

**У ИСТОКОВ ФИЗИЧЕСКОЙ НАУКИ И ВЫСШЕГО ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ
В САРАТОВЕ**

В. М. Аникин,

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского*Аникин Валерий Михайлович*, д.ф.-м.н., профессор, декан физического факультета

Приведены краткие сведения о событиях и людях начала XX века, положивших начало профессиональному физическому образованию и физической науке в Саратове.

2017 г. отмечен солидной юбилейной датой из Саратовского университета. 100 лет назад Временным правительством России было принято решение об открытии с 1 июля 1917 г в Саратовском университете физико-математического факультета [1, с. 270]. Этому решению предшествовало ходатайство Императорского Николаевского Саратовского университета от 15 февраля 1916 г. об открытии физико-математического факультета уже в 1916/1917 учебном году, направленное в Министерство народного просвещения России. Тогдашний министр народного просвещения Российской империи Павел Николаевич Игнаев (1870–1945) представил в Совет Министров России комплексное предложение об открытии новых факультетов (физико-математических и историко-филологических) в двух российских университетах – Саратовском и Томском. 21 июня 1916 г. это предложение Советом Министров было одобрено.

Окончательное оформление решения об организации физико-математического факультета связывается с именем министра народного просвещения первого состава Временного правительства, профессора Александра Аполлоновича Мануйлова (1861–1929) [2]. Еще находясь в 1909 г. на посту ректора Московского университета, Мануйлов направил приветствие «новорожденному брату» – Саратовскому университету [1, с. 263, 264], в котором, в частности, говорилось: «Открытие Саратовского Университета – великое торжество, не только местное, но и национальное, праздник русской высшей науки, подчиняющей своему непосредственному воздействию новый обширный район Русского Государства».

5 сентября 1917 г. первым деканом физико-математического факультета был избран экстраординарный профессор Саратовского университета Владимир Дмитриевич Зёрнов (1878–1946), один из «отцов-основателей» университета [3,4]. К тому времени уже функционировали возглавляемые им кафедра физики и Физический институт, специальный корпус для которого был построен в 1914 г. (надпись в старой орфографии «Физический институт») и по сей день украшает фронтон третьего корпуса СГУ). Защитивший в Московском университете в 1909 г. магистерскую диссертацию под руководством великого русского физика-экспериментатора Петра Николаевича Лебедева (1866–1912), Зёрнов, несомненно, обладал ярко выраженными организаторскими способностями. За короткое время он, курируя

строительство физического корпуса, смог оснастить его лаборатории, приобрести учебно-научную литературу и сформировать первую группу высококвалифицированных сотрудников (Н. П. Неклепаев, В. Е. Сребницкий, И. М. Серебряков, К. А. Леонтьев), входивших в научную школу П. Н. Лебедева–П. П. Лазарева. В состав физико-математического факультета были включены [1, с. 84] кафедры естественно-научного профиля (физики, ботаники, зоологии, химии, минералогии с геологией), которые были дополнены кафедрами математической специализации.

В. Д. Зёрнов был назначен профессором в Саратовский университет непосредственно по рекомендации П. Н. Лебедева [5, письмо 356]. Решая «самосогласованную» задачу строительства здания Физического института, оснащения его научным и демонстрационным оборудованием, библиотекой, Зёрнов постоянно советовался с Петром Николаевичем. В Музее физических приборов и лекционных демонстраций физического факультета хранится записная книжка, подаренная Зёрнову Лебедевым с его «подсказками». Кроме того, пользуясь его рекомендательными письмами Лебедева к ведущим физикам, Зёрнов в 1909 г. совершил поездку по университетам Европы, перенимая опыт организации учебного процесса [4]. В день открытия Саратовского университета 6 (19) декабря 1909 г. Лебедев прислал Зёрнову поздравительную телеграмму, которая ныне хранится в созданном Зёрновым музее физических приборов [4,6].

