровень качества эксплуатационных характеристик

Список литературы

1. Макаров В.В. «Зеленые» нанотехнологии синтеза металлических наночастиц с использованием растений // Молекулярная биология.- 2014. - №1 [электронный ресурс] – Режим доступа. – URL: <http://actanaturae.ru> (дата обращения 15.01.2016)

2. Сергеева О.В. Введение в нанотехнологию: пособие для студентов хим.фак./ О.В. Сергеева, С.к. Рахманов. – Минск: БГУ, 2009.-176с.

3.https://translated.turbopages.org/proxy_u/en-ru.ru.de070154-63c3f902-4650f1c974722d776562/https/www.sciencedirect.com/topics/chemistry/green-synthesis

4. [1.2. 2. «Зеленый» синтез: получение бионаночастиц с использованием экстрактов лекарственных растений \(studfile.net\)](#)

5. https://translated.turbopages.org/proxy_u/en-ru.ru.7e8cae78-63c3f9ba-f2b3ee4d-74722d776562/https/en.wikipedia.org/wiki/Green_solvent

ПРОБЛЕМЫ ИЗУЧЕНИЯ ДИНАМИКИ ВРАЩАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛАВ СТАРШИХ КЛАССАХ СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ

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

Одной из главных особенностей современного периода школьного и вузовского образования является ориентация на компетентностную модель обучающегося. Реальной организационной формой реализации компетентностной модели образования должна стать профильная старшая школа, которая позволяет обеспечить восстановление преемственности среднего и высшего образования.

Курс общей физики является основой подготовки бакалавров инженерно-технических профилей. Формирование части компетенций будущего выпускника инженерных направлений подготовки может быть начато в рамках обучения в профильных физико-математических классах при подготовке к сдаче Единого государственного экзамена по физике.

Опыт работы с учащимися старших классов и анализ входного контроля первокурсников инженерно-технических профилей показал, что теория вращательного движения играет важную прикладную роль в изучении курса физики. Глубокие знания по теории вращательного движения необходимы для успешного усвоения учащимися профильных классов учебного материала различных разделов школьных программ, способствуют выполнению заданий ЕГЭ по физике и успешному обучению в вузах физико-технического профиля в дальнейшем.

Анализ содержания программ для профильных классов показывает, что все они содержат теорию вращательного движения в разделе «Механика», по сравнению с базовыми программами физики.

В пособии под редакцией С.М. Козела [1], учебниках Г.Я. Мякишева, А.А. Пинского [2, 3] при изучении кинематики вращательного движения вводятся понятия угловых параметров (угловое перемещение, угловая скорость, угловое ускорение) и их связь друг с другом и с линейными характеристиками движения. При изучении динамики вращательного движения водится основной закон динамики вращательного движения, закон сохранения момента импульса и теоремы Гюйгенса-Штейнера. Формируются понятия момента инерции, момента импульса, происходит углубление понятия момента силы. Понятие момента импульса тела водится только для изолированного тела с закрепленной осью вращения и отсутствует понятия момента импульса материальной точки и мо-

мента импульса системы тел. Особую важность представляют изучение закона сохранения момента импульса и вычисление кинетической энергии вращающегося тела. Как показывает опыт нашей работы с учащимися Университетской физико-математической школы определять направления векторов угловой скорости, момента силы и момента импульса могут далеко не все из них.

Как правило, динамику вращательного движения твердого тела начинают с изучения движения материальной точки по окружности. Вводят понятие момента сил относительно оси вращения и получают основное уравнение динамики вращательного движения твердого тела. Необходимо заметить, что понимание физического смысла, этого уравнения вызывают затруднения, поэтому для лучшего понимания и запоминания целесообразно проводить аналогию со вторым законом Ньютона. Учащимся известно, что второй закон устанавливает зависимость величины и направления ускорения от действующей силы и массы тела. Основное уравнение вращательного движения устанавливает зависимость углового ускорения от момента силы и момента инерции тела.

Далее, можно вывести уравнение движения абсолютно твердого тела вокруг неподвижной оси, если разбить твердое тело на множество элементарных масс, вращающихся по окружности, центры которых лежат на неподвижной оси вращения и ввести понятие момента инерции тела относительно этой оси. Из-за недостаточной математической подготовки, не всегда существует возможность показать учащимся методы вычисления моментов инерции различных твердых тел. Однако, формулы моментов инерции тел правильной формы (обруч, шар, диск, однородный стержень) можно привести без вывода. Это, по нашему мнению, позволит значительно расширить круг решаемых задач.

Одним из основных законов не только динамики поступательного движения твердого тела, но и фундаментальным законом природы является закон сохранения момента импульса. По причине недостаточного владения учащимися математическим аппаратом, закон сохранения момента импульса в школьном курсе физики как правило не изучают. Мы предлагаем рассматривать закон сохранения момента импульса проведя аналогию с законом сохранения импульса. Согласно закону сохранения импульса для изменения импульса механической системы тел необходимо приложить внешние силы, так как сумма внутренних сил согласно третьему закону Ньютона равно нулю. В случае замкнутой системы сумма внешних сил также равна нулю, а, следовательно, импульс замкнутой системы не изменяется. При вращательном движении изменяется момент импульса под действием момента силы. Если момент внешних сил равен нулю, то момент импульса сохраняется. Внутренние силы не могут изменять скорость поступательного движения центра масс системы тел. Если же под действием внутренних сил изменить расположение отдельных частей вращающегося тела, то сохраняется общий момент импульса, а угловая скорость системы изменяется. В качестве примера подтверждения закона сохранения импульса можно

привести опыт со скамьей Жуковского, вращение фигуриста, эллиптические орбиты вращения планет и т.д.[4, 5].

В методике изучения вращательного движения твёрдого тела формировании понятий и умений особая роль принадлежит решению задач. Именно при решении задач достигается уточнение содержания понятий момента сил, момента инерции и момента импульса применения основного уравнения динамики вращательного движения твердого тела. В качестве примера можно рассмотреть следующие задачи:

1. На барабан радиусом $R=0,5$ м и с горизонтальной осью вращения намотан шнур, к концу которого привязан груз массой $m = 10$ кг. Найдите момент инерции барабана, если известно, что его угловое ускорение равно $\varepsilon = 2$ рад/с. Трением пренебечь.

2. К ободу однородного диска радиусом $R=0,2$ м массой $m=1,2$ кг приложена постоянная сила 100 Н, при вращении на диск действует момент силы трения, равный 5 Н·м. Чему равно угловое ускорение диска?

Таким образом, знание законов вращательного движения необходимы для углубленного изучения не только механики, но и имеет большое значение для последующего изучения законов Кеплера, колебаний физического и математического маятников, теплоемкости веществ и поляризации диэлектриков, магнитных свойств веществ, классической и квантовой моделей атома.

Выбор физико-математического профиля обучения должен гарантировать такой уровень обучения, который бы позволял удовлетворить главную потребность данной группы учащихся -продолжение обучения в высших учебных заведениях соответствующего профиля. Выпускник средней школы, решивший продолжить образование в вузах физического и технического профилей должен иметь углубленную подготовку по физике. Она является необходимой базой обучения в этих вузах.

Список литературы

1. Козел, С.М. Физика. 10-11 классы: пособие для учащихся и абитуриентов. В 2 ч. Ч. 1. / [С.М. Козел](#). - М.: Мнемозина, 2010. - 287 с.

2. Мякишев, Г.Я. Физика. 10 класс: учеб. для общеобразоват. учреждений: базовый и профил. уровни / [Г.Я. Мякишев](#), [Б.Б. Буховцев](#), [Н.Н. Сотский](#); под ред. В.И. Николаева, Н.А. Парфентьевой. - 19-е изд. - М.: Просвещение, 2010. - 366 с. ISBN: [9875090227766](#)

3. Физика. 10 класс: учеб. для общеобразоват. учреждений и shk. с углубл. Изучением физики: профил. уровень / [О.Ф. Кабардин, В.А. Орлов, Э.Е. Эвенчик и др.]; под ред. А.А. Пинского, О.Ф. Кабардина; Рос. акад. наук, Рос. акад. образования, изд-во «Просвещение». - 13-е изд.- М.: Просвещение, 2011.- 431 с. ISBN: [9875090256162](#)

4. Ермакова Татьяна Ивановна. Теория вращательного движения в курсе физики профильных классов : Дис. ... канд. пед. наук : 13.00.02 : Коломна, 2005 240 с. РГБ ОД, 61:05-13/2329

5. Перунова, М. Н. О введении понятия момента импульса и закона его сохранения в профильных классах средней школы / Перунова М. Н. // 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. проф. образования "Оренбургский. гос. ун-т". - Электрон. дан.- Оренбург, 2015. - С. 1107-1111.

ЛАБОРАТОРНЫЙ СТЕНД ПО РАДИОЭЛЕКТРОНИКЕ «ДВУХТРАНЗИСТОРНЫЙ МУЛЬТИВИБРАТОР»

Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Оренбургский государственный университет»

Изучение дисциплины «Радиоэлектроника» в вузе предполагает, помимо освоения теоретических знаний, обязательное получение студентами практических навыков работы с радиоэлектронными компонентами и электронными схемами, построенными на их основе. Очевидно, что в этот перечень входит и умение паять, и навыки проектирования и травления плат и пр. Однако, учитывая достаточно скромный объем часов отводимых на освоение дисциплины, разумно сделать акцент на понимании обучающимися принципов работы основных электронных схем и процессов, протекающих в этих схемах. При таком подходе схемы для практикума готовятся заранее, в виде отдельных стендов, на которых предусматривается возможность быстрой замены основных элементов.

В качестве такого лабораторного стенда здесь обсуждается схема двухтранзисторного мультивибратора (рисунок 1), генерирующая периодические колебания напряжения по форме близкие к прямоугольным. Для подключения сменных элементов использованы пружинные клеммы с двумя контактами для резисторов и емкостей и с тремя контактами для транзисторов. Это существенно экономит время при сборке схемы и, при этом, оставляет возможность студентам варьировать ее параметры в широком диапазоне.

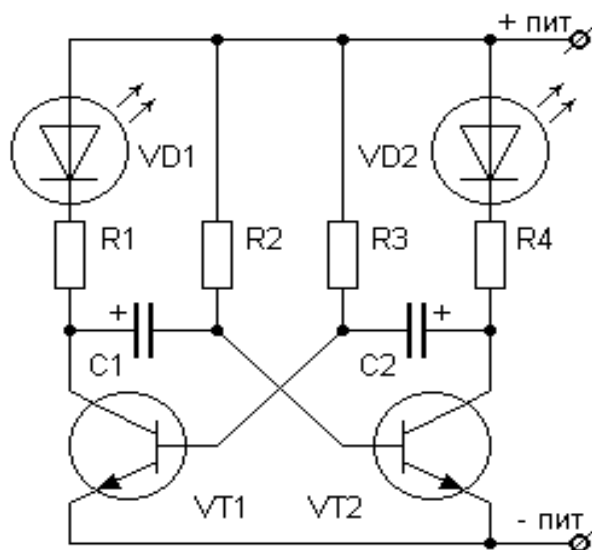


Рисунок 1 – Схема двухтранзисторного мультивибратора

Мультивибратор собран на двух биполярных п-р-п транзисторах VT_1 и VT_2 , четырех резисторах R_1 , R_2 , R_3 и R_4 , двух электролитических конденсато-

рах C_1 и C_2 и двух светодиодах VD_1 и VD_2 . Последние служат для наглядной индикации работы мультивибратора, сопротивления R_1 и R_4 , предназначены для ограничения тока через светодиоды и на параметры генератора не влияют.

Фактически данная схема представляет собой двухкаскадный усилитель с цепью положительной обратной связи (выход второго каскада соединён через конденсатор с входом первого каскада). В результате этого усилитель за счёт положительной обратной связи превращается в генератор.



Рисунок 2 – Внешний вид лабораторного стенда с подключенными резисторами, конденсаторами и транзисторами в пружинных клеммах

Время между переключениями определяется «медленным» перезарядом конденсаторов через базовые резисторы R_2 и R_3 , а время перезаряда определяется номиналами RC цепочек – базовых резисторов и конденсаторов. Длительность импульса высокого уровня на коллекторе VT_1 определяется номиналами R_3 и C_2 , а длительность импульса на коллекторе VT_2 определяется номиналами R_2 и C_1 :

$$\tau_1 = R_2 C_1 \text{ и } \tau_2 = R_3 C_2.$$

Полный период колебания мультивибратора равен сумме длительностей импульса и паузы:

$$T = \tau_1 + \tau_2.$$

При равенстве $R_2=R_3$ и $C_1=C_2$, на выходах мультивибратора будет «меандр» – прямоугольные импульсы с длительностью равной паузам между ними (рисунок 3).

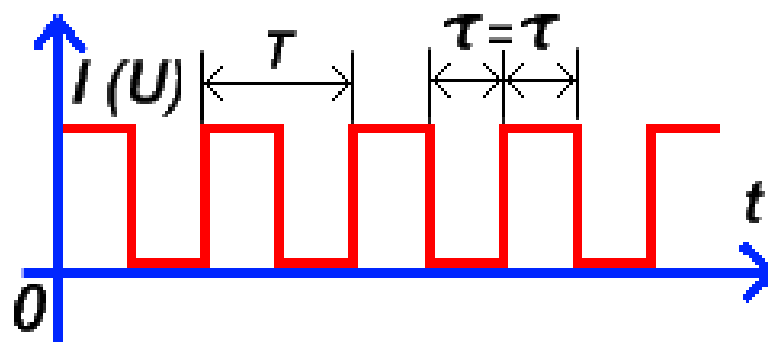


Рисунок3– Меандр от симметричного мультивибратора

Отметим здесь, что понятие «прямоугольный импульс» является некоторым приближением, в реальных схемах форма импульса искажается за счет затягивания по времени переднего и заднего фронта импульса.

Необходимо учесть, что светодиоды VD_1 и VD_2 позволяют только качественно определить работоспособность схемы, для точного определения параметров колебаний необходимо использовать осциллограф. Для разрабатываемого лабораторного практикума требования к осциллографу невысоки: достаточными являются диапазоны рабочих частот от единиц герц до десяти килogerц и рабочих напряжений от 0 до 5 В. Данные параметры технически легко реализуются с помощью совмещения возможностей микроконтроллера Arduino (Uno или Nano) на плате ATmega328 с персональным компьютером. Преимуществом такого осциллографа является его небольшая цена, легкая масштабируемость и универсальность.

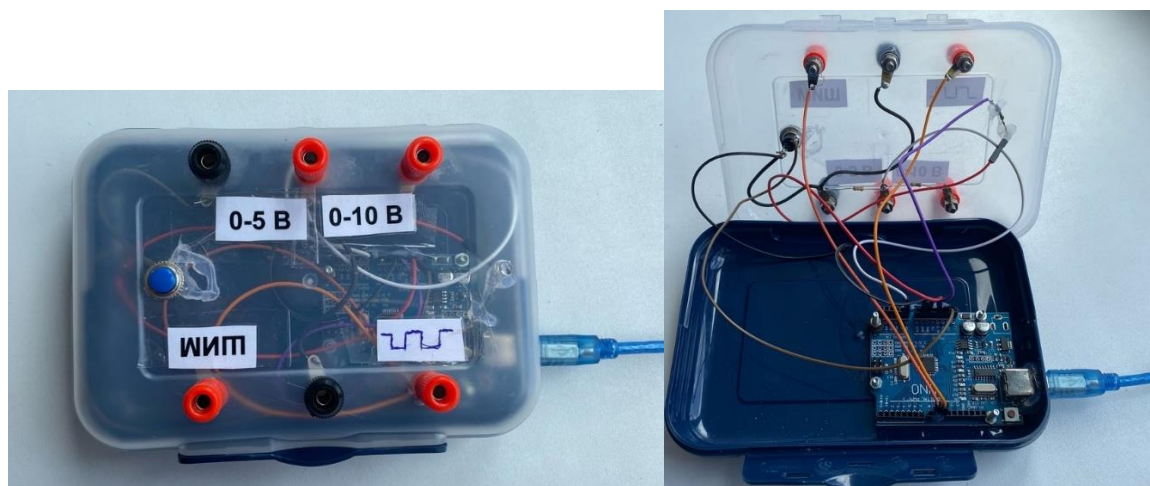


Рисунок 4 – Внешний вид лицевой стороны блока (слева) и вид электрических соединений осциллографа-генератора на контроллере

В данной работе использована плата Arduino UnoR3, которая помимо 14 цифровых входов/выходов (в т.ч. и с возможностью получения ШИМ-сигнала на некоторых из них), имеет 6 аналоговых входов позволяющих оцифровывать входящий сигнал, что позволяет реализовать на них функции осциллографа.

Аналого-цифровой преобразователь на плате один, при необходимости он коммутируется с нужным аналоговым входом, его разрядность 10 бит, т.е. он измеряет 1024 уровня сигнала. При стандартном опорном напряжении 5 В это позволяет получить разрешение около 5 мВ, что для учебного прибора достаточно.

Для эргономичности плата микроконтроллера (рисунок 4) помещена в пластиковый контейнер, СОМ-порт для подключения к ЭВМ выведен из корпуса. Для расширения рабочего диапазона до 10 В используется делитель напряжений на двух резисторах по 10 кОм каждый. Эмуляция генератора реализуется через два выхода. На одном генерируется ШИМ-сигнал прямоугольной формы в диапазоне напряжений от 0 до 5 вольт на частоте 500 Гц с изменением скважности (255 уровней). Второй вывод связан с функцией Tone («Частота»), он генерирует прямоугольный сигнал в таком же диапазоне напряжений с 50% скважностью с частотой изменяемой от 50 до 10 000 Гц.

Для сопряжения персонального компьютера с блоком расширения на базе микроконтроллера ArduinoUNO/Nano разработано программное обеспечение «Осциллограф-генератор на базе Arduino». Программа позволяет надежно регистрировать импульсы колебаний напряжения на коллекторных выводах мультивибратора, исследовать их форму и измерять временные параметры.

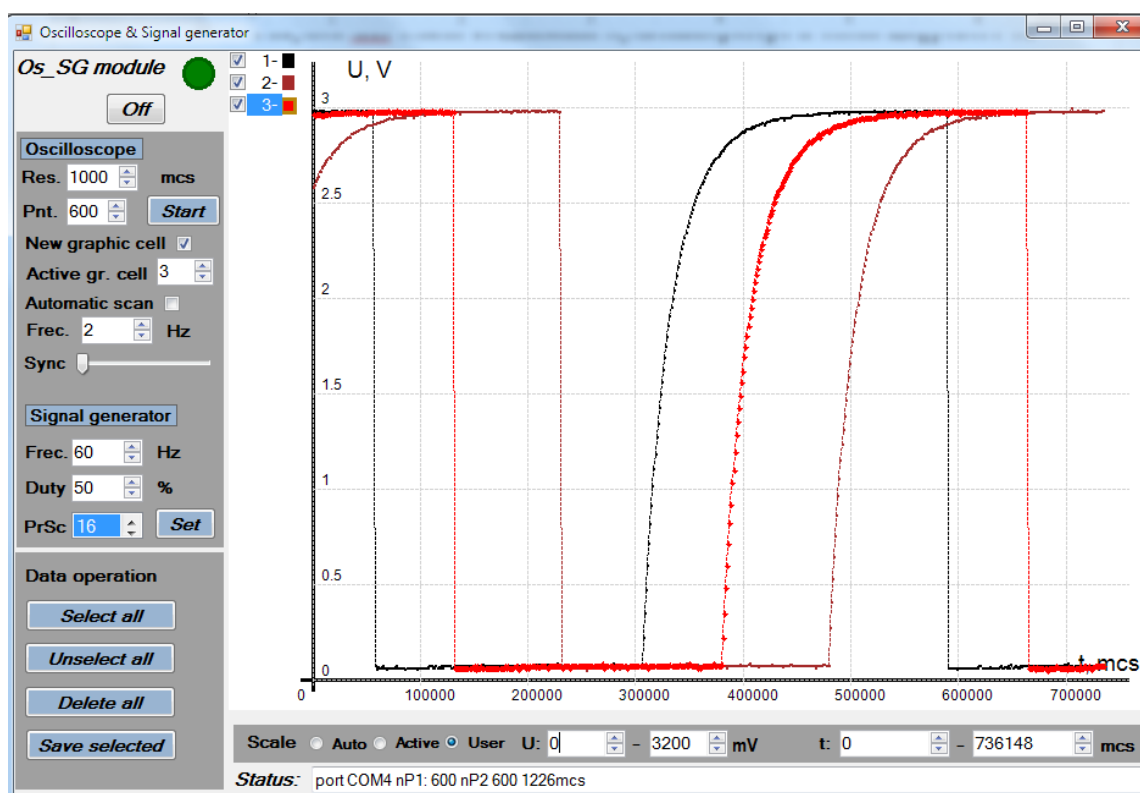


Рисунок 5 – Внешний вид рабочего окна пользовательской программы

Программа разработана в среде Visual Studio 2017 на языке программирования C#. Окно программы функционально разделено две части (см. рисунок 5): слева – рабочая область, позволяющая подключаться к блоку расширения, задавать параметры осциллографа и генератора, а также сохранять полученные

данные в текстовом формате, совместимом с MS Excel и Origin. В правой части окна размещена графическая область, где отображаются данные полученные с осциллографа в декартовых координатах с заданным масштабированием.



Рисунок 6– Панель подключения к блоку расширения в неактивном (слева) и активном (справа) состоянии

При запуске программы ее основные функции являются неактивными, для их активации необходимо подключение к блоку расширения через USB порт. При нажатии на кнопку «On» в панели «Os_SG module» (рисунок 6) программа автоматически определяет перечень доступных COM портов в системе и поочередно отправляет в каждый из них запрос на подключение, первый откликнувшийся порт будет подключён и программа далее будет работать только с ним. Успешное подключение блоку расширения переводит программу в функциональный режим, на рабочем окне открываются панель для управления параметрами осциллографа и генератора и панель для работы с данными. Для удобства пользователя состояние подключения программы к блоку расширения визуализируется виртуальным индикатором. Кнопка «Off», появляющаяся после подключения, выполняет обратную функцию, при ее нажатии программа отключается от блока расширения и деактивирует свои основные функции.

Панель управления параметрами осциллографа и генератора является основной (рисунок 7) и обеспечивает регулировку режимами работы блока расширения. Для осциллографа ячейка «Res.» позволяет задавать время задержки между измерениями АЦП в микросекундах (разрешение по времени), ячейка «Pnt» – количество экспериментальных точек (максимальное число точек – 600, ограничивается объемом оперативной памяти микроконтроллера). При этом нужно учитывать, что сам процесс оцифровки занимает некоторое время, поэтому реальное разрешение по времени будет несколько больше заданного.

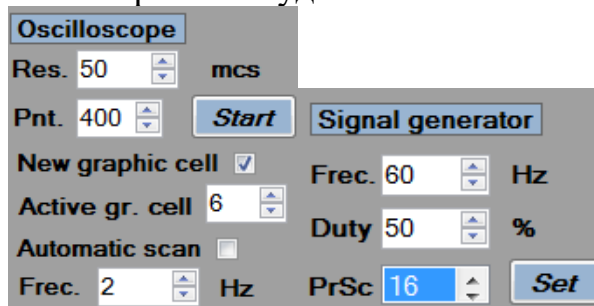


Рисунок 7– Установки осциллографа (слева) и генератора (справа)

Нажатием на кнопку «Start» программа выполняет однократное измерение с заданными значениями «Res.» и «Pnt», данные измерения помещаются

либо в текущий график в памяти программы (всего 30 возможных графиков), либо в график с заданным номером (устанавливается в ячейке «Active gr. cell»), либо, при включении флага «New graphic cell», данные будут записываться каждый раз в новый график по кругу. Флаг «Automatic scan» включает автоматическую развертку осциллографа в текущем (активном) графике, частота развертки определяется ячейкой «Fres.». На панели генератора ячейка «Fres.» задает частоту генерации прямоугольных импульсов в герцах на соответствующем выходе блока расширения, ячейка «Duty» определяет степень заполнения прямоугольного меандра на выходе ШИМ-сигнала (частота 500 Гц). Ячейка «PrSc» определяет значение предделителя АЦП микроконтроллера, она влияет на скорость и корректность оцифровки. Кнопка «Set» записывает установки генератора в блок расширения.

Панель для работы с данными позволяет выбирать все графики «Select all», снимать выделение «Unselect all», удалять данные из графиков «Delete all» и сохранять выбранные графики в текстовом формате «Save selected».



Рисунок 8– Вид графической области программы. 1 – графики в декартовых координатах « $U(t)$ » с заданным масштабированием; 2 – интерактивный список выбора отображаемых кривых; 3 – панель выбора режима масштабирования

В графической области (рисунок 8) отображаются все выделенные и активные графики в декартовых координатах « $U(t)$ » с заданным масштабированием. Режим масштабирования выбирается на панели «Scale»: позиция «Auto» выбирает максимальные и минимальные значения по осям координат из всех отображаемых графиков, позиция «Active» выбирает максимальные и минимальные значения по осям координат для активного графика, позиция «User» позволяет пользователю задавать максимальные и минимальные значения по

осям координат используя соответствующие ячейки ввода для «U» и «t». В левой части графической области расположен интерактивный список, позволяющий выбирать из всего перечня экспериментальных кривых определенный набор, который будет отображаться на графике или сохраняться на диск.

Таким образом комплект оборудования для лабораторной работы включает в себя стенд со схемой двухтранзисторного мультивибратора, осциллограф-генератор на базе микроконтроллера Arduino, персональный компьютер с предустановленным ПО для осциллографа-генератора, несколько пар транзисторов одинаковой серии, набор из нескольких конденсаторов различного номинала (в диапазоне от 1 до 100 мкФ) и нескольких резисторов с различными сопротивлениями (в диапазоне от 1 до 100 кОм).

Цель лабораторной работы может быть сформулирована как: Изучение принципа работы транзисторных электронных схем и переходных процессов, протекающих в этих схемах на примере схемы двухтранзисторного мультивибратора.

Задания для выполнения:

а) Определить расположение выводов (эмиттер, коллектор и база) у одной пары транзисторов, либо с помощью мультиметра, либо используя справочную литературу.

б) По заданным преподавателем параметрам сигнала τ_1 , τ_2 подобрать необходимые номиналы сопротивлений R_2 , R_3 и емкостей C_1 , C_2 .

в) Собрать схему с этими элементами и получить устойчивую генерацию автоколебаний.

г) Экспериментально зарегистрировать сигналы электрических колебаний на коллекторных выходах транзисторов и сравнить их между собой.

д) Сравнить экспериментально полученные длительности импульсов τ_1 , τ_2 с заданными значениями и сделать вывод.

е) Сравнить зарегистрированные экспериментально импульсы с «идеальным» прямоугольным импульсом. Определить время нарастания и время спада сигнала. Рассмотреть, как меняются время нарастания и время спада сигнала при замене основных элементов схемы: транзисторов, резисторов и емкостей.

Список литературы

1. Немцов, М.В. Электротехника и электроника. - Москва : Высш. шк., 2007. - 560 с.
2. Давыдов, В. Н. Твердотельная электроника : учебное пособие— Томск : ТУСУР, 2013. – 175 с.
3. Atmel-42735B-ATmega328/P Datasheet Complete-11/2016.

СПЕКТРОСКОПИЯ ЭПР ФЛОГОПИТА В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ СОСТОЯНИИ

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

Кристаллы слюды являются наиболее уникальными представителями мира кристаллических тел[1-3]. Для них характерно резко выраженное изменение физических свойств с направлением. Это обусловлено своеобразием кристаллической структуры: большой энергией связи частиц в пакете и значительно меньшей между пакетами по плоскости совершенной спайности. Следствием этой анизотропии сил межатомных связей является замечательная способность кристаллов слюды расщепляться на тонкие плоскопараллельные пластинки значительной площади, т.е. исключительно выраженная анизотропия механических свойств. Последняя приводит к сильной зависимости от направления в кристалле модулей упругости, прочности при различных видах деформации, твердости и других механических характеристик. Слоистое распределение частиц в структуре приводит к высокой теплопроводности вдоль слоев.

Наличие своеобразных извилистых пустот и каналов в межпакетных зонах кристалла и уплотненных барьеров из атомов между ними создает резко отличные условия для движения ионов вдоль спайности и перпендикулярно к ней. Это обуславливает различие электрических свойств слюд в двух основных направлениях на несколько порядков.

Таким образом, для физических свойств слюд характерна необычайно большая анизотропия, которая широко используется при разнообразных применениях кристаллов на практике. При этом необходимо постоянно учитывать, что рядом с высокими значениями тех или иных характеристик в кристалле существуют и низкие: для этого достаточно лишь изменить ориентацию на девяносто градусов.

Основу кристаллической структуры слюд составляет плоский двойной кремнекислородный пакет [4], в котором имеет место последовательность слоев, представленная на рисунке.

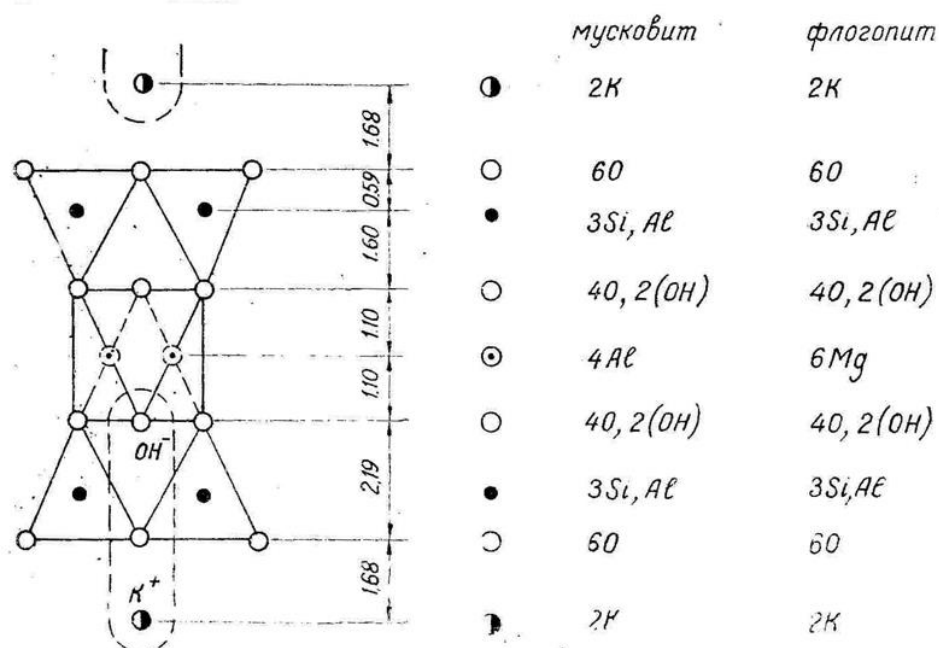


Рисунок 1 – Последовательность атомов в пакете кристалла слюды и количество атомов на одну элементарную ячейку. Толщина слоев приведена в ангстремах.

Элементарный пакета, изображенного на рисунке, около 10 ангстрем ($1\text{A}=10^{-8}\text{см}$). С наружных сторон пакеты ограничены основаниями кремнекислородных тетраэдров, и в соответствии с четвертной координацией атомов кремния атомы кислорода образуют непрерывные шестиугольные плоские сетки.

Два тетраэдрических слоя своими внутренними валентно не скомпенсированными кислородами обращены к атомам алюминия (или магния в флогопитах) октаэдрического (с шестикратной координацией) слоя и через него сцепляются между собой. Образуется прочный плоский пакет атомов, связанных химическими валентными силами.

В октаэдрическом слое для уравнивания положительных валентностей алюминия (или магния) находятся еще гидроксильные группы OH^- .

Между соседними пакетами в центрах гексагональных кислородных лунок находятся ионы калия (K^+), заряд которых компенсируется зарядом иона кислорода или гидроксильной группы (OH^-) внутри пакета.

Эти два иона образуют жесткие пакетные диполи, взаимодействия между которыми и обеспечивают силы притяжения между пакетами кристалла.

Межпакетные связи в кристалле наиболее слабые, что и проявляется в весьма совершенной спайности, т.е. сравнительно легкой расщепляемости кристалла по межпакетным плоскостям. Эти плоскости совпадают с плоскостью элементарной ячейки кристалла.

Концентрация атомов в межпакетных зонах примерно в три раза меньше, чем в других направлениях в кристалле. Поэтому силы взаимодействия между пакетами на один порядок меньше величины внутрипакетных сил. Это обстоятельство является основной причиной резкого различия физических свойств

слюд в двух направлениях: параллельно и перпендикулярно плоскости спайности.

Аналогичные филлосиликаты входят в состав природных глин в виде микроскопических частиц с размерами 0,01-0,001 мм, а содержащиеся в них примесные ионы Mn^{2+} и Fe^{3+} являются удобными спиновыми зондами для изучения термических превращений керамических материалов. Ионы железа, находящиеся в монокристаллическом флогопите в высокоспиновом состоянии ($S = 5/2$), дают хорошо разрешенные сложные анизотропные спектры ЭПР [5,6]. В глинах, содержащих филлосиликаты, должны наблюдаться спектры ЭПР, характерные для поликристаллических образцов.

Цель данной работы – сравнение спектров ЭПР монокристаллических и поликристаллических образцов флогопита как типичного представителя филлосиликатов в составе многих видов природных глин. С этой целью нами были предприняты сравнительные исследования спектров ЭПР ионов железа Fe^{3+} . Объектом исследования был образец флогопита, представленный на рисунке 2.



Рисунок 2 – многослойный образец природного флогопита.

Для исследований методом ЭПР от основного образца были отщеплены небольшие многослойные частицы размерами 3x5 мм, которые крепились к плоским пластинам держателя, позволяющего вращать образцы в объемном резонаторе спектрометра ЭПР. Угол поворота плоскости образца относительно магнитного поля измерялся с помощью самодельного гониометра, позволяющего проводить измерения с точностью $\sim 1^\circ$.

Спектры ЭПР регистрировались с помощью спектрометра ЭПР ADAN-ICMS 8400, рабочая частота $f \sim 9700$ МГц, частота модуляции 100 КГц, максимальный диапазон изменений магнитного поля 50 – 6000 Гс. Текущая напряженность поля измерялась с помощью встроенного магнитометра на основе датчика Холла, частота СВЧ поля измерялась с помощью встроенного частотомера спектрометра.

На рисунке 3 представлены спектры ЭПР многослойных образцов природного флогопита для двух различных ориентаций плоскостей относительно магнитного поля: поле параллельно плоскости образца и перпендикулярно плоскости.

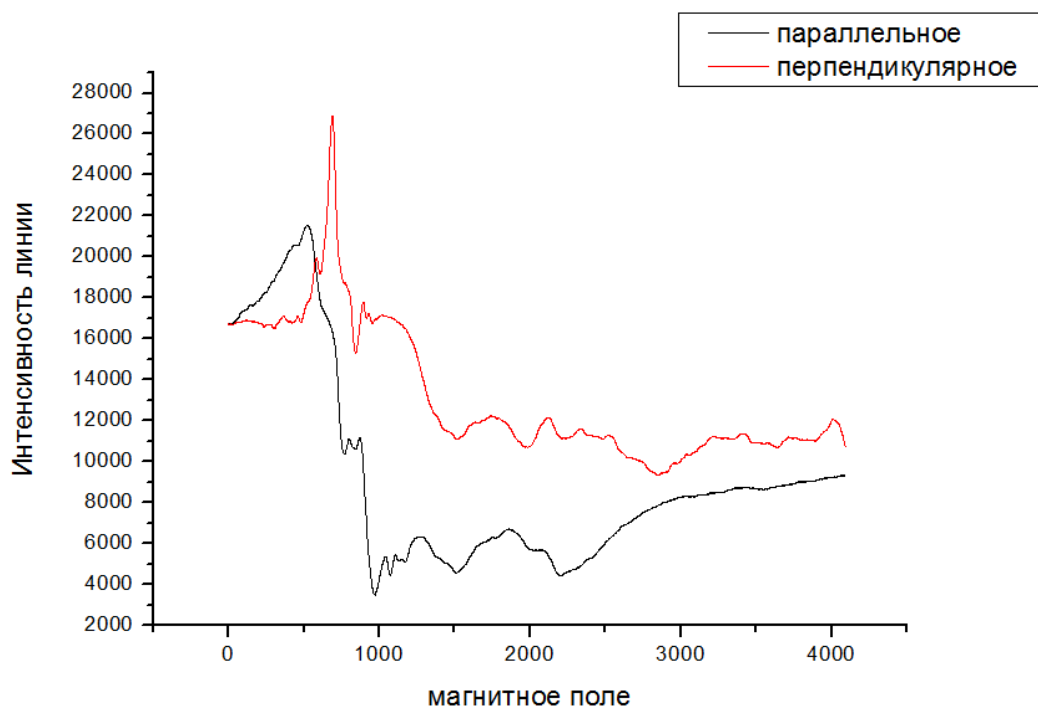


Рисунок 3 – спектры ЭПР монокристаллического флогопита для двух различных ориентаций магнитного поля относительно плоскости образца.

В спектрах ЭПР флогопита, богатого трехвалентным высокспиновым железом, присутствует большое количество линий во всем достижимом диапазоне магнитного поля, обусловленных многочисленными переходами между различными подуровнями примесного высокоспинового иона Fe^{3+} . Подробные угловые зависимости положения линий этих ионов описаны в работе [6].

«Искусственный» поликристаллический образец был получен механическим дроблением исходного монокристаллического флогопита (показан на рис 4).



Рисунок 4 – образец поликристаллического флогопита после механического дробления монокристалла.

Полученный порошок является примером поликристаллического филлосиликата, характерного для многих видов глин. На рисунке 5 представлен

спектр ЭПР поликристаллического филлосиликата создающихся из частиц флогопита.

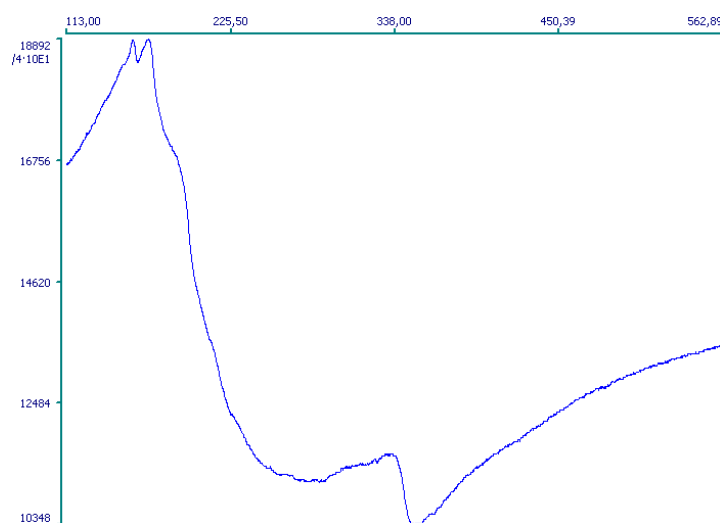


Рисунок – 5 спектр ЭПР поликристаллического филлосиликата создающихся из частиц флогопита.

При переходе от монокристаллического к поликристаллическому флогопиту в спектрах ЭПР остаются только три линии высокоспиновых ионов Fe^{3+} . Линии, соответствующие остальным переходам с большой анизотропией, превратились в одну широкую линию в наблюдаемых спектрах ЭПР, записанных в режиме «первой» производной (рис. 5).

Дополнительную информацию можно получить из спектров ЭПР поликристаллических образцов флогопита, записанной «второй» производной; представленный на рисунке 6.

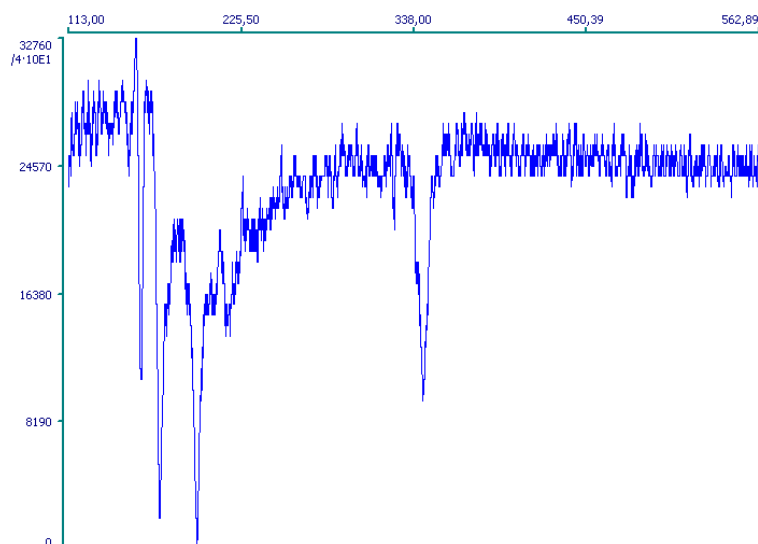


Рисунок – 6 спектр ЭПР поликристаллического флогопита, записанный в режиме «второй» производной.