28 сентября 1918 г. В. Д. Зёрнов был избран ректором Саратовского университета [1, с. 224], а пост декана физико-математического факультета занял приглашенный В. Д. Зёрновым математик Владимир Васильевич Голубев (1884–1954), будущий член-корреспондент Академии наук [7]. У «руля» кафедры физики и Физического института в 1921 г. Зёрнова сменил Константин Александрович Леонтьев (1889–1932) [8], еще один представитель московской научной школы П. Н. Лебедева–П. П. Лазарева.

Большой этап развития физического образования и науки в Саратовском университете «обрамляют» два незаурядных события, которые могут рассматривать как факты признания достижений саратовских физиков. В 1928 г. в Большой физической аудитории третьего корпуса СГУ прошло выездное заседание Шестого Всесоюзного съезда физиков, в котором приняли участие 5 будущих нобелевских лауреатов [9], а в 2012 г. в той

ЮБИЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В САРАТОВЕ

же аудитории состоялся XX Международный симпозиум «Наноструктуры: физика и технологии» под руководством лауреата Нобелевской премии академика Ж. И. Алфёрова [10].

В 1945 г. был образован самостоятельный физический факультет, в праздновании 70-летия которого в феврале 2016 г. приняли участие многие его выпускники, в том числе академики и члены-корреспонденты РАН, представители научных и научно-производственных организаций России, с которыми физический факультет поддерживает многолетние связи [14].

Страницам истории физического факультета Саратовского университета посвящены публикации [6, 9–16], а также цитируемые в этих публикациях источники. В данном выпуске научного сборника «Вопросы прикладной физики» публикуется статья, в которой представлены фрагменты истории уникальной структуры Саратовского университета – Научно-исследовательского института механики и физики СГУ.

Редакционная коллегия научного сборника «Вопросы прикладной физики» будет благодарна за представление дополнительных материалов по истории физического факультета и НИИ механики и физики СГУ.

Библиографический список

1. Аврус А.И., Гапоненко А. А., Данилов В. Н. История Саратовского университета. 1909–2009. В 2 т. Т. 1. 1909–1945. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2009. 296 с.
2. Хотеев В. «Уравновешенная натура духовного европейца» (министр народного просвещения А. А. Мануйлов) // Высшее образование в России. 2001. № 3. С. 118–132.
3. Зёрнов В. Д. Физический институт Императорского Николаевского университета в Саратове // Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер. Физика. Т. 14. Вып. 1. С. 53–58.
4. Зёрнов В. Д. Записки русского интеллигента / публ., вступ. статья, коммент. и указ. имен В. А. Соломонова; под ред. А. Е. Иванова. М. : Индрик, 2005. 400 с.
5. Научное наследство. М. : Наука, 1990. Т. 15: Научная переписка П. Н. Лебедева / сост. и авт. коммент. Е. И. Погребыска, отв. ред. В. А. Фабрикант. 501 с.
6. Аникин В. М. «Фабрика молодых физиков» П.Н. Лебедева и Саратовский университет // УФН. 2016. Т. 186, вып. 2. С. 169–173.
7. Аврус А.И., Саунин И.В., Соломонов В.А. Саратовцы – академики и члены-корреспонденты Российской академии наук: Библиографические очерки. Саратов : Сателлит, 2005. С. 204–208.
8. Голубков П. В. Константин Александрович Леонтьев // УФН. 1932. Т. 12, вып. 4. С. 501–505.
9. Аникин В. М. «Приобретать умение делать физические измерения и исследования»: к 100-летию физического образования и физической науки в Саратове // Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер. Физика. Т. 14. Вып. 1. С. 53–58.
10. Усанов Д. А., Аникин В. М. Саратовские научные и педагогические школы по физике (к 80-летию образования Саратовской области) // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2016. Т. 16, вып. 3. С. 178–190.
11. Аникин В. М., Усанов Д. А. Николай Николаевич Семёнов: волжские сюжеты жизни // Известия Саратовского университета. Нов. сер. Сер. Физика. 2016. Т. 16, вып. 2. С. 109–121.
12. Аникин В.М. Послесловие к юбилею физического факультета СГУ // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 248–252.
13. Аникин В.М. Физический факультет в XXI веке // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2014. Т. 14, вып. 2. С. 65 – 71.
14. Аникин В.М. Физика в Саратовском университете. К 100-летию физического института и 70-летию физического факультета // Гетеромагнитная микроэлектроника : сб. науч. тр. / под ред. проф. А. В. Ляшенко. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2014. Вып. 16. С. 78 – 84.
15. Аникин В. М. Физический факультет : памятные даты // Вопросы прикладной физики: межвуз. науч. сб. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2015. Вып. 22. С. 3–8.
16. Аникин В.М. «Перед нами открылся новый увлекательный мир науки...». К 60-летию присуждения Нобелевской премии Н. Н. Семёнову // Вопросы прикладной физики: межвуз. науч. сб. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2016. Вып. 23. С. 63–68.

ON THE BEGINNING OF PHYSICAL SCIENCE AND HIGHER PHYSICAL EDUCATION IN SARATOV

V. M. Anikin

Saratov National Research State University named after N. G. Chernyshevsky

The article gives brief information about the events at the beginning of the 20th century and people who initiated professional physical education and physical science in Saratov.

ПЕРВАЯ КАФЕДРА НА БАЗЕ АКАДЕМИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА

В. М. Аникин

Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н. Г. Чернышевского*Аникин Валерий Михайлович*, д.ф.-м.н., профессор, декан физического факультета

Об истории, опыте и достижениях в научной, образовательной и методической деятельности кафедры компьютерной физики и метаматериалов Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН.

Введение

В последние годы заметно увеличилось число университетских кафедр, создаваемых на базе научно-исследовательских, научно-производственных, чисто образовательных, чисто производственных и иных организациях. «Зеленый свет» базовым кафедрам открыли утвержденные Минобрнауки РФ документы [1,2]. Цель создания базовых кафедр очевидна – «укрепление связи университетов с жизнью».

Первый в России филиал кафедры в академическом институте

Ранее «базовые кафедры» часто существовали в формате филиалов кафедр. Нельзя не отметить, что одним из первых в стране филиалов кафедр в научных учреждениях явился филиал кафедры физики плазмы физического факультета Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского (СГУ имени Н. Г. Чернышевского). Он был открыт 23 декабря 1986 г. совместным приказом Министерства высшего и среднего специального образования РСФСР и Президиума Академии наук СССР.

Этот замечательный документ помещен в Приложение статьи. Подписанию этого документа предшествовало заключение Договора об организации филиала кафедры в Саратовском филиале Института радиотехники и электроники Академии наук СССР. Данный Договор был утвержден 20 июля 1986 г. начальником Управления кадров АН СССР, а 24 августа того же года – начальником Главного управления университетов, экономических и юридических вузов Минвуза РСФСР. Договор подписан: со стороны Саратовского государственного университета – ректором СГУ доктором технических наук профессором Анатолием Михайловичем Богомолковым, деканом физического факультета СГУ доктором физико-математических наук Валерием Викторовичем Тучиным, заведующим кафедрой физики плазмы доцентом (впоследствии - профессором) Александром Федоровичем Голубенцевым; со стороны Саратовского филиала Института радиотехники и электроники АН СССР – директором Института академиком Юрием Васильевичем Гуляевым, руководителем Саратовского филиала ИРЭ РАН кандидатом технических наук Геннадием Тимофеевичем Казаковым, зав. лабораторией СФ ИРЭ РАН, доктором физико-математических наук, профессором Николаем Ивановичем Синециным.

На основании приведенных документов 9 февраля 1987 г. был издан совместный приказ СГУ и СФ ИРЭ РАН об организации филиала кафедры физики

плазмы СГУ в СФ ИРЭ РАН, где в частности,

1) декану факультета назначался порядок конкурсного отбора студентов на филиал кафедры;

2) руководителем филиала кафедры назначался проф. Н.И. Синецин;

3) декану факультета, заведующему кафедрой и заведующему филиалом кафедры поручалось организовать на филиале кафедры интенсивную целевую подготовку специалистов (ЦИПС) со специализацией в области волновой электроники и плазмы твердого тела, автоматизации научных исследований и технологических процессов;