На спектре отчетливо видны три узкие линии соответствующие высокоспиновым ионам Fe^{3+} , с g -факторами $g \approx 4,2$. Дополнительная линия в области $H = 344$ мТл ($g \approx 1,98$) принадлежит, по-видимому, ионам Fe^{3+} , находящимся в низкоспиновом состоянии ($S=1/2$).

Сопоставление спектров ЭПР поликристаллического флогопита, записанных в режимах «первой производной» и «второй производной», демонстрирует его преимущества второго режима для изучения термических превращений в филлосиликатах.

Три линии соответствуют высокоспиновым ионам Fe^{3+} , находящимся в трех различных неэквивалентных положениях внутри сильно искаженной кристаллической решетки. Полученные данные согласуются с результатами работы [6], полученными при изучении монокристаллов флогопита традиционным методом ЭПР в режиме «первой производной».

Список литературы

1. *Лашев, Е.К.* Слюда. Часть 1. Свойства слюд, Москва, ГИСЛ, 1948, 246 с.
2. *Дядькина, И.Я.* Орлова М.И. Месторождения флогопита. Ленинград, Недра, 1976.-216
3. *Годовиков А.А.*, Минералогия, 2 изд., Москва, Недра, 1983, 647 с.
4. *Cadore, A.R.* R. de Oliveira, R.L.M. Lobato, V.de C. Teixeira, D.A. Nagaoka, V.T. Alvarenga, J. Ribeiro-Soares, K. Watanabe, T. Taniguchi, R.M. Paniago, A. Malachias, K. Krambrock, I.D. Barcelos, C.J.S. de Matos, Exploring the structural and optoelectronic properties of natural insulating phlogopite in van der Waals heterostructures, [2D Materials](#), **V. 9, No 3**, DOI 10.1088/2053-1583/ac6cf4.
5. *Kemp R.C.*, Orthorhombic iron centres in muscovite and phlogopite micas, 1971, J. Phys. C: Solid State Phys. V. 4, No 1, P. L11-L13.
6. *Olivier D.*, J. C. Vererine, H. Pezerat, Application de la RPE a la localisation des substitutions isomorphiques dans les micas: Localisation du Fe^{3+} dans les muscovites et les phlogopites, *JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY* 267-219 (1977) Application de la RPE a la localisation des Substitutions isomorphiques dans les micas: Localisation du Fe^{3+} dans les muscovites et les phlogopites

ПРИМЕНЕНИЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ХИРУРГИИ И ТРАВМАТОЛОГИИ

**Стрекаловская А.Д., канд. биол. наук, доцент,
Дуля Н.М., Шайнурова И.И.**

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

Аддитивные технологии подразумевают построение физических объектов или деталей методом послойного добавления материала, что отличает их от традиционных методов формирования детали, путем удаления материала из массива заготовки.

Во время реализации проектов при помощи аддитивных технологий все стадии в виде как промежуточной, так и готовой продукции, находятся в единой технологической среде, где все операции могут выполняться в цифровой CAD/CAM/CAE-системе. Фактически это может значить отказ от так называемых бумажных технологий, в то время как для изготовления деталей традиционным путем иногда требуется много бумажной чертежной документации.

Аддитивные технологии появились в конце 80-х годов прошлого столетия. Первые машины были стереолитографическими, затем появились порошковые, они были дорогими, поэтому выбор модельных материалов был крайне мал. Вследствие чего до середины 90-х годов главными направлениями, в которых применялись данные технологии, были научно-исследовательские и опытно-конструкторские. [3]

В настоящее время в промышленности аддитивный процесс послойного создания модели это несколько разных процессов, в результате которых моделируется 3D объект: UV-облучение; экструзия; струйное напыление; сплавление; ламинирование.

Сейчас аддитивные технологии применяются во многих сферах жизни. К примеру, в авиа- и ракетостроении благодаря аддитивным технологиям достигается более высокая экономичность создания, а также появляется возможность сократить вес всей конструкции летательных аппаратов без существенных потерь в показателях аэродинамических характеристик. Также применение аддитивных технологий можно встретить в: строительстве, сельскохозяйственная промышленность, машиностроение, судостроение, космонавтика, медицина и фармакология.

В условиях стремительного развития общества современную медицину сложно представить без применения аддитивных технологий. В данной статье мы рассмотрим их влияние на методы и организацию врачебного дела, взяв за основы направление хирургии.

В нейрохирургии, вертебрологии, травматологии, ортопедии, челюстно-лицевой и пластической хирургии все чаще и чаще применяются 3D-принтеры.

Количество материалов для медицинских 3D-принтеров каждый год неуклонно увеличивается, возникают материалы со всевозможными свойствами, улучшаются 3D-технологии. Поэтому более легким и недорогим становится производство индивидуальных медицинских изделий.

В 2016 г. Международными ассоциациями были одобрены 85 различных имплантатов, изготавливаемых при участии аддитивных технологий, с каждым годом их количество только растет. [1]

И тем не менее имплантаты меняют свои исходные вид и функцию, в то время как технологии из производства и внедрения беспрерывно модифицируются. В частности, все шире применяются в хирургии роботизированные системы, системы визуализации, дополнительной реальности – как для обучения и планирования операции, так и при выполнении самих операций.

На рисунке 1 показаны основные технологии 3D-печати, используемые для изготовления имплантов.



Рисунок 1 – Основные технологии 3D-печати, которые используются для изготовления имплантов

Главным достоинством аддитивных технологий для создания имплантатов является экономичность производства сложных сетчатых изделий в сравнении с традиционными методами, а также возможность сделать их меньшей массы. В дополнение к этому аддитивные технологии дают возможность создания пористой структуры на поверхности имплантата для быстрой остеоинтеграции костной ткани, а также пористую структуру- аналог реальной ткани кости- внутри имплантата.

Первым для чего стали применяться технологии 3D-печати в челюстно-лицевой и черепной хирургии стало изготовление протезов костей, которые были разрушены в результате травмы или заболевания. При использовании аддитивных технологий протезы почти не ограничиваются по форме и сложности их изготовления, и могут выпускаться как мелкие серии

стандартных протезов различных размеров, так и индивидуальные протезы для каждого отдельного пациента. Для проектирования такого протеза первичной информацией могут служить данные, полученные с томографа (КТ или МРТ). В некоторых случаях для более точной подгонки протеза берут полимерный макет, также созданный на 3D-принтере. Еще с помощью такого макета возможно разработать план операции и проверить при помощи специальных программ [5].

Количество пациентов с травмами и заболеваниями позвоночника, которым оказалось возможным осуществить лечение при помощи аддитивных технологий, неуклонно растет с каждым годом.

Аддитивные технологии нашли свое место также в процессе создания индивидуальных имплантатов, дающих возможность производить корректирующие операции на позвоночнике без использования остеотомий. Применение персональных лордозизирующих кейджей, производимых с использованием 3D-принтеров, это еще один вариант для коррекции сагиттального и фронтального баланса в позвоночнике. Общепринято, что одна из главных целей вмешательства в коррекции сагиттального баланса это восстановление сегментарного лордоза. Новые лордозизирующие кейджи дают возможность корректировки сегментарного лордоза в среднем до 20°. Помещать их могут через вентральный минимально инвазивный доступ, что позволяет производить сопоставимый объем оперативного вмешательства, как и при задних открытых методиках с использованием вертебротомий и инструментальной фиксации позвоночника [6].

В травматологии и ортопедии чаще всего аддитивные технологии используются при производстве индивидуальных экзопротезов, ортезов, дающих возможность заместить гипсовую повязку, индивидуальных стелек, хирургических шаблонов для остеотомий или резекций, высокоточных 3D-моделей для предоперационного планирования, которые в свою очередь делают возможным создание моделей операции еще на предоперационном этапе, выбор подходящих металлоконструкций, производство их персонификации.

Постоянная отработка мануальных навыков – это первостепенная задача обучения в хирургии. Ключевыми данными задачи являются в нейрохирургии, травматологии и ортопедии, потому что там необходимо не только непрерывное совершенствование и оттачивание мануальных навыков, но и постоянное закрепления знаний по нормальной и патологической анатомии, топографии и др. Оттачивание мануальных навыков дает возможность почувствовать уверенность врачу в условиях высокого стресса. В данный момент на территории Российской Федерации существует проект о непрерывном образовании медицинских и фармацевтических работников, что побуждает специалистов к участию в различных конференциях, мастер-классах, кадавер-курсах, школах и семинарах. Нередко во время данных мероприятий организуются курсы по совершенствованию мануальных навыков, где они производятся на муляжах, препаратах и 3D-моделях. Обучение на кадаверном материале является стандартом для обучения, но он дорогостоящий и требует

наличия специальных условий для проведения обучающего процесса. Поэтому использование муляжей и биомоделей, максимально приближенных к реальным, представляется крайне востребованным. 3D-принтеры позволяют создавать прототипы с высокой точностью соответствия анатомическим объектам, благодаря возможности изготавливать прототипы высокого качества. Помимо этого, они обеспечивают прецизионную симуляцию большинства характеристик костной ткани для достижения максимально реалистичных ощущений хирурга при работе с инструментарием, а также во избежание разрушения и деформации изделия при выполнении пропила [2].

В технологии послойного наплавления создаются макеты, которые могут быть использованы для отработки навыков краниотомии. Симуляционные прототипы также имеют широкое применение в спинальной нейрохирургии. Они используются для отработки доступов к телам позвонков, спинному мозгу или телам позвонков, а также при других оперативных операциях — стабилизации позвоночника, вертебропластики, стабилизации позвоночника [6]. Несомненно, 3D-принтер позволяет оттачивать навыки в хирургическом деле деформации опорнодвигательного аппарата на кадаверных материалах. Поэтому, стремительно развивающиеся современные технологии 3D-печати всё глубже внедряют в нейрохирургию и травматологию. Это обеспечивает возможность качественного изучения мануальных навыков для улучшения результатов проводимых операций [4].

Обычным стало использование 3D-печати для создания моделей органов и костей в целях обучения студентов, постановки более точного диагноза и подготовки сложных операций. Для решения этой задачи вполне подходят обычные 3D-принтеры, которые используют дешевые традиционные материалы для печати, такие как пластики PLA и ABS. Также, отпечатав точную модель органа (например - сердца) врачи изготавливают точные по форме и размеру эластичные датчики для переноса на живой орган. В итоге они устанавливаются идеально точно.

Что же будет с 3D-печатью в области медицины в обозримом будущем? Начаты разработки и сделаны первые практические шаги в трехмерной печати человеческих костей - из специального материала, который с ростом настоящей кости полностью растворяется. Таким образом, на месте протеза оказывается живая естественная ткань. Не так давно на 3D-принтере был напечатан сердечный клапан, который впоследствии был имплантирован овце. В Голландии, Китае и Словакии сделаны успешные операции по замене поврежденной части черепа пластиной, напечатанной на 3D-принтере и точно повторяющей анатомию конкретного пациента.

В результате инноваций, о которых мы говорили в этой статье, можно повысить надежность операций и снизить производственные расходы и стоимость конечных изделий. Главное - улучшить и продлить жизнь пациентов.

Для улучшения аддитивного оборудования ведется активная работа по созданию новых материалов для медицинских целей. Аддитивные технологии позволяют, например, прямо печатать изделия из керамики, а также создавать

цельные зубные протезы, включая зубы и десны, из биосовместимых материалов.

Научное направление современной медицины, с которым связывают прорыв в лечении заболеваний и патологий на ближайшие годы – трехмерная печать тканей (кровеносных сосудов) или 3D-биопринтинг. Новые технологии разрабатываются в передовых научных и медицинских центрах, также в них проводятся клинические исследования в данной области.

Результаты инновационных и биомедицинских технологий будут способствовать развитию бионического моделирования и 3D-печати тканей, что позволит сохранить здоровье миллионов людей.

Список литературы

1. Аддитивные технологии: состояние и перспективы : учебное пособие [Электронный ресурс] / Уфимск. гос. авиац. техн. ун-т. – Уфа : УГАТУ, 2022 – URL: https://www.ugatu.su/media/uploads/MainSite/Ob%20universitete/Izdateli/El_izd/2022-41.pdf
2. Применение аддитивных технологий в нейрохирургии / А. Д. Кравчук, А. Д. Маряхин, А. А. Потапов [и др.] // Аддитивные технологии: настоящее и будущее : Материалы V международной конференции, Москва, 22 марта 2019 года. – Москва: Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, 2019. – С. 253-274.
3. Фролова, А. Б. История, текущее состояние и перспективы развития аддитивных технологий / А. Б. Фролова, А. И. Шигапов // Научные известия. – 2022. – № 29. – С. 198-202.
4. Применение аддитивных технологий 3D-печати в нейрохирургии, вертебрологии, травматологии и ортопедии / А. В. Яриков, Р. О. Горбатов, А. А. Денисов [и др.] // Клиническая практика. – 2021. – Т. 12. – № 1. – С. 90-104.
5. Использование трехмерного моделирования и трехмерной печати в обучении нейрохирургов / С. В. Мишинов, В. В. Ступак, Т. З. Мамуладзе [и др.] // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – № 11-6. – С. 1063-1067.
6. Рентгенологическая оценка коррекции сегментарного и общего поясничного лордоза при применении индивидуальных лордозизирующих межтеловых имплантатов у пациентов с дегенеративным сколиозом / А. А. Денисов, Д. А. Пташников, Д. А. Михайлов [и др.] // Травматология и ортопедия России. – 2020. – Т. 26. – № 2. – С. 71-78.

ПРОСТОЙ ДЕМОНСТРАЦИОННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ НА ЛЕКЦИЯХ ПО ОБЩЕЙ ФИЗИКЕ

Узенбаев Ф.Г., канд. тех. наук, доцент

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

Важное место в структуре лекции по общей физике занимает демонстрационный эксперимент. Под демонстрационным экспериментом будем понимать эксперимент, который показывают во время лекции с целью демонстрации основных особенностей одного или нескольких физических явлений, либо с целью демонстрации тех или иных физических закономерностей. Под «простым» демонстрационным экспериментом будем понимать опыты, которые можно выполнить и продемонстрировать без специальных установок, используя «подручные» быденные средства и без подготовленного персонала, т.е. самостоятельно. Такой эксперимент может с успехом применяться и при других формах проведения занятий – во время семинаров, докладов, презентаций и т.д.

Демонстрационные эксперименты традиционно делятся на два типа – натурные и модельные. Натурные эксперименты, в свою очередь, делятся на качественные и количественные. Говоря про модельные эксперименты, обычные особо выделяют из них модельные компьютерные эксперименты. Под натурным экспериментом понимают такой опыт, в ходе которого наблюдаются реальные физические явления или физические закономерности. При постановке такого эксперимента используются реальные предметы, физические объекты.

Натурные качественные эксперименты – эксперименты, в ходе которых демонстрируется наличие какого-либо физического явления или какой-либо физической закономерности.

Примером натурального качественного эксперимента, который демонстрирует наличие физического явления, может служить опыт, демонстрирующий плавание стальной иглки на поверхности воды в следствии действия силы поверхностного натяжения жидкости. Отметим, что этот эксперимент никаких закономерностей данного явления не демонстрирует (например, остается открытым вопрос, зависит ли плавание иглки от температуры жидкости). Возникающие вопросы можно рекомендовать студентам исследовать самостоятельно, в качестве исследовательской работы.

Простые демонстрационные эксперименты обладают ценным учебным качеством, а именно наглядностью и убедительностью, и могут быть выполнены как бы экспромтом. Простые эксперименты обладают воспроизводимостью самими студентами, тем самым стимулируют интерес к физическим явлениям природы.

Простой демонстрационный эксперимент удовлетворяет основным требованиям дидактики [1].

Научность—ознакомление студентов с объективными (воспроизводимыми) научными фактами, понятиями, закономерностями, методами научного познания.

Достоверность – моделирование конкретных объектов и явлений природы, однозначность и истинность результатов опыта.

Доступность – информация, извлекаемая из демонстрационного опыта, и её усвоения должны базироваться на имеющихся или полученном студентами знаниях и соответствовать возможностям их понимания.

Наглядность – видимость для каждого учащегося воспроизводимого явления, убедительность и надежность опыта.

Связь обучения с жизнью – раскрытие связей между явлениями природы, явлениями и человеком, природой и техникой, техникой и человеком.

Систематичность и последовательность обучения – построение системы опытов, раскрывающие вопросы изучаемой темы.

Сознательность и последовательность обучения – студенты должны понимать принцип действия, используемых средств при выполнении опыта, постановку вопросов, побуждающих осмысливать суть демонстрируемых опытов.

Сочетание различных методов и форм обучения – разные виды учебного физического эксперимента (демонстрационный, лабораторный, практикум, домашнее экспериментальное задание) должны развивать и дополнять друг друга.

В качестве примера приведём перечень некоторых простых демонстрационных опытов, которые автор демонстрирует на своих лекциях и, которые повышают наглядность изложения материала и подтверждают теоретические положения и выводы.

1. Кинематика. Поступательное и вращательное движение на плоскости. Лист бумаги (картона и т.п.) формата А4 перемещаем в плоскости доски в соответствии с определением поступательного движения, а затем на контрасте иллюстрируем вращательное движение на плоскости этой доски.

2. Инертность физических тел. Книгу или какой-либо предмет помещаем на лист бумаги (достаточно плотной) и сначала плавно перемещаем вместе по столу. Затем из положения покоя резко выдергиваем лист бумаги, при этом книга (другой предмет) остаётся на месте.

3. Центр массы физических тел или системы тел. Можно сочетать два простых опыта. Первый: это определение центра масс однородной линейки (стержня и т.п.) путём помещения линейки на рёбра ладоней и перемещения ладоней навстречу друг другу до установления центра массы линейки, который будет в геометрическом центре в теле линейки. Повторим опыт, но на один из концов линейки поместим ластик, и отмечаем очевидное различие. Второй опыт требует предварительной тренировки, но он важный, так как показывает, что центр масс может находиться вне тела или системы тел. Для этого можно взять перочинный ножик, карандаш и установить равновесное положение,

воткнув ножик в карандаш и опереть остриё грифеля карандаша на какую-либо опору (стол, палец руки и т.п.).

4. Сила трения покоя. Важное понятие, но, обычно, студенты не понимают, как она действует, в чём проявляется. Для демонстрации наличие силы трения покоя сухих поверхностей и её свойства необходимо на плоскую сухую поверхность, например, книги в твердом переплете или, что-то подобное поместить калькулятор, или другой плоский небольшой предмет. Перед предметом с одного края положить круглый (не ребристый) карандаш (ручку). Начинаем плавно, не спеша поднимать второй край книги (плоскости) и наблюдать за изменением состояния тел. Карандаш почти сразу при небольшом наклоне скатывается, а плоский предмет остается в покое до достижения определенного достаточно большого угла наклона плоскости.

5. Следствие из уравнения Бернулли для движения идеальных жидкостей и газов. Два листа бумаги формата А4 сначала держим на расстоянии 20-30 сантиметров друг от друга и дуем на них. Затем держим их вертикально за верхние края и помещаем на расстояние 5 сантиметров друг от друга и дуем между ними. Листы притянутся друг к другу, т.к. давление между ними станет меньше, чем атмосферное давление с внешней стороны листов.

6. Поверхностное натяжение жидкостей. Иголочка плавает на поверхности воды. В стакан наливаем воды почти до края. С помощью вилки аккуратно помещаем иголочку на поверхность воды так, чтобы она не утонула (нужна тренировка). Будет видно, что поверхность воды слегка прогнулась под тяжестью иголочки, но удерживает её.

7. Электростатика. Электризация предметов трением и электрическим индуцированием. Пластмассовой расчёской можно причесать сухой волос на голове и поднести её к небольшим кусочкам бумаги и тонкой фольги, которые притянутся к ней. Если нейтрализовать заряженную трением расчёску и вновь поднести к листочкам бумаги и фольги, то они останутся в покое. Мы покажем, таким образом, два типа электризации физических тел: трением и индуцированием.

Каждый из рассмотренных простых опытов допускает различные вариации, которые могут быть предложены студентам для самостоятельных исследований и объяснений. Например, можно предложить провести опыты с металлической (т.е. электропроводящей) расчёской, объяснить поведение кусочков фольги и бумаги.

Можно после опытов сделать жизненно важные выводы и комментарии. Например, почему нельзя стоять близко к проходящему поезду или на обочине дороги. Как следует из опыта №5 при неосторожности может «притянуть» к быстро и близко идущему транспорту.