4) проректору по учебной работе СГУ, заведующему кафедрой физики плазмы и руководителю филиала кафедры поручалось разработать рабочие учебные программы для обучения на филиале кафедры по дисциплинам: «Современное состояние и перспективы развития СВЧ-электроники», «Физика и техника СВЧ- и оптических полупроводниковых приборов», «Физические основы акустоэлектроники», «Волны в магнитоупорядоченных средах и устройства обработки сигналов на их основе», «Электромагнитные колебания и волны в диэлектрических, полупроводниковых и плазменных направляющих структурах», «Физика, техника и технология современной микроэлектроники». Предусматривалось чтение лекций, проведение семинаров и организаций двух специальных лабораторий на базе научно-исследовательской аппаратуры СФ ИРЭ.

Кафедра - «родительница» филиала

В 1952 г. приказом Министерства высшего образования СССР в Саратовском университете были открыты три новых выпускающих кафедры – кафедра электроники (ныне кафедра электроники, колебаний и волн), кафедра физики вакуума и электровакуумных технологий (ныне кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН) и кафедра электро- и радиотехники (ныне кафедра радиотехники и электродинамики). Новые кафедры «предназначались» для второго физического факультета СГУ – радиофизического. Инициаторами создания новых кафедр были набиравшие мощь предприятия электронной промышленности Саратова. Ранее образованной кафедре радиофизики (ныне – кафедра радиофизики и нелинейной динамики) для «секретности» была присвоена литера «А», кафедре электроники – литера «Б», кафедре физики вакуума и электровакуумных технологий – литера «В», кафедре

ЮБИЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В САРАТОВЕ

электро- и радиотехники – литера «Г».

Впоследствии кафедра физики вакуума и электровакуумных технологий меняла свое название, следуя за изменением учебных планов и научных направлений деятельности своих сотрудников [3]. В 1986 г. она именовалась кафедрой физики плазмы (одноименный филиал и был открыт в СФ ИРЭ РАН). А в 1991 г. кафедра и ее филиал в СФ ИРЭ РАН стали именоваться соответственно кафедрой и филиалом кафедры вычислительной физики и автоматизации научных исследований.

Совместная учебная и научная работа кафедры и ее филиала в 1997-2002 гг. осуществлялась в рамках Федеральной целевой программы "Интеграция высшего образования и фундаментальной науки". В 1997 г. кафедра вычислительной физики и ее филиал в Саратовском филиале Института радиотехники и электроники (ныне – имени академика В.А. Котельникова) РАН выиграли грант Федеральной целевой (имевшей статус президентской) программы «Интеграция высшего образования и фундаментальной науки». Это был первый коллективный грант не только для Саратовского государственного университета, но и для нескольких высших учебных заведений и академических учреждений г. Саратова. И нужно отметить то обстоятельство, что «тандем» кафедра вычислительной физики – филиал кафедры в ИРЭ РАН стал ядром проекта, благодаря которому

условием участия в конкурсе грантов было наличие филиала кафедры в учреждении РАН. А такой филиал кафедры вычислительной физики был создан в СФ ИРЭ РАН, как говорилось, в 1986 г. Обязанности координатора – ответственного исполнителя программы выполнял доцент (впоследствии – профессор) кафедры В. М. Аникин.

Главный системный эффект программ «Фундаментальные исследования и высшая школа», как представляется, состоял в сохранении и поддержке научных школ и научно-педагогических коллективов высших учебных заведений. Грантами ФЦП «Интеграция» поддерживался именно *коллективный* принцип организации научных исследований и совершенствования образовательного процесса. В этой связи можно вспомнить высказывание академика А.В. Гапонова-Грехова о роли коллективного творчества: «В нынешней очень непростой ситуации важно сохранить коллективный принцип организации науки. Исследовательский процесс – это, с одной стороны, свобода индивидуального творчества, вдохновение; с другой – жесткая регламентация коллективного труда. Эти две составляющие исследовательского процесса наиболее гармонично сочетаются в научной школе – коллективе ученых, объединенных некими общими идеями, целями, взглядами на научное творчество и, может быть, даже на жизнь» [4].



последний и состоялся. Дело в том, что обязательным

Фотография сотрудников кафедры по случаю присуждения проф. Н.И. Синицыну Государственной премии в области науки и техники (2000). В первом ряду (слева направо) – Бородина И.А., Макарова В.И., Синицын Н.И., Шишкина В.Н., Ноянова С.А., во втором ряду – Аникин В.М., Петросян В.И., Мешков О.Ф., Наянов В.И., Ноянов Ю.В., Голубенцев А.Ф., Попов В.В., Мысенко Б.И., Филимонов Ю.А., Аркадакский С.С.

Так во второй половине 80-х годов прошлого века в области высшего образования в СССР на практике стала реализовываться плодотворная концепция об интеграции научно-педагогических кадров в целях повышения уровня подготовки специалистов научно-исследовательского профиля посредством открытия в академических учреждениях и на лучших научно-производственных организациях филиалов кафедр высших учебных заведений.

С созданием филиала студенты кафедры получили

возможность слушать лекции ведущих специалистов ИРЭ РАН по различным направлениям вакуумной и твердотельной электроники, магнитобиологии, знакомиться с современным уникальным научным оборудованием, приобщаться к научной деятельности. С начала создания филиала кафедры его бессменным руководителем являлся доктор физико-математических наук профессор Николай Иванович Синицын, Заслуженный деятель науки Российской Федерации, лауреат Государственной премии РФ. В

2003–2004 гг. он же исполнял обязанности заведующего кафедрой.

О результатах сотрудничества кафедры и академического института рассказывалось на страницах журнала «Высшее образование в России» [5]. В 2006 г. при кафедре был создан совместный учебно-научный и внедренческий центр СГУ и ОАО «Волгомост» «Автоматизация научных исследований и производственных процессов».

Кафедра на базе СФ ИРЭ имени

В.А. Котельникова РАН

В 2012 г. формат взаимодействия физического факультета Саратовского национального исследовательского государственного университета и Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН изменился. В связи с упразднением филиала кафедры вычислительной физики и автоматизации научных исследований решением Ученого совета СГУ была образована базовая кафедра компьютерной физики и метаматериалов физического факультета СГУ в Саратовском филиале Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН. В мае 2016 г. решением Ученого совета СГУ кафедра получила наименование «Кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН».

При реорганизации кафедры полностью выполнены требования названных выше приказов Минобрнауки РФ, а также Устава федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского»:

а) реализуемая физическим факультетом СГУ образовательная программа соответствует научным направлениям деятельности СФ ИРЭ имени В. А. Котельникова РАН;

б) для кафедры выделено специальное помещение; на базе научного оборудования СФ ИРЭ организованы учебные лаборатории;

в) обеспечены безопасные условия обучения;

г) в учебные программы внесен специальный раздел, оговаривающий наличие и соблюдение специальных условий для получения образования обучающимися с ограниченными возможностями здоровья;

д) обеспечены кадровые и материальные условия для проведения практических занятий, семинаров, лабораторных практикумов, учебных, научно-исследовательских, производственных и преддипломных практик и иных видов занятий, предусмотренных учебным планом;

е) обеспечены руководство выпускными квалификационными работами, определение их тем и рецензирование, безвозмездное предоставление студентам доступа к информации, необходимой для подготовки выпускных квалификационных работ.

Кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе СФ ИРЭ имени В. А. Котельникова РАН призвана способствовать поддержанию высокого

уровня подготовки выпускников, обладающих общекультурными и профессиональными компетенциями в области физики, компьютерных методов физики и ориентированных на научно-исследовательскую деятельность. Задача кафедры – подготовка бакалавров, магистров и аспирантов высокой квалификации для научно-исследовательской деятельности в области физики для российских научно-исследовательских и научно-производственных организаций.

Кафедра обеспечивает полный набор существующих уровней высшего университетского образования и все виды учебных занятий. Основной кафедральный профиль *бакалавриата* – «Компьютерная физика» по направлению подготовки 03.03.02 «Физика». Совместно с кафедрой радиоп физики и нелинейной динамики кафедра принимает участие в подготовке *бакалавров* по направлению «11.03.02 Инфокоммуникационные технологии и системы связи» (профиль подготовки «Инфокоммуникационные технологии в системах радиосвязи»).