Простой демонстрационный эксперимент на лекции по физике не требует сложного оборудования, может быть выполнен как бы экспромтом, имеет эффект неожиданности и привлекает внимание учащихся, но при этом имеет высокую степень доступности для понимания, научной достоверности, формировании наблюдательности и навыков научного мышления.

Следовательно, простой демонстрационный физический эксперимент может иметь важное и неотъемлемое место в методологии учебного преподавания и познания законов природы в курсе физики.

Список литературы

1. Шилов, В.Ф. Физический эксперимент по курсу «Физика и астрономия» // М.: Просвещение, – 2000. –142 с.

ГИСТЕРЕЗЕСНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК СПЛАВОВ РЗМ И ЖЕЛЕЗА С ВЫСОКОЙ МАГНИТОСТРИКЦИЕЙ

Манаков Н.А., д-р физ.-мат.наук, профессор, Цветкова Е.В.
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»

Для анализа гистерезисных свойств были выбраны пленки составов, представляющих наибольший практический интерес и соответствующих наиболее изученным интерметаллическим соединениям RFe_2 , где R – Sm, Tb, Dy, Er, $Tb_{0,3}Dy_{0,7}$. Рассматривались образцы разной степени дисперсности микроструктуры, включая аморфные пленки [1,2].

Пленки были полученные термическим испарением в вакууме, методом «вспышки» на стеклянные, ситалловые, слюдяные и алюминиевые подложки. Метод получения и микроструктура этих пленок достаточно подробно рассмотрены в работах [2,3].

Гистерезисные свойства пленок RFe_2 , могут быть обусловлены высокой магнитострикцией и магнитокристаллической анизотропией, внутренними напряжениями, также анизотропной (столбчатой) микроструктурой. Формирование внутренних микронапряжений связано со столбчатой микроструктурой и с разными коэффициентами термического расширения материала подложки и пленки. Столбчатая микроструктура приводит к сжимающим в плоскости образца структурным напряжениям σ_c , а подложки в зависимости от материала создают растягивающие или сжимающие термоупругие напряжения σ_T . Для выявления доминирующего вклада в коэрцитивную силу H_c пленок был проведен корреляционный анализ на основе статистической обработки экспериментальных результатов [3,4]. Соотношение искалось в виде:

$$H_c \sim a |\lambda_s|/M_s + b H_a + c M_s,$$

где a, b, c – численные коэффициенты. Анализ проводился в зависимости от редкоземельного компонента, температуры и материала подложки (стекло, ситалл, слюда, алюминий). Последний член соотношения был незначителен и им можно было пренебречь. То есть приближенное выражение для H_c пленок RFe_2 можно было представить в виде:

$$H_c \approx a |\lambda_s|/M_s + b H_a, \quad (1)$$

где $b \approx 0,01$. Коэффициент «а» для удовлетворительного количественного описания H_c необходимо изменять в зависимости от внутренних напряжений. Его можно представить в виде:

$$a = a_1 |\sigma_c|/3 + a_2 |\sigma_T|/3,$$

где постоянные a_1 и a_2 приближенно равны 0 или 0,05 в зависимости от знака внутренних напряжений и магнитострикции соединения RFe_2 . Для случая перемангничивания в плоскости пленки H_{cII} :

$$\begin{aligned} a_1 &\approx 0,05 \text{ при } \sigma_T \cdot \lambda_s > 0 \text{ и } a_1 \approx 0 \text{ при } \sigma_T \cdot \lambda_s < 0 \\ a_2 &\approx 0 \text{ при } \lambda_s > 0 \text{ и } a_2 \approx 0,05 \text{ при } \lambda_s < 0. \end{aligned}$$

Для случая перемагничивания нормально плоскости пленки $H_{c\perp}$:

$$a_1 \approx 0 \text{ при } \sigma_T \cdot \lambda_s > 0 \text{ и } a_1 \approx 0,05 \text{ при } \sigma_T \cdot \lambda_s < 0$$

$$a_2 \approx 0,05 \text{ при } \lambda_s > 0 \text{ и } a_2 \approx 0 \text{ при } \lambda_s < 0.$$

В зависимости от знаков λ_s и σ_T , термические напряжения будут давать вклад в $H_{c\parallel}$ или в $H_{c\perp}$.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что основной вклад в гистерезис пленок RFe_2 вносят магнитострикционные напряжения и магнитокристаллическая анизотропия.

В таблице 1 приведены характерные параметры гистерезиса нанокристаллических пленок $TbFe_2$ с разным типом наведенной напряженности макроскопической магнитной анизотропии: «легкая плоскость» ($\varphi = 0$), «конус осей легкого намагничивания» ($\varphi = 45^\circ$), «перпендикулярная легкая ось» ($\varphi = 90^\circ$). Перемагничивание осуществлялось в плоскости и нормально плоскости образцов.

Таблица 1 – Начальная восприимчивость χ , коэрцитивная сила H_c , и относительная остаточная намагниченность нанокристаллических пленок $TbFe_2$

$\varphi,^\circ$	Перемагничивание в плоскости			Перемагничивание нормально в плоскости		
	χ	H_c , кА/м	M_r/M_s	χ	H_c , кА/м	M_r/M_s
0	0,79	264	0,85	0,63	320	0,40
45	0,87	256	0,65	0,32	408	0,70
90	0,95	208	0,35	0,24	440	0,90

Наиболее высокие значения коэрцитивной силы при перемагничивании нормально плоскости были получены у пленок $TbFe_2$ на алюминиевой подложке (до 1400 кА/м), а при перемагничивании в плоскости – у пленок на стеклянной подложке (до 985 кА/м).

Перемагничивания пленок RFe_2 с магнитной анизотропией типа легкая плоскость и конус осей легкого намагничивания, как правило, осуществляется неоднородным вращением намагниченности. Рост же аксиальной магнитной анизотропии способствует переходу к механизму перемагничивания нормально плоскости смещением доменных границ как аморфных, так и нанокристаллических пленок.

Следует отметить, что у аморфных пленок $Tb_{33}Fe_{67}$ наблюдаются достаточно высокие значения коэрцитивной силы при комнатной температуре, более чем на порядок превышающие H_c объемного аморфного сплава того же состава. Это как раз свидетельствует о роли внутренних напряжений в формировании магнитного гистерезиса пленочных образцов с высокой магнитострикцией. Влияние макроскопической магнитной анизотропии на основной механизм перемагничивания пленок RFe_2 отражено в таблице 2.

Таблица 2 – Макроскопическая магнитная анизотропия и основной механизм перемангничивания пленок RFe_2

Группа сплава	Аксиальная магнитная анизотропия	Конус осей легкого намагничивания
1. Аморфные	Смещение доменных границ	Вращение намагниченности
2. Нанокристаллические	Смещение доменных границ	Вращение намагниченности
3. Субмикрокристаллические	Смещение доменных границ	Вращение намагниченности
4. Микрокристаллические	Зародышеобразование обратных доменов	Зародышеобразование обратных доменов

Макроскопическая магнитная анизотропия, обусловленная напряжениями, способствует образованию достаточно крупных доменов и ослабляет влияние термических флуктуаций на процесс перемангничивания. Подбирая материал подложки и её температуру при осаждении пленки, можно в широких пределах изменять уровень структурных и термических напряжений, то есть изменять коэрцитивную силу пленок. Таким образом, были получены аморфные пленки $Tb_{33}Fe_{67}$ с перпендикулярной магнитной анизотропией и коэрцитивной силой $H_{c\perp}$ до 0,8 МА/м.

Список литературы

1. Манаков Н.А., Вакуленко В.Б. Дисперсность микроструктуры и гистерезисные свойства сплавов высокоанизотропных редкоземельных магнетиков // ФММ. – 1997. – Т. 84, вып. 1. – С. 52-54.
2. Магнитные свойства дисперсных сплавов редкоземельных металлов с железом типа фаз Лавеса: монография / Н.А. Манаков: Иркутский гос. ун-т, Иркутск, 1991, 96 с.
3. Особенности процесса перемангничивания нанокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков / Н.А. Манаков, М.В. Плетнева, А.А. Чакак; ГОУ «Оренбургский госуниверситет» - Оренбург, 2008. 5 с. ил. – Библиогр.. 7 назв. – Рус. Деп. В ВИНТИ 24.10.08, № 815-B2008.
4. Манаков, Н.А. Численное моделирование магнитных структур одноосных ферромагнетиков [Электронный ресурс]: монография / Н.А. Манаков, Ю.В. Толстобров, А.М. Еремин, В.В. Гуньков; М-во науки и высш. образования Рос. Федерации, Федер. гос. бюджет. образоват. учреждение высш. образования "Оренбург. гос. ун-т". - Оренбург: ОГУ. - 2019. - ISBN 978-5-7410-2403-4. - 152 с- Загл. с тит. экрана.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ НУЛЕВОГО ЗАРЯДА ЮЖНОУРАЛЬСКОГО ПОЛИМИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ МЕТОДОМ ВЕСОВОГО ТИТРОВАНИЯ

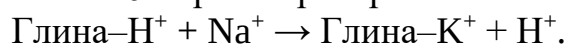
Кушнарера О.П., Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Четверикова Д.К.,

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

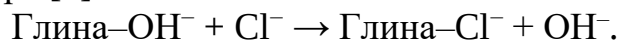
Изоэлектрическая точка или точка нулевого заряда (ТНЗ) $pH_{ТНЗ}$ – это значение pH , при котором общий чистый заряд поверхности частицы равен нулю. Значение pH точки нулевого заряда является очень важной электрохимической характеристикой минералов. Если значение pH окружающего раствора будет превышать $pH_{ТНЗ}$, то минерал будет способен к поглощению в основном катионов. Если значение pH раствора ниже $pH_{ТНЗ}$, минерал поглощает преимущественно анионы. Наличие в составе твердой фазы вещества минералов с разными значениями $pH_{ТНЗ}$ существенно влияет на процессы поглощения и десорбции химических элементов, присутствующих в керамической массе в катионной и анионной формах [1].

Цель работы – определение точки нулевого заряда Южноуральского полиминерального сырья, которое содержит около 55 % кремнезёма, 20 % глинистых минералов (каолинит, хлорит, микроклин и мусковит) и 25 % других природных минералов (кальцит, корунд и магнетит).

Традиционным способом для определения $pH_{ТНЗ}$ является метод весового титрования. Суть метода – измерение величины предельного значения pH при увеличении весовых фракций минерального сырья [2, 3]. Катионный обмен проводили в суспензиях на основе растворов хлорида натрия, в которых протекает процесс обмена Na^+ из раствора на протон на глинистых минералах [4]:



При pH среды $< pH_{ТНЗ}$ наблюдается перезарядка поверхности глинистых минералов, и они вступают в реакцию не катионного, а анионного обмена. В данном случае происходит обмен группы гидроксида на глинистых минералах с анионом хлора в растворе [4]:



Известно, что процесс ионного обмена на природных алюмосиликатах является термодинамически обратимым. При изучении ионообмена на поверхности глинистых минералов важным является время до наступления равновесия процесса τ_p . Значения τ_p для обмена различных катионов на разных типах глинистых минералов оказываются неодинаковыми. В данном случае ионный обмен изучали методом потенциометрического титрования, а время установления τ_p выбрали 10 минут в соответствии с работой [5].

Таким образом, методика эксперимента заключалась в следующем. В стакан вместимостью 100 мл налили 50 мл раствора хлорида натрия с требуемой

ионной силой ($I = 0,1M$). Измерили pH исходного раствора; добавляя необходимые объемы буферных растворов (гидроксида натрия и соляной кислоты), достигли показателей pH 4.2, 7 и 9.2. В каждый стакан со своим исходным pH помещали навеску глины (по 0,5 г) и записывали pH полученных суспензий. Затем прибавляли следующую порцию минерала (0,5 г), и заново измеряли pH суспензий. Этот процесс повторялся до тех пор, пока показатель кислотности не переставал меняться при прибавлении новой порции минерального сырья. Значения $ТНЗ$ определяли графически, путём нахождения точек пересечения зависимостей $pH=f(m)$, полученных методом потенциометрического титрования. Это значение $pH_{ТНЗ}$ соответствовало точке нулевого заряда, при котором адсорбция протона стала равной нулю.

На рисунке представлены зависимости, полученные при весовом титровании суспензий. Три кривые отражают изменения значений pH суспензий для pH исходных растворов 4.2, 7 и 9.2, соответственно. В зависимости от pH среды возможны различные процессы диссоциации. Так, при $pH < 7$ (в нашем случае 4.2) усиливалась диссоциация групп $=Al-OH$ и $=Fe-OH$, что сопровождалось ростом плотности положительного заряда, а при $pH > 7$ (здесь 9.2) диссоцииро

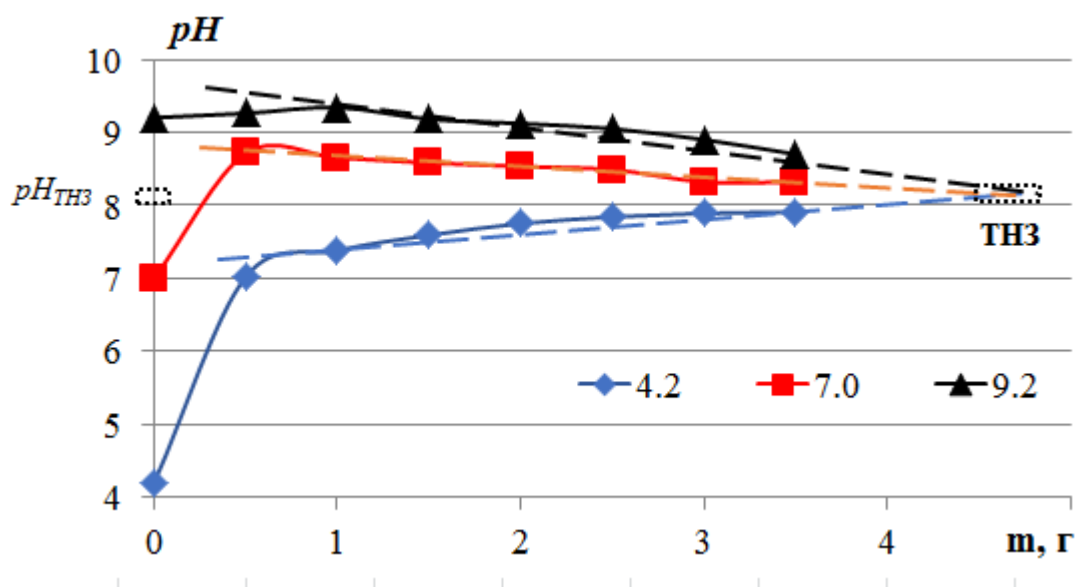


Рисунок – Потенциометрические титрования полиминеральной глины

В суспензиях силикатов возможны различные типы коагуляционных структур: ребро-ребро частицы, плоскость-плоскость и ребро-плоскость. При pH среды $< pH_{ТНЗ}$, когда ребра минералов заряжены положительно, а базальные плоскости отрицательно, возникает электростатическое притяжение между частицами с образованием структура по типу ребро-плоскость и высоким пределом текучести. Вблизи $ТНЗ$ базальные плоскости несут отрицательный заряд, и возникают структуры типа ребро-ребро. При переходе к щелочным средам отрицательно заряженные боковые грани и базальные плоскости отталкиваются, и преобладают структуры типа плоскость-плоскость. Так как степень накопления протона на поверхности глин всегда значительна при низких ионных силах,

то в результате часто формируется серия параллельных кривых. Причем, этот эффект особенно присущ монтмориллониту и содержащему его в значительных количествах минеральному сырью [7]. В данном случае кривые также слабо сходились, и ТНЗ определили в результате экстраполяции данных. Таким образом установили, что искомое значение $pH_{ТНЗ}$ лежит в диапазоне от 8.05 до 8.15. Ранее в работе [8] для изучения возможности использования глинистых минералов Оренбургской области в качестве сорбентов для очистки воды от нефтяных загрязнений были проведены исследования поверхностных зарядов частиц глинистых минералов при вариации внешних и внутренних условий. В качестве исследуемых образцов были взяты монтмориллонит содержащая глина и полиминеральная глина с высоким содержанием оксидов железа. Оказалось, что значение ТНЗ Южноуральского полиминерального сырья близко по величине ТНЗ полиминеральной глины.

В целом, полученные данные подтверждают представления об определяющей роли двойного электрического слоя и точки нулевого заряда в устойчивости глинистых суспензий, особенно в области значений pH от 8 до 10 [6].

Список литературы

1. Определение точки нулевого заряда бентонитовой глины зырянского месторождения методом весового титрования / Л. В. Мосталыгина, А. Г. Мосталыгин, А. В. Костин [и др.] // Вестник Курганского государственного университета. Серия: Естественные науки. – 2012. – № 3(25). – С. 107-110.
2. Avena M, De Hauli C.P. // J. Colloid Interface Sci.1998. V. 202.–P.195.
3. Nov S.J., Schwartz A. J. // J. Colloid Interface Sci.1989.V. 130.– P.157.
4. Яковлева, А. А. Ионный обмен на глинистых минералах некоторых месторождений Иркутской области / А. А. Яковлева, Во Дай Ту // Журнал прикладной химии. – 2012. – Т. 85. – № 3. – С. 371-374.
5. Каныгина, О. Н. О возможностях очистки воды от нефтяных загрязнений путем вариации поверхностных зарядов частиц глинистых минералов / О. Н. Каныгина, О. П. Кушнарева // Проблемы экологии Южного Урала : сборник материалов X Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, посвященной 25-летию кафедры биологии и почвоведения, Оренбург, 20–21 октября 2021 года. – Оренбург: Оренбургский государственный университет, 2021. – С. 128-133.
6. Ковзун, И. Г. Роль химических и физико-химических процессов при получении и формировании свойств щелочных силикатных суспензий / И. Г. Ковзун, И. Т. Проценко, Н. В. Перцов // Коллоидный журнал. – 2001. – Т. 63. – № 2. – С. 214-219.
7. Гаськова, О. Л. Полуэмпирическая модель описания сорбционных равновесий на поверхности глинистых минералов / О. Л. Гаськова // Геохимия. – 2009. – № 6. – С. 647-659.
8. Поверхностные заряды в природных глинах Оренбуржья / О. Н. Каныгина, О. П. Кушнарева, Е. В. Сальникова, А. А. Юдин // Стекло и керамика. – 2022. – Т. 95. – № 12(1140). – С. 41-49. – DOI 10.14489/glc.2022.12.pp.041-049.

К ВОПРОСУ О СРАВНЕНИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО И ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ИК-СПЕКТРОВ КАОЛИНИТА

Четверикова А.Г., канд. физ.-мат. наук, доцент

Макаров В.Н., канд. физ.-мат. наук

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

К природным химическим соединениям относится чрезвычайно широкий класс минеральных объектов. Уместно вспомнить, что земная кора более, чем на 3/4 состоит из силикатных пород, в меньшей степени – из диоксида кремния (SiO_2 – кварца) и многообразия остальных минералов. К классу алюмосиликатов принадлежат минералы со слоистыми, ленточными, каркасными, волокнистыми, игольчатыми, островными, цепочечными и др. кристаллическими структурами. Все эти природные соединения, с высокой степенью дисперсности, применяются в качестве основного компонента – тонкодисперсного порошка и модифицирующих добавок для получения продуктов с заданными техническими характеристиками [1]. Развивается применение наноразмерных керамических материалов в качестве сорбентов [2], материалов с особыми электрическими [3] или теплофизическими [4] свойствами.

Повышенный интерес к изучению филлосиликатов стимулировал развитие моделирования поведения этих объектов. Известно достаточное количество научных данных, указывающих на то, что свойства филлосиликатов в реальных породах различного генезиса могут существенно отличаться от свойств эталонных вариантов этих минералов [5].

В течение длительного периода времени развитие кристаллохимии силикатов было связано преимущественно с успехами рентгеноструктурного анализа. Несмотря на большие познавательные возможности этого метода, его применение ограничивается значительной трудоёмкостью [6], а заключения о природе химической связей, основанные лишь на данных о пространственном расположении атомов в решётке, не всегда однозначны. Поэтому, за последние годы резко возрос интерес к колебательным спектрам силикатов [7, 8].