На кафедре ведется также подготовка *бакалавров* по профилю «Фундаментальная и экспериментальная физика» направления подготовки 03.03.02 «Физика» и *магистров* по направлению подготовки 03.04.02 «Физика» (профили «Физика оптических и лазерных явлений», «Магнитоэлектроника в системах защиты информации и безопасности», «Теоретическая и экспериментальная физика»). Кроме того, кафедра обеспечивает проведение учебных занятий по общему курсу физики на различных факультетах Саратовского университета.

Подготовка *аспирантов* на кафедре осуществляется по направлению 03.06.01 «Физика и астрономия» (направленности: 03.04.03 «Радиофизика», 03.04.21 «Лазерная физика», 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах»).

Подготовка студентов на кафедре ведется на основе тесной связи учебного процесса и научных исследований, что помогает формировать выпускников университета, сочетающих профессиональные знания и способность самостоятельно решать задачи в фундаментальной и прикладной науке.

К учебным занятиям со студентами филиала кафедры привлекались и привлекаются лучшие специалисты СФ ИРЭ имени В. А. Котельникова РАН – доктора наук Н.И. Сеницын, В.В. Попов, Б.Д. Зайцев, Ю.А. Филимонов И.Е. Кузнецова и Р.К. Яфаров, кандидаты наук Г.Т. Казаков, Г.В. Торгашов, А.Г. Веселов, Ю.А. Морозов, И.А. Бородин и другие.

Использование в образовательно-научном процессе в СГУ научно-технического потенциала Саратовского филиала ИРЭ имени В. А. Котельникова РАН способствует поднятию качества образования на физическом факультете на новый, а порой и на уникальный уровень. Так, на базе научных лабораторий СФ ИРЭ имени В. А. Котельникова РАН были организованы практикумы по волновой электронике и физике и технологии микро- и нанoeлектроники. Эти практикумы совершенствуются по настоящее время, причем лабораторные работы

поставлены на реальных технологических и измерительных установках, использующихся для проведения текущих научных исследований.

К примеру, студенты знакомятся с работой аппаратуры сканирующей туннельной микроскопии, молекулярно-лучевой жидкофазной эпитаксии, плазменно-химической обработки материалов, рентгеноструктурного анализа и т.д. Создание и функционирование подобной приборно-экспериментальной базы непосредственно в вузе, сопровождаемое подготовкой квалифицированного персонала, представляет трудно осуществимую задачу.

Методическое обеспечение практикумов в СФ ИРЭ сопровождалось изданием учебных пособий. В частности, в издательстве Саратовского университета увидели свет уникальные, не потерявшие актуальность, пособия [6–8].

Основные направления исследований

Научные исследования сотрудников кафедры проводятся в области микро-и нанотехнологий, физической электроники, нелинейной физики, лазерной физики, метаматериалов, нанофотоники. Полученные результаты отражены во многочисленных статьях и монографиях, изданных, в частности, в издательстве ФИЗМАТЛИТ [9,10].

Прикладные аспекты проведенных научных исследований связаны с изучением физических свойств новых материалов на основе углерода, развитием технологий по созданию автоэмиссионных источников тока и плоских панельных дисплеев, аппаратуры для лечения и функциональной диагностики с использованием низкоинтенсивных электромагнитных колебаний в миллиметровом диапазоне длин волн, внедрением автоматизированных систем мониторинга в мостостроении, изучением трансформационных свойств оптических волноводов, изготовленных из халькогенидных стекол, развитием методов нелинейной динамики и их применением к анализу и обработке сигналов различной природы, в том числе для целей криптографии.

В 2000 г. Государственной премией РФ отмечена работа проф. Н.И. Сеницына в области медицинской радиоэлектроники. Им же был разработан и читался на физическом факультете уникальный курс «Электромагнитобиология». В 2002 г., за развитие новых технологий в мостостроении, основанных, в частности, на автоматизированной диагностике состояния подводных объектов, лауреатом Премии Правительства РФ стал доцент кафедры В.И. Наянов.

Научная работа студентов и аспирантов кафедры проводится под руководством профессорско-преподавательского состава кафедры. Результаты работ представляются на научных конференциях университетского, всероссийского и международного рангов.

Кафедра участвует в подготовке и проведении ежегодных научных конференций, проводимых на базе СГУ и ИРЭ РАН, в которых принимают участие бакалавры, магистранты и аспиранты кафедры. В частности, в начале сентября в СФ ИРЭ, начиная с 2005 г., проводится ежегодная всероссийская

конференция молодых ученых «Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика». Студенты и аспиранты кафедры принимают участие и в международных конференциях, проводимых в других городах.

Всемирная конференция IVESC

Отдельной позиции в характеристике научного взаимодействия СГУ и СФ ИРЭ РАН заслуживает проведение в Саратове летом 2002 г. (по специальному гранту «Интеграция») Четвертой специальной конференции по вакуумным источникам электронов (Fourth IEEE International Vacuum Electron Sources Conference, IVESC), в которой приняли участие ведущие специалисты по вакуумной микро- и наноэлектронике из 16 стран мира. Работа этой конференции освещалась в публикациях [11,12].

Методическая работа по подготовке выпускных квалификационных работ бакалавров, магистрантов и аспирантов

С учетом общей направленности подготовки выпускников для научно-исследовательской деятельности в процессе работы с бакалаврами, магистрантами и аспирантами серьезное внимание уделяется качеству представления квалификационных работ. В систематическом виде соответствующие методические рекомендации представлены в пособиях [13,14]. Отдельные вопросы презентации выпускных квалификационных работ отражены в [15–25].

Некоторые итоги

Предпосылкой для создания в 2012 г. кафедры компьютерной физики и метаматериалов физического факультета Саратовского национального исследовательского университета имени Н. Г. Чернышевского на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН явился накопленный многолетний опыт образовательно-научного взаимодействия между физическим факультетом и академическим институтом.

Студенты старших курсов бакалавриата, магистранты и аспиранты получают знания по новейшим научным направлениям физики, овладевают навыками научной теоретической и экспериментальной работы на современном научном уровне, приобретают умение представить полученные ими научные результаты на отечественных и международных конференциях, развивают в себе компетенции пополнять и использовать свои знания как в различных разделах физики, так и в междисциплинарных областях науки.

С 1986 г. на базе СФ ИРЭ РАН прошли подготовку около 300 студентов физического факультета. Подготовка студентов была ориентирована на научно-исследовательскую деятельность, которая, собственно, и составляет содержание работы академического учреждения, а также предусмотрена федеральными государственными образовательными стандартами.

Наиболее полезными видами учебных занятий, проводимых непосредственно на базе СФ ИРЭ, являются учебные, научно-исследовательские, производственные и преддипломные практики, работа

в лабораторных практикумах, созданных на базе действующего научного оборудования СФ ИРЭ, чтение специальных курсов, авторами-разработчиками которых являются сотрудники ИРЭ, руководство выпускными квалификационными работами, научное руководство аспирантами.

За годы организации учебного процесса на базе СФ ИРЭ имени В.А. Котельникова РАН защищены 5 докторских (Аникин В.М., Голубенцев А.Ф., Зайцев Б.Д., Кузнецова И.Е., Попов В.В.) и 10 кандидатских диссертаций (после обучения в аспирантуре, последовавшего за окончанием университета).

В 2016 г. защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук аспирант (в настоящее время – ассистент) кафедры компьютерной физики и метаматериалов А. С. Пластун. Аспиранты кафедры С. Корсакова и Д. Животков прошли зарубежные стажировки. Аспиранты К. Машинский, М. Моисеенко, В. Мельникова имеют публикации в высокорейтинговых научных журналах, выступают с докладами на международных научных конференциях, в том числе зарубежных. Несколько аспирантов и выпускников кафедры являются лауреатами Премии Правительства Российской Федерации за научные достижения. В настоящее время еще 3 аспиранта кафедры готовятся к защите кандидатских диссертаций.