Образцы каолинитовой глины Оренбургской области были достаточно подробно описаны в работах [9-13] в которых использовали методы морфологии, дериватографии, дифрактометрии и вейвлет-анализа. Экспериментальные исследования выполнены с помощью ИК-Фурье спектрометра ИнфраЛюм ФТ-08 производства Люмэкс (Российская Федерация) с оптической системой из бромата калия. Спектрометр оборудован приставкой нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) с кристаллом селенида цинка. Измерения проводили в режиме накопления в течение 120 секунд. Спектральный диапазон составлял от 525 до 8000 см^{-1} с шагом 4 см^{-1} . Перед каждым измерением образцов проводили оценку фонового спектра приставки. Затем на поверхность кристалла помещали порошковую пробу под высоким давлением. После каждого сня-

тия спектра образца кристалл ZnSe очищали смоченной в ацетоне ватой. Для интерпретации полученных экспериментальных данных выполнено сравнение с теоретическим [14] спектром идеального каолинита (рис. 1).

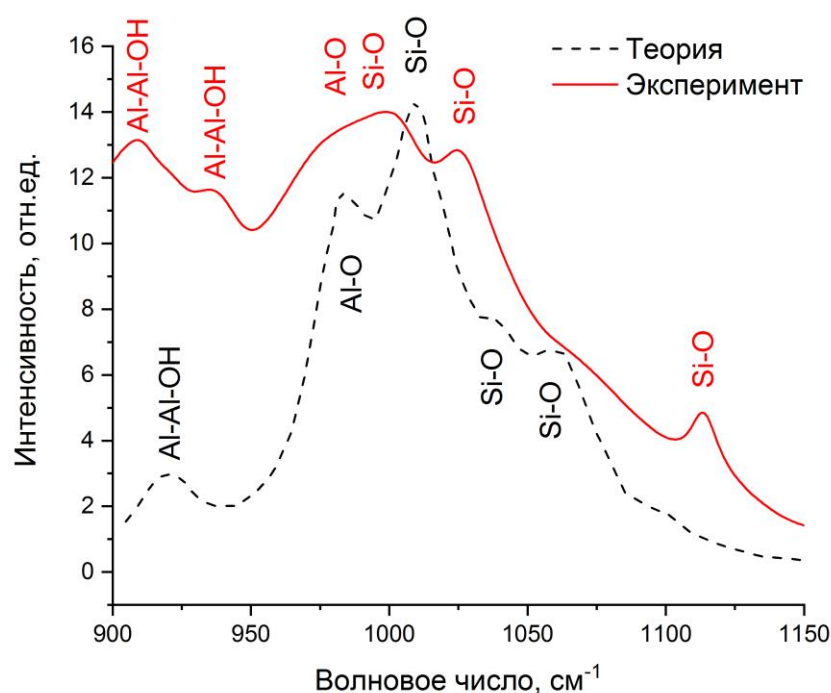


Рисунок 1 - Сопоставление экспериментального и теоретического [14] ИК-спектров каолинита

На рисунке 1 выбрана область, где сравнение теоретического и экспериментального ИК-спектра каолинита не будет искажаться незначительным наличием других фаз в каолиновой глине. Идеальный каолинит имеет структурную формулу $\text{Al}_4\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_8$ [15], триклинную элементарную ячейку (рис. 2). Структурная формула каолинита одного из месторождений Оренбургской области имеет вид [16]:



Одним явным отличием теоретических и экспериментальных ИК-спектров является смещением мод относительно волнового числа и разница интенсивностей. Это обусловлено, во-первых, погрешностью расчетов, связанных с влиянием температуры на поведение ионов в элементарной ячейке образца и, во-вторых, низкой степенью кристалличности каолинита, используемого в эксперименте.

Деформационные колебания ОН-группалюмоокислородных октаэдров каолинита должны проявляться в области от 900 см^{-1} до 960 см^{-1} , и на экспериментальном спектре наблюдаются два пика (909 и 935 см^{-1}) [17], указывающих на более сложный вид деформационных колебаний. На теоретической кривой можно явно выделить пики, отвечающие за валентные колебания атомной груп-

пы силикатной поверхности (Si-O, 1009 см^{-1})кислородных тетраэдров алюмоокислородных октаэдров (Al-O, 983 см^{-1})каолинита [14]. Однако, реальный каолинит характеризуется, как видно из формулы (1), обильными изоморфными замещениями в минерале. Эта особенность обеспечила наложение приведенных пиков и уменьшению их интенсивности, преобразовавшись в широкую асимметричную линию в диапазоне от 974 см^{-1} до 1015 см^{-1} . Кроме того, на экспериментальном ИК-спектре наблюдаются два пика, вероятно, относящихся к деформационным колебаниям решетки Si-O (1025 и 1113 см^{-1}). [18] Можно заметить, что на теоретическом спектре величина их интенсивности должна быть крайне незначительна.

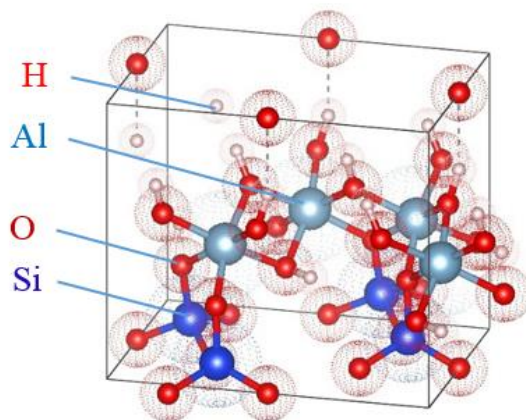


Рисунок 2 - Элементарная ячейка каолинита без изоморфных замещений

В результате проведённой работы был проанализирован экспериментальный и теоретический ИК-спектры каолинита, выявлены их основные сходства и отличия.

Список литературы

1. Гревцев В.А., Лыгина Т.З. Морфологические и структурные особенности природных, активированных и синтезированных веществ // Вестник Казанского технологического университета. – 2010. – №. 8. – С. 236-249.
2. Alpysbaeva G. et al. Microwave activation of phyllosilicate adsorption on kaolin clays // Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials. – 2021. – Р. 66-69.
3. Филяк, М.М. Диэлектрические свойства тонкодисперсных каолинитовых масс различной степени влажности / М.М. Филяк, А.Г. Четверикова, О.Н. Каныгина // Стекло и керамика. – 2021. – № 11. – С. 43-50.
4. Четверикова А.Г., Каныгина О.Н. Удельная теплоемкость системы «глинистый материал-вода» при умеренных температурах // Наука и образование: фундаментальные основы, технологии, инновации. – 2015. – С. 216-221.
5. Явна В. А. и др. Изучение ИК спектров полиминеральной природной ассоциации минералов класса филлосиликатов //Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118. – №. 4. – С. 558-565. – DOI 10.7868/S0030403415040224.
6. Каныгина О. Н., Четверикова А. Г., Каретников А. В. Использование информационных технологий для решения специальных задач методами рент-

географии // Современные информационные технологии в науке, образовании и практике. – 2008. – С. 226-230.

7. Музаева А. М., Муксумова З. С. ИК-спектры и дериватограммы глины месторождения Октябрьское // Наука и новые технологии. – 2014. – №. 4. – С. 156-159.

8. Stack K. M., Milliken R. E. Modeling near-infrared reflectance spectra of clay and sulfate mixtures and implications for Mars // Icarus. – 2015. – Т. 250. – Р. 332-356.

9. Четверикова, А. Г. Морфометрический анализ частиц филлосиликатов / А. Г. Четверикова // Физическое материаловедение. Актуальные проблемы прочности. – 2021. – С. 47-48.

10. Четверикова А.Г., Каныгина О.Н., Филяк М.М. Структурные трансформации в оксидах, составляющих природные глины, под воздействием СВЧ-поля – монография, ОГУ, 2021 – 204 с.

11. Филяк, М. М. Вейвлет-интерпретация мезоструктуры коалинитовых масс различной влажности / М. М. Филяк, А. Г. Четверикова, О. Н. Каныгина // Физика и технологии перспективных материалов. – 2021. – С. 182.

12. Макаров, В. Н. Особенности использования дериватографа «Thermoscan-2» для исследования структурных превращений в глинистых минералах / В. Н. Макаров, М. М. Серегин // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. – 2022. – С. 2893-2897.

13. Makarov V. N., Kanygina O. N. Features of structural transformations in montmorillonite and kaolinite in a microwave field // Chemical Physics of Molecules and Polyfunctional Materials. – 2021. – Р. 130-132.

14. Каспржицкий А. С. и др. Исследование структурных и спектральных характеристик свободной и связанной воды в каолините // Оптика и спектроскопия. – 2016. – Т. 121. – №. 3. – С. 387-394.

15. Осипов В.И. Глины и их свойства. Состав, строение и формирование свойств / В. И. Осипов, В. Н. Соколов // М.: Геос, 2013. - 576 С.

16. Четверикова А. Г., Четверикова Д. К. Трансдукция методов кристаллохимии в физику материалов // Университетский комплекс как региональный центр образования, науки и культуры. – 2022. – С. 2939-2942.

17. Tironi A. et al. Thermal treatment of kaolin: effect on the pozzolanic activity // Procedia Materials Science. – 2012. – Т. 1. – Р. 343-350.

18. Khang V. C., Korovkin M. V., Ananyeva L. G. Identification of clay minerals in reservoir rocks by FTIR spectroscopy // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. – IOP Publishing, 2016. – Т. 43. – №. 1. – Р. 012004.

ТУШЕНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ ПЛАЗМОННЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ В ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ

**Мушин Ф.Ю., Русинов А.П., канд. физ.-мат. наук, доцент,
Кучеренко М.Г., д-р физ.-мат. наук, профессор,
Чмерева Т.М., д-р физ.-мат. наук, доцент
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Оренбургский государственный университет»**

Влияние плазмонных наночастиц (НЧ) на оптические свойства органических молекул активно исследуется в последнее десятилетие различными научными коллективами, как в России, так и за рубежом. Это связано с тем, что на особенностях оптического отклика органических молекул в присутствии плазмонных НЧ могут базироваться принципы работы оптоэлектронных устройствах нового поколения. Как известно, в металлических НЧ возможно резонансное возбуждение локализованных поверхностных плазмонов, что приводит к концентрации энергии электромагнитного поля вблизи границы раздела между благородным металлом и окружающей средой. Это, в свою очередь, оказывает воздействие на излучательные и безызлучательные переходы в молекулах, расположенных в непосредственной близости от поверхности металлической НЧ. Например, время жизни возбужденного состояния молекулы сокращается, и может наблюдаться как разгорание, так и затухание люминесценции [1].

В большинстве экспериментальных работ наблюдается влияние плазмонных НЧ на разрешенные дипольные переходы в молекулах органических красителей. О влиянии плазмонных НЧ на формирование триплетных состояний и на фосфоресценцию органических молекул сообщается гораздо реже, хотя увеличение квантового выхода фосфоресценции является актуальной задачей повышения чувствительности люминесцентного анализа. В работе [2] изучено влияние островковой пленки серебра на флуоресценцию, замедленную флуоресценцию и фосфоресценцию пленки эозина, полученной с использованием технологии Ленгмюра-Блоджетт. Авторами работы показано, что максимальное усиление всех типов люминесценции наблюдается при удалении красителя на 6-8 нм от поверхности серебряной пленки. Сокращение времени жизни триплетного состояния метиленового голубого в присутствии золотых НЧ наблюдалось в работе [3]. В работе [4] показано, что в присутствии агрегатов золотых НЧ до десяти раз увеличивается выход молекул бенгальского розового в триплетное состояние. Новый тип трехуровневого спазера, использующего триплетные состояния молекул, предложен в работе [5].

В данной работе экспериментально обнаружено влияние плазмонных НЧ на спектры люминесценции и кинетику затухания сигналов фосфоресценции молекул органического красителя. Предложена математическая модель, объясняющая наблюдаемые в эксперименте эффекты тушения люминесценции и сокращения времени жизни триплетных состояний молекул в присутствии НЧ.

Объектом исследования являлись полимерные пленки поливинилового спирта (ПВС), сенсibilизированные молекулами органического красителя (эритрозин), в которые были внедрены НЧ золота (серебра). Выбор красителя обусловлен его высоким квантовым выходом в триплетное состояние (~95%), полимерная пленка ПВС является непроницаемой для молекул кислорода, вследствие чего исключается O₂-тушение триплетных состояний и кинетика затухания сигналов флуоресценции эритрозина разворачивается в диапазоне сотен микросекунд.

Наночастицы золота и серебра были синтезированы по методу цитратного восстановления Туркевича-Френса. В качестве восстановителя и стабилизатора поверхности металла использовался цитрат натрия с концентрацией 80 мМ, а источником атомов золота служил тетрахлораурат водорода (в параллельной методике синтеза источником атомов серебра выступал AgNO₃) концентрацией 50 мМ. Как показано в [6] данная методика позволяет получать НЧ с довольно узким распределением по размерам и средним радиусом порядка 20 нм. Плазмонный пик поглощения НЧ серебра лежит в области 430 нм, золота – 520 нм.

Пленки готовились методом полива 2 мл базового раствора на стеклянную подложку с последующим высушиванием при комнатной температуре в течение 48 часов. Базовый раствор для каждого образца получался смешиванием растворов полимера (А), красителя (Б) и наночастиц Ag (В) или Au (Г). Пропорции смешивания растворов приведены в таблице 1, концентрации полимера и красителя во всех образцах одинаковы, варьируется только содержание в наночастиц в пленках.

Таблица 1 - Объемное содержание компонентов в базовом растворе различных образцов

Раствор	Обр.1	Обр.2	Обр.3	Обр.4	Обр.5
А) ПВС, $c = 4\%$ (по массе)	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл
Б) Эритрозин, $C = 10^{-5}$ М	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл	0.5 мл
В) НЧ Ag, $C = 6 \cdot 10^{-9}$ М	-	0.5 мл	1 мл	-	-
Г) НЧ Au, $C = 6 \cdot 10^{-9}$ М	-	-	-	0.5 мл	1 мл
Деионизированная вода	1 мл	0.5 мл	-	0.5 мл	-

После высушивания объем полимерной пленки уменьшался, что приводило к увеличению концентрации красителя ~ в 20 раз и увеличению концентрации наночастиц (в 20 раз для образцов 2 и 4 и в 40 раз для образцов 3 и 5).

Для регистрации спектров люминесценции и кинетики затухания сигналов флуоресценции образцов использовались спектрофлуорометрическая (рис. 1а) и спектрохронографическая (рис. 1б) установки центра лазерной и информационной биофизики ОГУ. В установке, представленной на рис. 1а, в качестве источника возбуждения молекул красителя использовался твердотельный неодимовый лазер с диодной накачкой работающий на длине волны второй гармоники – 532 нм, а в качестве регистрирующего устройства CCD спектро-

метр ВІМ-6002. Система линз обеспечивала расширение лазерного пучка и уменьшение его плотности мощности для исключения процессов фотодеструкции красителя, люминесцентный сигнал собирался с боковой грани пленки.

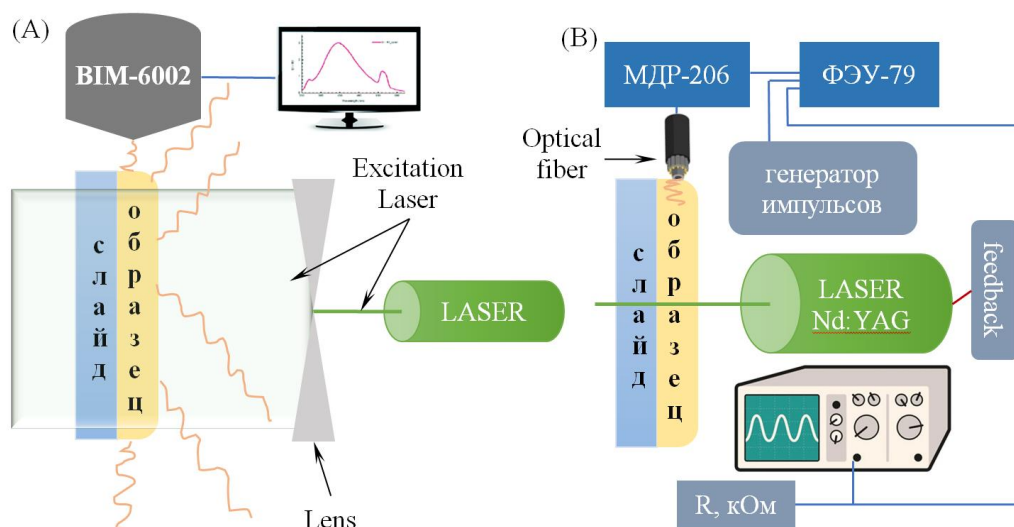


Рисунок 1 – Схемы экспериментальных установок. а) спектрофлуориметрической, б) спектрохронографической

В спектрохронографической установке (рис. 1б) в качестве источника лазерного излучения выступал импульсный твердотельный Nd:YAG лазер LQ529 с частотой следования импульсов 1 Гц. Люминесцентный сигнал собирался с боковой грани пленки с помощью оптического волокна. Спектральная селекция проводилась монохроматором МДР-206 настроенном на максимум полосы фосфоресценции образцов – 670 нм. Далее сигнал поступал на ФЭУ-79, регистрировался осциллографом GDS-840С и передавался на компьютер.

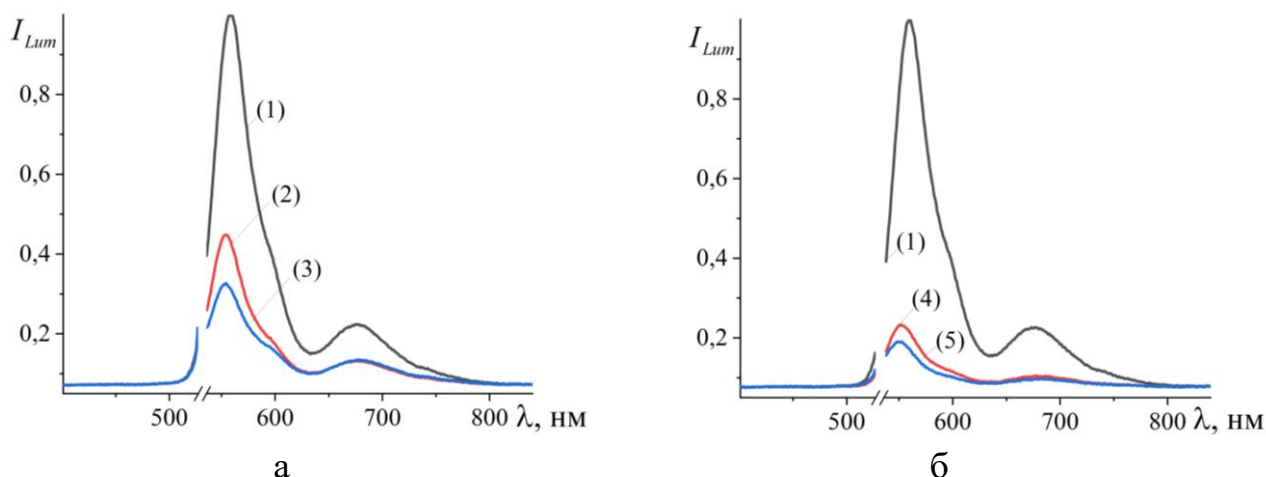


Рисунок 2 – Спектры люминесценции эритрозина в пленке ПВС при наличии серебряных (а) и (б) золотых НЧ. Кривые соответствуют следующим концентрациям (1) – без НЧ, (2) – 50%(Ag), (3) – 100%(Ag), (4) – 50%(Au), (5) – 100%(Au)

На рисунке 2 представлены спектры люминесценции эритрозина в кислородонепроницаемой пленке ПВС, полученные на экспериментальной установке 1а. Из рисунка видно, что наличие в пленке плазмонных НЧ приводит к уменьшению амплитуды сигнала флуоресценции и фосфоресценции, причем тушение золотыми НЧ (рисунок 2а) эффективнее, чем серебряными (рисунок 2б). Это связано с тем, что перекрытие спектра плазмонного резонанса со спектром люминесценции молекулы больше в случае золотой НЧ.

На рисунке 3 представлена кинетика фосфоресценции эритрозина в пленке ПВС. Рисунок 3а демонстрирует уменьшение амплитуды сигнала фосфоресценции при наличии плазмонных НЧ. На рисунке 3б представлен нормированный сигнал фосфоресценции эритрозина, из которого видно сокращение времени жизни триплетного состояния молекулы в присутствии золотых НЧ с 970 мкс до 820 мкс.

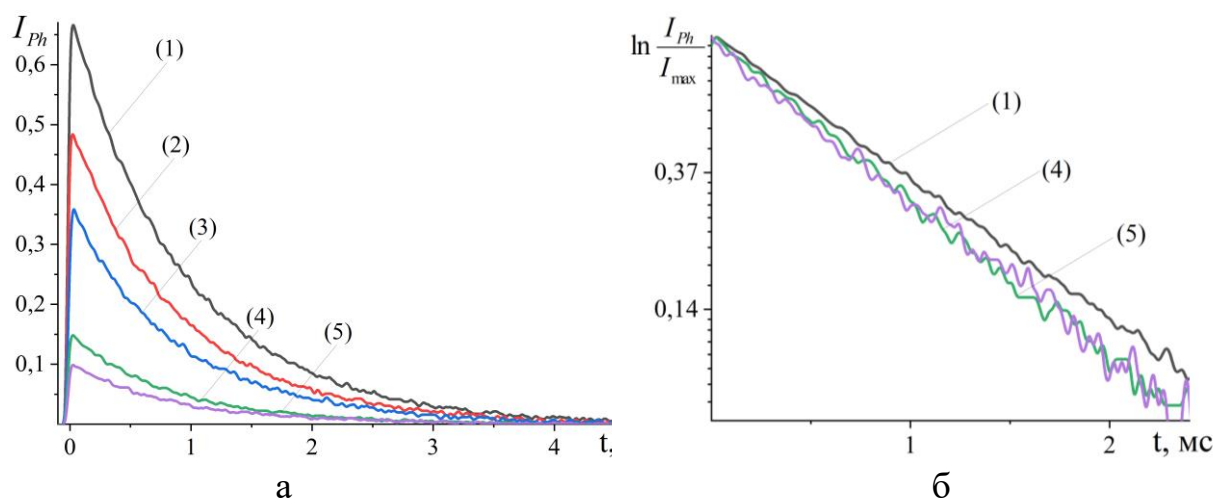


Рисунок 3 – Кинетика фосфоресценции эритрозина в пленке ПВС без плазмонных НЧ (1), в присутствии НЧ Ag 50%(2), 100%(3) и НЧ Au 50%(4), 100%(5) (а), нормированный сигнал фосфоресценции красителя без НЧ Au (1) в присутствии золотых НЧ 50%(4) и 100%(5) (б)

В изучаемых системах наблюдалось тушение люминесценции эритрозина в присутствии НЧ, причиной которого является безызлучательный перенос энергии электронного возбуждения от молекулы-донора к НЧ-акцептору. Поэтому для описания кинетики флуоресценции и фосфоресценции можно воспользоваться моделью переноса энергии в жестких растворах [7]. Кинетическое уравнение для среднеобъемной концентрации n_s молекул, находящихся в синглетном состоянии S_1 , после дельта-импульсного возбуждения системы записывается в виде

$$\frac{dn_s}{dt} = -\frac{n_s}{\tau_s} - \frac{n_s}{\tau_{ST}} - \frac{dW_s}{dt} n_s, \quad (1)$$

где τ_s – излучательное время жизни синглетного состояния, τ_{ST} – характерное время интеркомбинационной конверсии $S_1 \rightarrow T_1$, dW_s/dt – зависящая от времени скорость передачи энергии от молекул к наночастицам, определяемая интегралом

$$\frac{dW_S}{dt} = n_{NP} \int_R^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} U_{S_1}(r, \theta, \alpha) e^{-U_{S_1}(r, \theta, \alpha)t} r^2 dr \sin \theta d\theta d\alpha, \quad (2)$$

где n_{NP} – объемная концентрация наночастиц, R – радиус наночастицы, $U_{S_1}(r, \theta, \alpha)$ – вероятность в единицу времени переноса энергии от молекулы в состоянии S_1 к НЧ.

Решение уравнения (1) при начальном условии $n_s(0) = n_{s0}$ имеет вид

$$n_s(t) = n_{s0} \exp \left[-\frac{t}{\tau_s} - \frac{t}{\tau_{ST}} - n_{NP} \int_R^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (1 - e^{-U_{S_1}(r, \theta, \alpha)t}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\alpha \right]. \quad (3)$$

Поскольку время жизни возбужденного синглетного состояния молекулы на несколько порядков меньше времени жизни триплетного состояния, кинетическое уравнение для среднеобъемной концентрации n_T молекул, находящихся в триплетном состоянии, может быть записано в виде, аналогичном уравнению (1)

$$\frac{dn_T}{dt} = -\frac{n_T}{\tau_T} - \frac{dW_T}{dt} n_T, \quad (4)$$

с начальным условием, задаваемым интегралом по времени

$$n_T(0) = \frac{1}{\tau_{ST}} \int_0^\infty n_s(t) dt.$$

Через τ_T в формуле (4) обозначено время жизни триплетного состояния. Скорость передачи энергии от триплетных молекул к наночастицам dW_T/dt определяется подобно (2) с заменой вероятности U_{S_1} на вероятность U_{T_1} . Закон затухания триплетных возбуждений аналогичен формуле (3)

$$n_T(t) = n_T(0) \exp \left[-\frac{t}{\tau_T} - n_{NP} \int_R^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} (1 - e^{-U_{T_1}(r, \theta, \alpha)t}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\alpha \right].$$

В рамках квантовомеханической теории возмущений вероятность в единицу времени безызлучательного переноса энергии от возбужденной молекулы к плазмонной НЧ определяется золотым правилом Ферми

$$U_{S_1(T_1)}(r, \theta, \alpha) = \frac{2\pi}{\hbar^2} \sum_{lm\mu} \left| V_{fi}^{S_1(T_1^\mu)}(lm|r, \theta, \alpha) \right|^2 \delta(\omega_l - E_{S_1(T_1)}/\hbar), \quad (5)$$

где $V_{fi}^{S_1(T_1^\mu)}(lm|r, \theta, \alpha)$ – матричный элемент оператора $\hat{V} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ энергии взаимодействия возбужденной молекулы с электрическим полем плазмона НЧ, характеризуемым квантовыми числами l и m . Матричный элемент рассчитывается между начальным состоянием, в котором есть молекулярное возбуждение, и нет плазмона $|i\rangle = |S_1(T_1^\mu)|0_{lm}\rangle$, и конечным состоянием, в котором есть плазмон, и нет возбуждения на молекуле $|f\rangle = |S_0|1_{lm}\rangle$. Из-за спин-орбитального взаимодействия к триплетному состоянию молекулы подмешивается синглетное состояние $|S_1\rangle$, что обозначено штрихом у функции триплетного состояния. Индекс μ соответствует магнитному квантовому числу и равен $0, \pm 1$. В первом порядке теории возмущений волновая функция молекулы в триплетном состоянии будет иметь вид [8]

$$|T_1^\mu\rangle = |T_1^\mu\rangle + \frac{\langle S_1|H_{SO}|T_1^\mu\rangle}{E_{S_1} - E_{T_1}} |S_1\rangle,$$

где $E_{S_1(T_1)}$ – энергия возбуждения первого синглетного (триплетного) состояния молекулы, $|T_1^\mu\rangle$ – волновая функция триплетного состояния без учета спин-орбитального взаимодействия, $\langle S_1|H_{SO}|T_1^\mu\rangle$ – матричный элемент оператора

спин-орбитального взаимодействия.

Дельта-функция в формуле (5) выражает закон сохранения энергии при квантовом переходе и в расчетах, как правило, заменяется лоренцианом

$$\delta(\omega_l - E_{S_1}(\tau_1)/\hbar) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{S_1}(\tau_1) + \gamma_p}{(\omega_l - E_{S_1}(\tau_1)/\hbar)^2 + (\gamma_{S_1}(\tau_1) + \gamma_p)^2},$$

где $\omega_l = \omega_p \sqrt{l/(\varepsilon_\infty l + \varepsilon_d(l+1))}$ – частота локализованного плазмона НЧ, ω_p – плазменная частота металла, ε_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость металла, ε_d – диэлектрическая постоянная среды, окружающей НЧ, рассчитывается, $\gamma_{S_1}(\tau_1)$ и γ_p – обратные времена жизни возбужденных состояний молекулы и локализованного плазмона, соответственно.

Для расчета матричного элемента $V_{fi}^{S_1(T_1^\mu)}(lm|r, \theta, \alpha)$ оператор напряженности поля локализованного плазмона удобно представить в формализме вторичного квантования. Вне наночастицы этот оператор имеет вид

$$\hat{E}(r, \theta, \alpha, t) = -\sum_{lm} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_l^3}{Rl\omega_p^2}} \sqrt{(l+1)(2l+1)} \frac{R^{l+1}}{r^{l+2}} \left(Y_{lm}^{l+1}(\theta, \alpha) \hat{c}_{lm}(t) + Y_{lm}^{l+1*}(\theta, \alpha) \hat{c}_{lm}^+(t) \right),$$

где $Y_{lm}^{l+1}(\theta, \alpha)$ – шаровой вектор, $\hat{c}_{lm}(t) = \hat{c}_{lm} e^{-i\omega_l t}$ и $\hat{c}_{lm}^+(t) = \hat{c}_{lm}^+ e^{i\omega_l t}$ – операторы уничтожения и рождения локализованного плазмона НЧ. В результате вычисления матричного элемента получается следующее выражение

$$V_{fi}^{S_1(T_1^\mu)}(lm|r, \theta, \alpha) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_l^3}{Rl\omega_p^2}} \sqrt{(l+1)(2l+1)} \frac{R^{l+1}}{r^{l+2}} \langle S_0 | \mathbf{d} | S_1(T_1^\mu) \rangle \cdot Y_{lm}^{l+1*}(\theta, \alpha).$$

Дипольный момент перехода между триплетным и основным синглетным состоянием молекулы будет иметь вид

$$\langle S_0 | \mathbf{d} | T_1^\mu \rangle = \frac{\langle S_1 | H_{SO} | T_1^\mu \rangle}{E_{S_1} - E_{T_1}} \langle S_0 | \mathbf{d} | S_1 \rangle,$$

где $\langle S_0 | \mathbf{d} | S_1 \rangle$ – дипольный момент перехода между первым возбужденным и основным синглетными состояниями молекулы.

Окончательно, вероятность в единицу времени переноса энергии от возбужденной молекулы к НЧ дается формулой

$$U_{S_1(\tau_1)}(r, \theta, \alpha) = \frac{4\pi^2 A_{S_1}(\tau_1)}{\hbar R \omega_p^2} \sum_{lm} \frac{\omega_l^3 (l+1)(2l+1) R^{2l+1}}{l r^{2l+2}} |\mathbf{d}_{01} \cdot Y_{lm}^{l+1*}(\theta, \alpha)|^2 \delta\left(\omega_l - \frac{E_{S_1}(\tau_1)}{\hbar}\right),$$

где введены обозначения $\mathbf{d}_{01} = \langle S_0 | \mathbf{d} | S_1 \rangle$, $A_{S_1} = 1$ и

$$A_{T_1} = \sum_{\mu} \left| \frac{\langle S_1 | H_{SO} | T_1^\mu \rangle}{E_{S_1} - E_{T_1}} \right|^2.$$

Коэффициент A_{T_1} можно определить из формулы, связывающей излучательные времена жизни триплетного τ_S и синглетного τ_T состояний молекулы [8]

$$\frac{1}{\tau_T} = \frac{1}{\tau_S} \left(\frac{\omega_p \hbar}{\omega_{fl}} \right)^3 \sum_{\mu} \left| \frac{\langle S_1 | H_{SO} | T_1^\mu \rangle}{E_{S_1} - E_{T_1}} \right|^2,$$

где ω_{ph} и ω_{fl} — частоты максимумов франк-кондоновских факторов для переходов $T_1 \rightarrow S_0$ и $S_1 \rightarrow S_0$, соответственно.

Расчеты по представленной модели были проведены для золотых НЧ радиусом 20 нм. В расчетах использовались параметры Друде на оптических частотах [9]: энергия объемного плазмона $\hbar\omega_{pl} = 9,0$ эВ, высокочастотная диэлектрическая проницаемость $\epsilon_\infty = 9,8$, время жизни локализованного плазмона $\tau_p = 10$ фс. Для параметров, определяющих люминесцентные характеристики эритрозина, выбирались следующие значения: излучательные времена жизни синглетного и триплетного состояний $\tau_S = 0,1$ нс и $\tau_T = 0,95$ мс, время интеркомбинационной конверсии $\tau_{ST} = 0,1$ нс, длины волн максимумов спектров флуоресценции и фосфоресценции $\lambda_{fl} = 570$ нм и $\lambda_{ph} = 680$ нм. Также предполагалось, что дипольный момент перехода в молекулах направлен вдоль оси z системы координат, связанной с центром НЧ. На рисунке 4 представлены результаты расчетов кинетики фосфоресценции для разных концентраций НЧ. Из рисунка видно, что результаты расчетов качественно согласуются с экспериментальными результатами. Присутствие НЧ уменьшает амплитуду сигнала фосфоресценции и сокращает время жизни триплетного состояния: $\tau_T = 930$ мкс при концентрации НЧ $1 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$ и 910 мкс при концентрации $2 \cdot 10^{16}$ см $^{-3}$.

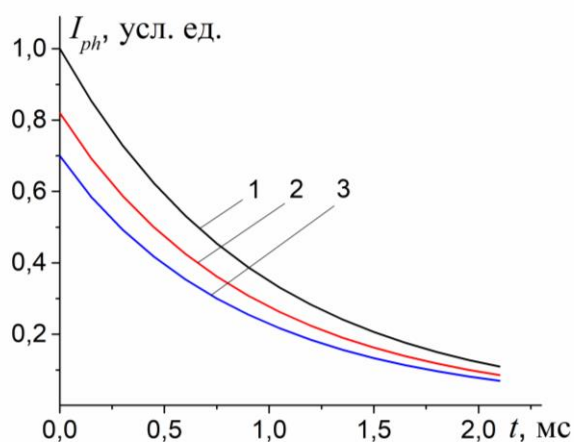


Рисунок 4 — Кинетика затухания фосфоресценции при разных концентрациях НЧ $n_{NP} = 0$ (1), $1 \cdot 10^{16}$ (2), $2 \cdot 10^{16}$ (3) см $^{-3}$

Таким образом, проведенное исследование показало, что в окрашенных пленках ПВС с внедренными в них плазмонными НЧ наблюдается тушение люминесценции красителя и уменьшение времени жизни триплетного состояния молекулы, что возможно объяснить односторонним безызлучательным переносом энергии электронного возбуждения от молекулы к НЧ, сопровождающимся рождением локализованных поверхностных плазмонов.

Список литературы

1. Князев, К.И. Влияние локализованных плазмонов в тонких пленках серебра и золота на оптические свойства органических красителей в акрилатной полимерной матрице / К.И. Князев, Р.Е. Якуненков, Н.А. Зулина, М.И. Фокина, Р.Д. Набиуллина, Н.А. Торопов // Оптика и спектроскопия. — 2018. — Т. 125. — вып. 4. — Р. 556-559.
2. Temirbayeva, D. Distance dependence of plasmon-enhanced fluorescence and delayed luminescence of molecular planar nanostructures / D. Temirbayeva, N. Ibrayev, M. Kucherenko // Journal of Luminescence. — 2022. — V. 243. — Р. 118642.

3. *Pacioni, N.L.* Surface plasmons control the dynamics of excited triplet states in the presence of gold nanoparticles / N.L. Pacioni, M. González-Béjar, E. Alarcón, K.L. McGilvray, J. C. Scaiano // *J. Am. Chem. Soc.* – 2010. – V. 12. – N. 132(18). – P. 6298.
4. *Wang, C.* Triplet Excited State Enhancement Induced by PDDA Polymer-Assembled Gold Nanoparticles / C. Wang, X. Zhang, K. Liu, X. Dai, C. Yang, S. Guo, and H. Su // *J.Phys.Chem.C.* – 2019. – V. 123. – P. 27717–27724.
5. *Song, P.* Three-level spaser for next-generation luminescent nanoprobe / P. Song, J.-H. Wang, M. Zhang, F. Yang, H.-J. Lu, B. Kang, J.-J. Xu, H.-Y. Chen // *Sci. Adv.* – 2018. – V. 4. – P. eaat0292.
6. *Русинов, А.П.* Влияние поверхностного заряда плазмонных наночастиц на их взаимодействие с молекулярным окружением / А.П. Русинов, В.М. Налбандян, Н.Ю. Кручинин и др. // *Универ. компл. как регион. центр образов., науки и культуры : мат-лы Всерос. науч.-метод. конф. - Оренбург : ОГУ, 2020.* – С. 2291-2298.
7. *Агранович, В.М.* Перенос энергии электронного возбуждения в конденсированных средах / В.М. Агранович, М.Д. Галанин. – М.:Наука, – 1978. – 384с.
8. *Мак-Глинн, С.* Молекулярная спектроскопия триплетного состояния / С. Мак-Глинн, Т. Адзуми, М. Киносита. – М.:Мир, – 1972. – 448 с.
9. *Климов, В.В.* Наноплазмоника : монография / В.В. Климов. – М: Физматлит, – 2009. – 480 с.

ПРИМЕНЕНИЕ И РАЗВИТИЕ СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ ВРАЧЕБНЫХ РЕШЕНИЙ В РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Широков С.С.

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования**

«Оренбургский государственный университет»

В своей практической деятельности врач сталкивается с большим количеством задач, которые требуют быстрого и точного реагирования. При постановке диагноза и лечении необходимо учесть: данные осмотра; индивидуальные особенности пациента; результаты лабораторных и инструментальных методов исследования.

Важно обеспечить своевременность и безопасность клинических мероприятий: вовремя обнаружить заболевание и начать правильное лечение. Частичная автоматизация лечебно-диагностического процесса и информационная поддержка специалиста — направления, которые призваны снизить нагрузку на врача.

Помощником врача при решении клинических задач может стать искусственный интеллект, реализованный в системе поддержки принятия врачебных решений (СППВР).

СППВР — компьютерная программа, которая обеспечивает врача клиническими данными и сведениями о пациенте и сопровождает при принятии решений. Оперативная информационная поддержка помогает выстроить правильную врачебную тактику. Клиническое мышление специалиста объединяется с искусственным интеллектом для повышения качества диагностики и лечения.

Искусственный интеллект в СППВР реализуется с помощью чёткой и нечёткой логики, методов машинного обучения, обработки естественного языка. Компьютерное зрение и глубокое обучение помогают распознавать медицинские изображения и интерпретировать их.

По мере поступления новых данных ИИ способен обучаться самостоятельно и повышать точность принятия решения.

На сегодняшний день СППВР может выполнять 7 задач:

1. Справочно-информационная поддержка.

Сервис снабжает специалиста актуальными клиническими рекомендациями и протоколами. Сведения о лекарственных препаратах помогают уточнить аспекты терапии.

2. Помощь в оформлении медицинской документации.

Система проводит сортировку и учёт электронных медицинских карт. Болезнь пациента кодируется по международной классификации болезней 10-го пересмотра (МКБ-10). При постановке диагноза врач выбирает соответствующий код.

3. Определение степени и тяжести заболевания.

Алгоритм оценивает состояние пациента, используя классификацию в рамках машинного обучения. На выходе врач получает заключение о группе риска.

4. Генерация тревожных сигналов.

СППВР способна выявить скрытые закономерности, которые может не заметить врач. Алгоритмы предупреждают о возможных осложнениях, например: о повышении уровня глюкозы при сахарном диабете, об инфекции в послеоперационный период, о декомпенсации заболевания.

5. Ассистирование в диагностике.

ИИ может проводить «консультацию» на основе входных данных: симптомов и жалоб пользователя. Система выдаёт диагноз, который служит ориентиром для врача. Другое направление — диагностическая визуализация. СППВР распознаёт медицинские изображения и выделяет подозрительные области.

6. Оптимизация лечения.

На основании данных ЭМК СППВР помогает подобрать правильное лечение: назначить оптимальную дозировку лекарств, спрогнозировать длительность пребывания в стационаре, провести мониторинг терапии.

7. Достижение экономической эффективности.

Внедрение ИИ помогает правильно расходовать ресурсы медицинской организации. Это достигается за счёт эффективного использования диагностического оборудования и электронного документооборота.

В рамках Государственной программы Российской Федерации «Развитие здравоохранения» реализован и продолжает совершенствоваться Федеральный проект «Создание цифрового контура здравоохранения на основе государственной информационной системы в сфере здравоохранения Российской Федерации» [16].

С одной стороны, создание цифрового контура подразумевает, в том числе, и внедрение интеллектуальных систем поддержки принятия врачебных решений. А с другой, подобных решений, а уж, тем более, полноценных программных продуктов в России не так уж и много.

В октябре 2020 года СППВР была внедрена во всех взрослых поликлиниках Москвы. За последующие 8 месяцев столичные терапевты и врачи общей практики с помощью СППВР выписали более 237,5 тысяч направлений на диагностические исследования.

Система обладает искусственным интеллектом и предлагает врачам предварительный диагноз и диагностические процедуры, необходимые для его верификации, исходя из собранных о пациенте данных. В нее «защиты» клинические протоколы, разработанные врачами совместно с федеральными экспертами на основе международных стандартов и клинических рекомендаций.

Так, по данным информационного портала «Webiomed» [17] в России в области СППВР по вопросам лечения пациентов насчитывается всего 13 независимых программных решений, что крайне мало для почти 5,2 тысяч медицинских учреждений страны.

В таблице 1 приведены примеры российских разработок СППВР

Таблица 1 – Отечественные разработки СППВР.

	Название	Описание
Системы компьютерного зрения	Цельс	искусственный интеллект для анализа цифровых медицинских снимков и выявления признаков различных заболеваний, в том числе онкологии на ранней стадии. Направления: маммография, флюорография. КТ лёгких, патоморфология
	Care Mentor AI	Сервисная платформа лучевой диагностики на основе искусственного интеллекта. Направления: маммография, рентген органов грудной клетки. КТ лёгких.
	Botkin AI	Платформа для анализа и обработки изображений с технологиями ИИ. Направления: маммография, КТ лёгких.
Симптомчекеры	MeDiCase	Искусственный интеллект для дистанционной диагностики и мониторинга заболеваний.
	Medai	Симптомчекер, интерпретатор анализов, персональная медицинская карта и консультант.
Системы предиктивной аналитики	Webiomed	СППВР на базе технологии ИИ, позволяющая выявлять факторы риска и подозрения на наличие различных заболеваний у пациентов.
Сервисы для назначения и контроля лечения.	Galenos	Интеллектуальная СППВР, которая автоматически оценивает эффективность лечения каждого пациента и выдает оптимальные для него рекомендации по назначению терапии, а также оценивает долгосрочные риски для здоровья пациентов.
	Киберис	Экспертная система на основе искусственного интеллекта для диагностики и персонализированной терапии, подбора аналогов лекарств, проверки безопасности назначений и автозаполнения медкарты.

	Lexema-Medicin	Платформа, предназначенная для автоматизации процессов направления на исследования, маршрутизации исследуемых материалов, сбора данных, контроля качества и оптимизации проводимых лабораторных исследований.
Системы мониторинга	Третье мнение	Интеллектуальный мониторинг безопасности пациентов, который помогает обеспечить безопасный с помощью алгоритмов компьютерного зрения.
	Онконет	Цифровой сервис для дистанционного мониторинга онкологических пациентов на иммунной и таргетной терапии.

Таким образом, СППВР и машинное обучение — это новая веха в развитии мировой медицины, и российские разработчики не остались в стороне от создания и внедрения таких систем. Новые технологии уже сегодня помогают врачам диагностировать и лечить социально значимые заболевания, а также предотвращать связанные с ними осложнения. Мы убеждены, что в медицине — сфере, где цена ошибки слишком высока — СППВР уже в скором времени станут незаменимыми помощниками врача.

Список литературы

1. С.М. Стиварос, А. Гледсон, Г. Ненадич и др. Системы поддержки принятия решений для клинической радиологической практики — к следующему поколению // Br J Radiol. 2010.
2. Рид Т. Саттон, Дэвид Пинкок, Дэниел К. Баумгарт и др. Обзор систем поддержки принятия клинических решений: преимущества, риски и стратегии успеха // npj Digital Medicine. 2020; 3(17). DOI: <https://doi.org/10.1038/s41746-020-0221-y>
3. Команда Expert.ai. Что такое машинное обучение? Определение. // Expert.ai. 2020. URL: <https://www.expert.ai/blog/machine-learning-definition/> (дата обращения: 10.12.2022).
4. Что такое компьютерное зрение? [Электронный ресурс] // IBM. URL: <https://www.ibm.com/topics/computer-vision/> (дата обращения: 10.12.2022).
5. Кристофер М. Белл, Араш Джалали, Эдвард Менса. Инструмент поддержки принятия решений для использования анатомографа из МКБ-10 для устранения неточностей в кодировании при поступлении: комментарий // Online J Public Health Inform. 2013. DOI: <https://doi.org/10.5210/ojphi.v5i2.4813>
6. Гуанъяо Ву, Пей Ян, Юаньян Се и др. Разработка системы поддержки принятия клинических решений для прогнозирования степени риска и

сортировки пациентов с COVID-19 при госпитализации: международное многоцентровое исследование // *Eur Respir J.* 2020; 56(2): 2001104. DOI: <https://doi.org/10.1183/13993003.01104-2020>

7. Крис Джордано, Меган Бреннан, Басма Мохамед и др. Доступ к искусственному интеллекту для принятия клинических решений // *Front. Digit. Health.* 2021. DOI: <https://doi.org/10.3389/fdgth.2021.645232>

8. Майкл М. Сигал, Аланна К. Рам, Натан К. Халс и др. Опыт интеграции программного обеспечения поддержки принятия диагностических решений с электронными медицинскими картами: преимущества по сравнению с рисками обмена информацией // *EGEMS (Wash DC).* 2017; 5(1): 23. DOI: <https://doi.org/10.5334/egems.244>

9. ЭКФ — Электронный клинический фармаколог: [Электронный ресурс]. URL: <https://www.esr.umkb.com/> (дата обращения: 10.12.2022).

10. Клэр Боун, Мелани Симмондс-Бакли, Ричард Туэйтс и др. Динамическое прогнозирование результатов психологического лечения: разработка и проверка модели прогнозирования с использованием регулярно собираемых данных о симптомах // *The Lancet.* 2021. DOI: [https://doi.org/10.1016/S2589-7500\(21\)00018-2](https://doi.org/10.1016/S2589-7500(21)00018-2)

11. Кристин М. Кори, Седж Кашьяп, Элизабет Лоренци и др. Разработка и проверка моделей машинного обучения для выявления хирургических пациентов с высоким риском с использованием автоматически отобранных данных электронных медицинских карт (Pythia): ретроспективное исследование в одном центре // *PLoS Med* 15(11): e1002701. DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pmed.1002701>

12. Таку Харада, Тайдзю Миягами, Котаро Кунито и др. Системы поддержки принятия клинических решений для диагностики в первичной медико-санитарной помощи: обзор объема работ // *Int J Environ Res Public Health.* 2021; 18 (16): 8435. DOI: <https://doi.org/10.3390/ijerph18168435>

13. Купеева И.А., Разнатовский К.И., Раводин Р.А. и др. Оценка эффективности интеллектуальной системы поддержки принятия врачебных решений // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления.* 2016; 2: 62-68. DOI: <https://doi.org/10.21638/11701/spbu10.2016.206>

14. Реброва О.Ю. Эффективность систем поддержки принятия врачебных решений: способы и результаты оценки // *Клиническая и экспериментальная тиреодология.* 2019; 15(4): 148-155. DOI: <https://doi.org/10.14341/ket12377>

15. Тамра Лисахт, Ханна Йифен Лим, Вики Ксафис и Ки Юан Нгиам. Принятие решений с помощью искусственного интеллекта в здравоохранении // *Asian Bioethics Review.* 2019; 11: 299-314. DOI: <https://doi.org/10.1007 / s41649-019-00096-0>

16. Постановление Правительства Российской Федерации от 26 декабря 2017 г. №1640 «Об утверждении государственной программы Российской Федерации «Развитие здравоохранения» [Электронный ресурс.] URL: <http://docs.cntd.ru/document/556183184> (дата обращения: 10.12.2022).

17. Обзор Российских систем поддержки принятия врачебных решений [Электронный ресурс.] URL: <https://webiomed.ai/blog/obzor-rossiiskikh-sistem-podderzhki-prinyatiya-vrachebnykh-reshenii/> (дата обращения: 10.12.2022).
18. Здравоохранение по данным Росстат [Электронный ресурс.] URL: <https://rosinfostat.ru/zdravoohranenie/> (дата обращения: 10.12.2022).

ФИЗИКА В ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВИДАХ СПОРТА

Якупов Г. С.

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

В последние годы экстремальные виды спорта приобретают в нашей стране всё большую популярность. Во многих городах строятся скейтпарки – специализированные площадки для занятий этими видами спорта. В данной статье будет рассмотрен один из таких видов спорта, включенный в программу Олимпийских игр – скейтбординг. Начинающим спортсменам важно осознать, что во всех видах спорта законы физики играют решающую роль и без их понимания и правильного использования не будет долгожданного прогресса в освоении выбранной дисциплины. Рассмотрим некоторые физические аспекты данной дисциплины.

Понимание физики скейтбординга полезно для скейтбордистов, когда они выполняют свои элементы, являющимися обязательными для данной дисциплины. Это позволяет правильно выполнять определенные движения, что необходимо для овладения новыми элементами катания на скейтборде. В дополнение к интуитивному пониманию, полученному на практике, знание некоторых законов физики, стоящих за выполнением трюков и прыжков, может помочь разобраться в том, как их правильно выполнять, что особенно важно для тех, кто только начинает знакомство с данным видом спорта. Обсудим физические принципы, на которых базируются элементы, лежащие в основе катания на скейтборде.

Одним из наиболее простых элементов с которого начинают знакомство со скейтбордингом у большинства спортсменов является Нірруjump. В этом прыжке скейтбордист движется по ровной горизонтальной поверхности с определенной скоростью $v_{гор}$. Затем он прыгает прямо вверх, так, чтобы горизонтальная составляющая сил, с которыми он действует на доску была равна нулю. Это позволяет ему двигаться в воздухе с той же горизонтальной скоростью, что и скейтборд ($v_{гор}$). В результате доска остаётся прямо под ним и он может приземлиться на неё сверху (см. рис. 1).

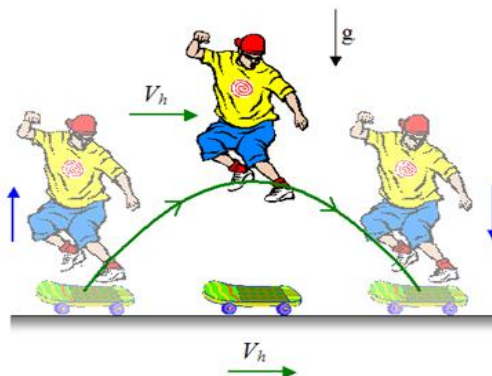


Рисунок 1 – Прыжок нірруjump на скейтборде

В этом трюке скейтбордист должен двигаться вверх, оттолкнувшись ногами вертикально вверх. Если же он толкнет на доску, приложив к ней даже малейшую горизонтально направленную силу, доска начнет движение либо вперёд, либо назад. После того, как скейтбордист прыгает с доски, он движется под действием силы тяжести по параболической траектории (как показано на рис. 1), прежде чем приземлиться обратно на доску.

Физика, стоящая за этим элементом, может быть описана уравнениями движения снаряда, где изменяется только вертикальная составляющая скорости, поскольку сила тяжести действует только в вертикальном направлении. Горизонтальная составляющая скорости $v_{гор}$ скейтбордиста остается прежней, так как на него не действует сила в горизонтальном направлении (сопротивлением воздуха пренебрегаем). Сила трения, действующая на доску при её движении из-за контакта с землёй, невелика и заметно не замедляет движение доски. В результате скорость скейтбордиста примерно такая же, как и горизонтальная скорость скейтборда. Это позволяет спортсмену приземлиться обратно на доску. Чтобы сделать прыжок более сложным, скейтбордист может совершить прыжок через препятствие, как показано на рисунке 2.



Рисунок 2 – Прыжок через препятствие

Но одним из наиболее важных элементов катания на скейтборде, на основе которого строятся другие более сложные трюки является Ollie (Олли) – фундаментальный трюк скейтбординга. Его часто используют в качестве основы для других, более сложных трюков. Начало Ollie состоит из двух основных действий, происходящих практически одновременно. Первое действие – скейтбордист прыгает вверх и с доски. Это сопровождается быстрым толчком вниз по хвостовому краю доски, что заставляя её отскакивать от земли и отскакивать обратно вверх. Затем скейтбордист направляет доску вместе со своими

ногами, когда она летит в воздухе, что позволяет ему приземляться обратно на неё. На рисунке 3 показана техника выполнения этого элемента. Стрелки изображают силы, действующие на доску на разных этапах трюка. Красные стрелки изображают силу, которую оказывают на доску ноги скейтбордиста. Чёрная стрелка – это силу тяжести, действующая на доску (эта сила приложена к центру масс доски). Синими стрелками показана силу, оказываемая на доску землей (сила реакции опоры).

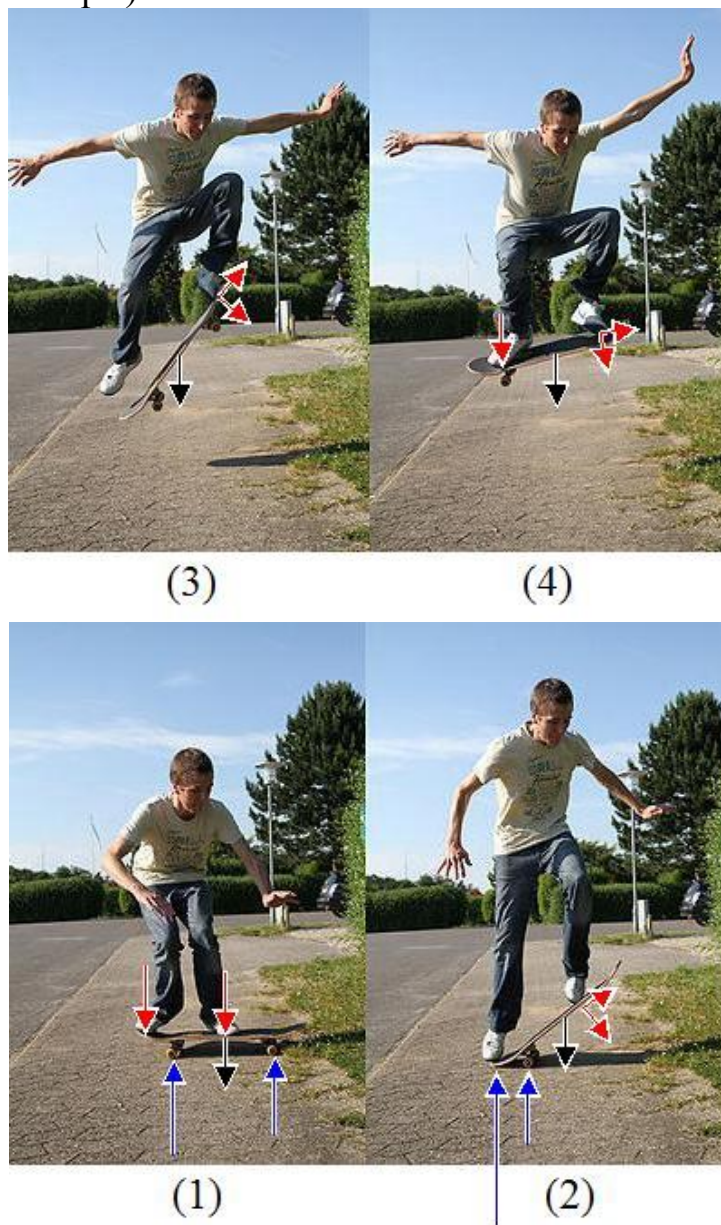
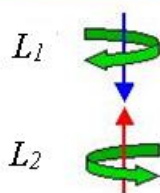


Рисунок 3 – Техника выполнения прыжка Олли

На этапе (1) скейтбордист приседает и готовится к прыжку. Его правая нога находится на хвосте доски, а левая нога находится в середине доски. Все три силы (представленные красной, черной и синей стрелками) на этом этапе уравновешиваются, поскольку доска неподвижна (без ускорения). На этапе (2) скейтбордист движет одну ногу вверх, после чего резко выпрямляет ноги и поднимая вверх руки. При этом он толкается вниз правой ногой гораздо силь-

нее, чем левой. Это заставляет доску наклоняться назад и ударяться о землю хвостом (должен быть слышен характерный щелчок). Когда хвост ударяется о землю, возникает большая вертикальная сила реакции опоры (обозначенная длинной синей стрелкой). За счёт этого доска движется вверх, а также начинает вращаться по часовой стрелке. Затем спортсмен скользит левой ногой влево вдоль доски и наклоняет её, что позволяет ему добиться хорошего сцепления за счёт силы трения с шероховатой поверхностью доски, используя край своего ботинка. Благодаря этому можно направлять доску в то время, когда она находится в воздухе. Сила, оказываемая на доску его левой ногой, разбивается на две составляющие перпендикулярную и параллельную доске. Параллельная составляющая этой силы увлекает доску за собой. На этапе (3) правая нога скейтбордиста теряет контакт с доской. Он направляет доску левой ногой и поднимает её вверх ещё выше. На этапе (4) скейтбордист приводит доску в горизонтальное положение, толкая вниз левой ногой, одновременно поднимая правую ногу. Теперь он контактирует с доской обеими ногами и может приземлиться прямо на неё.

Ещё одним базовым элементом скейбординга является так называемый фронтсайд 180, трюк, который предполагает использование закона сохранения момента импульса. В этом трюке скейтбордист поворачивает свою доску на 180° в воздухе так, что при посадке он смотрит в направлении, противоположном исходному. Он делает это, несмотря на то, что его начальный момент импульса был равен нулю. Рисунок 4 иллюстрирует этот трюк.



$$L_1 + L_2 = 0$$

Рисунок 4 – Техника выполнения элемента фронтсайд 180

Когда скейтбордист поднимается в воздух, единственной силой, действующей на него, вновь является сила тяжести, которая действует на центр масс системы (состоящей из скейтбордиста и доски). Из-за этого сила тяжести не может оказывать крутящий момент на систему, следовательно, в целом система не может вращаться. Как же скейтбордисту удастся повернуть свою доску на 180° к тому времени, когда он приземляется обратно на землю? Он делает это, вращая верхнюю и нижнюю части тела в противоположных направлениях.

Таким образом, он может приземляться с доской, повёрнутой в другую сторону, так чтобы суммарный момент импульса системы оставался равным нулю.

Как показано на рисунке 4 спортсмен придаёт своей верхней части тела вращение по часовой стрелке, в результате чего момент импульса его верхней части тела равен L_1 . В то же время он задаёт нижней части тела (включая скейтборд) вращение против часовой стрелки, в результате чего момент импульса его нижней части тела (плюс скейтборд) равен L_2 . Поскольку момент импульса сохраняется для системы, $L_1 + L_2 = 0$.

Задачей спортсмена является создание достаточно высокого L_1 , чтобы его нижняя часть тела (включая скейтборд) соответствовала этому значению (L_2) и повернулась на 180° в другом направлении. Он делает это, вытягивая руки, находясь в воздухе. Это увеличивает момент инерции его верхней части тела, что увеличивает L_1 (так как момент импульса определяется выражением $L = I\omega$, где I – момент инерции, а ω – угловая скорость тела). Как только скейтбордист приземляется на землю, он просто поворачивает верхнюю часть тела назад.

Катание в рампе (трубе, полутрубе) является неотъемлемой частью скейтбординга. Вылет из рампы используется скейтбордистами для увеличения их вертикальной скорости при вылете из трубы. Это позволяет им достигать большей высоты и выполнять больше трюков, находясь в воздухе, так называемые *airtricks*, то есть трюки в воздухе. На рисунке ниже изображен скейтбордист, приближающийся к изогнутой части полутрубы.



Рисунок 5 – Рампа (полутруба) для скейтбординга

Скейтбордист может увеличить свою скорость, не отталкиваясь от земли ногами. То есть, его должны всегда находиться на доске. Это вызывает вопрос: какие законы физики здесь задействованы, и как скейтбордист увеличивает свою скорость, не отталкиваясь от земли? Чтобы увеличить свою скорость, спортсмен приседает в прямой части полутрубы (как показано на рисунке 5). Затем, когда он входит в изогнутую часть полутрубы, он поднимает своё тело и руки вверх, за счёт чего он вылетает из трубы с большей скоростью. Основную физику скейтбординга, стоящую за этим явлением, можно понять, используя

закон сохранения момента импульса. Схематически выполнение этого элемента изображено на рисунке 6.

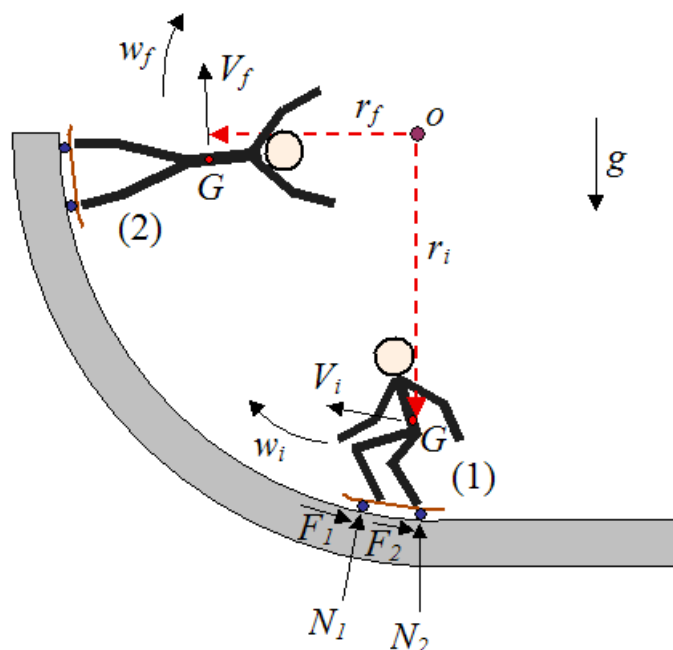


Рисунок 6 – Вылет скейтбордиста из полутрубы

Здесь и далее: ω_1 – начальная угловая скорость тела (состоящая из скейтбордиста плюс доски), в положении (1), ω_2 – конечная угловая скорость тела, в положении (2), которое является точкой, в которой скейтбордист выходит из полутрубы, v_1 – начальная скорость центра масс G тела, в положении (1), v_2 – конечная скорость центра масс G тела, в положении (2), r_1 – начальное расстояние от центра вращения O до центра масс тела G , в положении (1), r_2 – конечное расстояние от центра вращения O до центра масс тела G , в положении (2), g – ускорение свободного падения, N_1 и N_2 – это силы нормального давления, действующие на колеса, F_1 и F_2 – силы трения, действующие на колеса.

Предполагается, что полутруба представляет собой полукруг с центром в точке O .

Физическая сторона данного элемента может быть рассмотрена как двумерная задача. Запишем уравнение момента импульса для системы, состоящей из скейтбордиста и доски:

$$I_{o1}\omega_1 + \sum \int_{t_1}^{t_2} M_0 dt = I_{o2}\omega_2$$

где:

I_{o1} – начальный момент инерции тела (состоящий из скейтбордиста и доски) о оси, проходящей через точку O и указывающей на страницу, в положении (1),

I_{o2} – конечный момент инерции тела (состоящего из скейтбордиста и доски) вокруг оси, проходящей через точку O и указывающей на страницу, в позиции (2),

ΣM_o – сумма моментов вокруг точки O . Эти моменты интегрированы между начальным временем t_1 (в положении 1) и конечным временем t_2 (в положении 2).

Предполагается, что скейтбордиста вместе с доской можно рассматривать как твёрдое в положениях (1) и (2), хотя момент инерции системы в этих двух положениях действительно меняется. Но, используя это уравнение нам достаточно знать только начальное и конечное значения момента инерции системы.

Линия действия сил нормального давления N_1 и N_2 проходит через точку O , поэтому они не создают вращательного момента относительно точки O . Силы трения F_1 и F_2 малы, поэтому ими можно пренебречь. Остаётся только сила тяжести, которая создаёт вращающий момент относительно точки O . (обратите внимание, что сила тяжести приложена к центру масс системы, состоящий из скейтбордиста и доски). Из приведенного выше уравнения выразим величину ω_2 . Таким образом:

$$\omega_2 = \frac{I_{01}\omega_1 + \Sigma \int_{t_1}^{t_2} M_0 dt}{I_{02}}$$

Кроме того, согласно теореме Штейнера

$$I_{01} = I_{G1} + mr_1^2$$

$$I_{02} = I_{G2} + mr_2^2$$

I_{Gi} – начальный момент инерции тела вокруг оси, проходящей через точку G и указывающей на страницу, в положении (1), I_{G2} – конечный момент инерции тела вокруг оси, проходящей через точку G и указывающей на страницу, в положении (2), m – масса тела.

В приведенном выше уравнении для ω_2 , при уменьшении I , угловая скорость ω_2 увеличится. На практике это может быть достигнуто путем уменьшения расстояния от центра масс тела G до точки O . Другими словами, если сделать расстояние r_2 меньшим, то угловая скорость ω_2 увеличится. Отметим также, что значения величин I_{G1} и ΣM_o также могут несколько измениться. Но основным вкладом в увеличение угловой скорости ω_2 будет уменьшение расстояния r_2 .

В положениях (1) и (2) скорость центра масс G задается двумя линейными скоростями

$$v_1 = \omega_1 r_1$$

$$v_2 = \omega_2 r_2$$

они параллельны полутрубе в положениях (1) и (2), так как скейтбордиста мы считаем твёрдым телом.

Основываясь на приведенных выше уравнениях для скорости, можно сделать следующий вывод: если скейтбордист уменьшит расстояние r_2 (например, подняв руки вверх), он значительно увеличит угловую скорость ω_2 . Это, в свою очередь, приведёт к тому, что его скорость вылета из трубы (v_2) будет больше, чем если бы этого не сделал.

Приседая и поднимая свой центр тяжести и руки вверх в изогнутой части полутрубы, скейтбордист может заметно увеличивать свою скорость, что в ко-

нечном итоге позволит ему достичь достаточной высоты при вылете из полутрубы для выполнения различных трюков в воздухе.

Все перечисленное выше показывает, что понимание и использование законов физики играет немаловажную роль в успешной освоении любой спортивной дисциплины.

Список литературы

1. Савельев И.В. Курс общей физики. – М.: Наука, 1982, т 1, с. 432.
2. Иродов И.Е. Основные законы механики. - М.: Высшая школа, 1978, с. 240.

ФИЗИКА И ВОСПИТАНИЕ ПАТРИОТИЗМА

Якупов Г. С.

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

Одной из лучших традиций школьного обучения является слияние обучения и воспитания в единый учебный процесс. Кроме того, воспитание обычно считалось главной задачей учебного заведения. Образование же понималось как фундаментальный, но тем не менее составной элемент образования. Этой традиции в основном следовала советская школа, делая при этом упор на идеологию. В последние десять лет воспитательная функция школьных уроков перестала быть доминирующей. Учителя-предметники, не могут этого отрицать, хотя триединая задача обучения всё же существует: учить, развивать и воспитывать.

В связи с чем сегодня ставится вопрос о воспитательной составляющей обучения вообще и физики в частности? Очень многие вчерашние выпускники школ, даже показывая относительно высокие знания по предмету, не имеют сильного духовного «стержня», слабо представляют себе истинное значение нравственных мотивов поведения, не осознают своей роли в обществе. Зачастую они значительно преувеличивают значение её материальных ценностей, не обращая должного внимания на то, какими способами они достигаются, не придают значения тому насколько важно человеку чувствовать себя хорошо, осознавая, что их действия не нарушают прав и интересов других людей, не унижают их достоинства. Выпускники школ должны понимать, что все их действия должны быть направлены на развитие страны, в которой они живут и будут трудиться, на её процветание[1].

Задача учителя помочь учащимся разобраться в этом, создать соответствующий настрой для обучения, что очень важно для формирования правильной ценностной ориентации, формированию устойчивых личностных качеств. Всё это необходимо для того, чтобы вырастить достойных граждан своей страны.

Изучение физики в школе начинается в 7 классе, и с первых же уроков учащихся необходимо знакомить не только с физическими понятиями и законами, но и с именами русских учёных, посвятивших свою жизнь служению своей стране. На занятиях можно отводить некоторое время для знакомства учеников с жизнью выдающихся учёных, их биографиями. Ученикам важно понять то, что каждый из них по-своему одарённый, необходимо только открыть в себе этот дар.

Сама специфика курса физики 7 класса, когда изучаются её основы, даёт возможность практически на каждом занятии знакомить учащихся с выдающимися достижениями отечественной науки. Для реализации этой задачи можно использовать видеоролики (видеофильмы), позволяющие увидеть те процессы

и явления, которые рассматривались на уроках. Например, при изучении темы «Движение и взаимодействие тел» рассматривается понятие реактивного движения и весь урок можно провести в русле рассказа о достижениях русских инженеров, строителей, космонавтов и лётчиков.

Интересным моментом на уроке, посвященному изучению темы «Закон сохранения импульса» будет рассказ о создании одного из самых мощных образцов реактивного оружия Великой отечественно войны – миномета БМ-13, который получил от бойцов Красной армии неофициальное название «Катюша». Существует малоизвестный факт, что первые образцы этого миномёта имели очень низкую точность попаданий, всего 3 – 4 снаряда на гектар. Молодой советский учёный-механик С.А. Христианович взявшись за эту проблему предложил интересное техническое решение, заключающееся в том, что снаряды начинали закручиваться, за счёт изменения ударно-спускового механизма. Точность попаданий повысилась до 35 – 40 снарядов на гектар.

При изучении темы «Реактивное движение» необходимо рассмотреть биографии российских учёных, которые внесли неоценимый вклад в развитие отечественной и мировой космонавтики – К.Э. Циолковского и С.П. Королёва. Можно также рассказать о выдающемся ученом в области прикладной математики и механики М. В. Келдыше, предложившем использовать космические аппараты для исследования космоса, рассматривавшего также теоретические возможности запусков ракет и искусственных тел на околоземные орбиты, возможности полётов на Луну и планеты С и планеты Солнечной системы [2].

Изучая тему «Магнитное поле» можно вспомнить один из эпизодов из истории Великой Отечественной войны. Так учеными Ленинградского физико-технического института была решена задача по созданию эффективного способа защиты кораблей от магнитных мин. Эту научную задачу решили И.В. Курчатов и А.П. Александров. Выбрав в качестве опытного образца самый большой корабль советского флота линкор «Марат» (участвовавшем в обороне Ленинграда), им удалось увеличить магнитное поле в килевой части корабля за счёт системы электромагнитов в десятки раз. Исследования проведенные И.В. Курчатовым и А.П. Александровым дали положительный результат, в связи с чем командование распорядилось установить на всех кораблях военно-морского флота размагничивающие устройства. К августу 1941 года большая часть боевых кораблей была таким образом защищена от магнитных мин, что позволило спасти сотни кораблей и тысячи жизней моряков.

Изучая тему «Принцип радиосвязи» следует отметить не только работы А. С. Попова, но и другого инженера-изобретателя В. Зворыкина, создателя современного телевидения. Именно он является создателем кинескопа, иконоскопа, системы электронного телевидения и основ цветного телевидения. Также можно вновь обратиться к периоду Великой Отечественной войны и отметить работы Н. Д. Папалески, Б. А. Введенского, А. В. Шубникова, которыми руководил академик Ю. Б. Кобзарев. Такие примеры, приведённые на занятиях показывают, какой высокой ценой была достигнута победа и непосильный и са-

моотверженный творческий труд учёных-физиков в годы войны в полной мере можно назвать настоящим гражданским подвигом.

При изучении темы «Тепловые явления» следует сказать о вкладе М. В. Ломоносова в создание молекулярно-кинетической теории, во многом опередившей представление о строении вещества того времени и о том, что идея фундаментального закона сохранения энергии принадлежит именно ему.

Тема «Давление света» тесно связана с экспериментальным обнаружением этого явления, теоретически предсказанного Дж. Максвеллом, выдающимся русским физиком П. Н. Лебедевым в 1907 г. Важно отметить, что после этого открытия (и изобретения радио А. С. Поповым), электромагнитная теория Максвелла была окончательно принята учёным сообществом. П. Н. Лебедев после этого открытия получил приглашение на работы в Нобелевский институт в Стокгольме, от которого он отказался и остался на Родине.

На уроках, посвященных решению задач, можно рассматривать задачи с условиями, в которых были бы подчеркнуты достижения российских учёных. Эти задания позволяют учащимся прикоснуться к истории российской науки, позволяют развивать логические способности учеников, но самое важное то, что у школьников формируется понимание того, что физика не абстрактная наука, а наука о жизни и окружающим нас мире, с действующими в нём законами.

Подобные задачи дают возможность познакомиться с малоизвестными страницами истории нашей страны, а также расширить свой кругозор. Учащиеся понимают, что они решают задания в которых говорится о необъятных просторах нашей Родины, о выдающихся людях которые внесли свой вклад в развитие нашей страны.

В последние годы много говорилось о гуманитарном, личностно-ориентированном воспитании. И здесь можно обойтись без коллизии интересов между гуманитарными и естественными науками, учитывая тот факт, что физика обладает огромным гуманитарным потенциалом. В центре такого воспитания находится личность ученика с её саморазвитием, самореализацией, самовоспитанием. Помогут в этом учителю физики литература, музыка и искусство. Вот одно из стихотворения известного поэта В. Я. Брюсова, которое можно прочесть на уроке физики (причём необязательно при изучении микрообъектов):

Мир электрона

Быть может, эти электроны
Миры, где пять материков,
Искусства, знанья, войны, троны
И память сорока веков!
Еще, быть может, каждый атом -
Вселенная, где сто планет;
Там – все, что здесь, в объеме сжатом,

Но также то, чего здесь нет.

Удивительно то, что далёкий от естественных наук поэт-гуманитарий строит такие параллели[3].

В процессе изучения курса физики учащиеся так или иначе отвечают на вопросы, которые заставляют их задуматься о необходимости получения новых знаний, навыков, расширения своего кругозора, воспитания нравственных личностных качеств, к гордости за свою страну, способности к самопознанию и самореализации, к поиску что-то нового, неизведанного. Всё это способствует формированию интеллектуальной личности, настоящего гражданина и патриота своей Родины.

Список литературы

1. Дягилев Ф.М. Из истории физики и жизни ее творцов. М.: Просвещение, 1986. 255 с.
2. Спасский Б.И. Физика в ее развитии. М.: Просвещение, 1979. 208 с.
3. Ланина И.Я. Развитие интереса школьника к предмету. – М.: Просвещение, 1997. – 24 с

ФОРМИРОВАНИЕ МОТИВАЦИИ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ У СТУДЕНТОВ ТЕХНИЧЕСКИХ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ ДЕМОНСТРАЦИОННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Якупов Г. С.

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

Основной задачей системы образования Российской Федерации является формирование у молодёжи естественнонаучной картины мира, поскольку именно она вносит существенный вклад в развитие духовного облика человека, формирует его мировоззрение, учит ориентироваться в шкале духовных ценностей [1].

В последние годы система образования нашего государства столкнулась со многими трудностями, одна из которых, в частности, является общей для многих государств постсоветского пространства: проблема набора абитуриентов на технические специальности вузов. В Российской Федерации эта проблема связана, с одной стороны, с «демографической ямой» 90-х годов прошлого столетия. С другой стороны, серьёзной проблемой является и слабый уровень довузовской подготовки: студентам первых курсов сложно даётся освоение образовательных стандартов технических дисциплин, рассчитанных на сравнительно высокий уровень знаний. Одним из основных мотивов обучения является познавательный интерес учащихся. Но в настоящее время интерес к дисциплинам, которые лежат в основе технического знания, сформировать сложно. Например, на изучение физики в непрофильных классах средних школ отводят два урока в неделю, выдается небольшое домашнее задание, как правило, в виде очень простых задач, сводящихся к элементарной подстановке числовых данных из условия в расчётные выражения.

Вследствие нехватки времени учащимся преподают лишь самые необходимые лишённые конкретного содержания истины. Изучаемый материал зачастую настолько далёк от окружающей учеников реальной жизни, что у них не возникает стремления к углублению полученных знаний. В итоге физика из области естествознания превращается в учение о формулах, которые почти не встречаются в повседневной жизни, и что самое главное, у учащихся не формируется техническое мышление на уроках физики.

Тем не менее в школьной программе по физике имеется достаточное количество демонстрационных экспериментов по всем изучаемым разделам. Наличие достаточного числа аудиторных часов (в недавнем прошлом) [2] позволяло учителям физики показывать не только демонстрации, но и учебные фильмы, проводить экскурсии в высшие учебные заведения, кроме того, учитель должен был обязательно включать демонстрационный эксперимент в учебный процесс. Возникло даже такое понятие «меловой подход» – ситуация,

когда преподавание физики сводится к замене демонстрации математическими выражениями физических законов.

В современных реалиях такое недопустимо: перед преподавателями физики, являющейся дисциплиной общетехнической подготовки, ставятся цели не только усвоения учащимися программы, но и их до определенного необходимого уровня профессионального образования.

К сожалению, в большинстве учебных заведений, за исключением тех, где физика является одним из профильных предметов, число аудиторных часов, отведённых для изучения данной дисциплины очень мало и достичь обозначенных целей возможно лишь при формировании положительного отношения учащихся к предмету уже с самого начала его изучения. Необходимо показать связь физики с профессиями, которые учащиеся выберут в будущем, а также её связь с другими изучаемыми дисциплинами естественнонаучного цикла. Специфическим мотиватором к изучению физики является демонстрационный эксперимент.

Эксперимент позволяет установить причинно-следственные связи между явлениями, а также между величинами, характеризующими свойства тел и явлений. Академик С. В. Вавилов указывал на двойную роль эксперимента:

1. Эксперимент либо доказывает либо отвергает те или иные теоретические предположения.

2. Эксперимент может стать предпосылкой новой теории или гипотезы, которая должна быть подтверждена новыми экспериментами. Обе стороны эксперимента неразрывно связаны.

В зависимости от того, какие задачи и цели были поставлены, эксперимент может быть как количественным так и качественным; иллюстративным, исследовательским, техническим, научным или демонстрационным. Именно этот вид эксперимента и его роль будут рассмотрены в данной статье.

В учебном процессе большую роль играет учёт преподавателем собственной молодежи потребности во впечатлениях. Следовательно, эксперимент должен быть не только посвящён изучаемой теме по физике, но и быть эффективным, привлекающим внимание учащихся. Физические демонстрации, используемые на учебных занятиях, должны быть тщательно продуманы.

При разработке методического обеспечения демонстрационного эксперимента важно, чтобы преподаватель вовремя и правильно организовать переход от привлекательности опытов к привлекательности самого предмета. При этом имеет большое значение эстетическая сторона процесса: уверенные, спокойные, обдуманые действия преподавателя достигаются частым их повторением.

Также большую роль играют вдохновленный вид преподавателя, грамотная речь и атмосфера сотрудничества, создаваемая им на учебном занятии. Всё перечисленное способствует формированию научного мышления школьников, учит их выделять существенные признаки и причины тех или иных физических явлений и процессов, что способствует развитию аналитических способностей учеников, учит их делать выводы. Кроме того, при помощи демонстрационного эксперимента возможно создание проблемных ситуаций, которые характеризу-

ются неожиданностью и конфликтом между незнанием и знанием. Решая проблемные ситуации учащийся сам активно участвует в процессе поиска и приобретения новых знаний, устанавливает связи между известными и неизвестными ему понятиями и фактами. При этом преподаватель может контролировать процесс мышления, обучения и усвоения знаний учащимися, делая изложение самого материала более доказательным. Физический эксперимент, используемый для создания проблемных ситуаций, должен быть ярким, выразительным и убедительным, оказывающим сильное воздействие на эмоциональную сферу.

Впечатления, полученные при демонстрации эффектного опыта, позволяют перейти к формированию ряда устойчивых побуждений: 1) интерес к учебному процессу, 2) потребность творчески участвовать в нём с получением положительного результата, 3) сотрудничать с преподавателем и другими учащимися. Правильно поставленный демонстрационный эксперимент и чёткие выводы являются важнейшим средством формирования не только качественного "багажа знаний" по дисциплине, но и научного мировоззрения учащихся. Кроме того, демонстрационный физический эксперимент играет важную роль в решении образовательных задач как важное средство закрепления теоретических знаний. У учащихся развиваются наблюдательность, желание совершенствовать знания и применять их на практике.

Кроме того, физический демонстрационный эксперимент с продуманным методическим обеспечением, в том числе с учётом социальных мотивов обучения, можно считать составной частью обучения профессиональному развитию личности. Объяснение этому можно дать следующее: с одной стороны, он предполагает активное восприятие учащегося, что нивелирует грань между воспитанием, обучением и развитием, а, с другой стороны, учитывает индивидуальный стиль и социально-профессиональные качества учителя.

Список литературы

1. Елькин, В.И. Оригинальные уроки физики и приемы обучения Текст. / В.И. Елькин // Сост. Э.М. Браверманн. – М.: Школа - Пресс, 2001. — 80 с.
2. Бабабанский, Ю.К. Методы обучения в современной общеобразовательной школе / Ю.К. Бабабанский. М.: Просвещение, — 1985. -208 с.