На кафедре ведется регулярная методическая работа по повышению презентационного уровня диссертаций. Несколькими изданиями вышло пособие для аспирантов «Диссертация в зеркале автореферата» (3-е издание, 2013–2014 гг. издательство ИНФРА–М, Москва, тираж 500 экз.). Научно-исследовательские статьи публикуются в журналах «Alma mater (Вестник высшей школы)», «Известия вузов. Физика», «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика» и других изданиях.

Ежегодно проводилась совместная работа по научным грантам, исполнителями которых являлись сотрудники ИРЭ и кафедры. В 2000 г. Государственной премией в области науки и техники была отмечена научно-исследовательская и инновационная деятельность профессора кафедры, заместителя директора по научной работе СФ ИРЭ Н. И.

Синицына в области медицинской радиоэлектроники. Инновационные методы работы в области строительства крупных мостовых переходов через реки Волга и Кама в 2002 г. отмечены Премией Правительства РФ в области науки и техники.

В 2012–2016 гг. сотрудниками кафедры изданы 3 монографии, опубликовано свыше 100 статей в изданиях, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ, в том числе 36 статей – в журналах, входящих в международные базы данных Web of Science, Scopus; сделано 130 докладов на международных конференциях; получено 3 патента на изобретения, в том числе в США и Японии; издано 5 методических пособий. Соавторами 40 работ за 2012–2016 гг. являются студенты и аспиранты.

Учебная деятельность кафедры строится в соответствии с федеральными образовательными программами. Регулярно проводится актуализация рабочих учебных планов и рабочих программ преподаваемых дисциплин.

История и деятельность кафедры компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН освещалась в публикациях о различных этапах развития физического факультета СГУ [26–32]. Следует обратить внимание, что составной частью этой истории являются летописи деятельности кафедр, вошедших с течением времени в состав базовой кафедры, но первоначально функционировавшие как самостоятельные. Это кафедра химической физики, созданная в 1958 г. профессором А. Д. Степуховичем (переименована в 1997 г. в кафедру прикладной оптики и спектроскопии, заведующий кафедрой профессор В. И. Березин) и кафедра прикладной физики, выделенной в 1986 г. из состава кафедры общей физики (первый заведующий – профессор В. С. Кошелев, с 1998 по 2015 кафедрой руководил профессор А. С. Шаповалов).

Замечательными страницами истории этих кафедр является прямое или опосредованное участие в их формировании и развитии великих русских физиков – Петра Николаевича Лебедева [33,34] и Николая Николаевича Семёнова [35–38].

Библиографический список

1. Порядок создания образовательными организациями, реализующими образовательные программы высшего образования, в научных организациях и иных организациях, осуществляющих научную (научно-исследовательскую) деятельность, кафедр, осуществляющих образовательную деятельность: приказ Минобрнауки России № 159 от 06.03.2013 // Рос. газ. 2013. 25 июля.
2. Порядок создания профессиональными образовательными организациями и образовательными организациями высшего образования кафедр и иных структурных подразделений, обеспечивающих практическую подготовку обучающихся, на базе иных организаций, осуществляющих деятельность по профилю соответствующей образовательной программы: приказ Минобрнауки России № 958 от 14.08.2013 // Рос. газ., 2013. 20 сент.
3. Салий И. Н. К 60-летию создания физического факультета Саратовского государственного университета им. Н. Г. Чернышевского (фрагменты истории) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2005. Т. 5, вып. 1. С. 5 – 38.
4. Гапонов-Грехов А.В. И в XXI веке в авангарде будет физика // Вестник РАН. 2003. Т. 73. №1. С. 30.
5. Трубецков Д.И., Аникин В.М. Образование плюс наука: Первый коллективный грант СГУ // Высшее образование в России. 2007. № 6. С. 156-160.

ЮБИЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В САРАТОВЕ

6. Практикум по волновой электронике и микроэлектронике / под ред. Ю. В. Гуляева и Н. И. Сеницына : в 4 ч. Ч. 1. Волновая электроника; Ч. 2. Физика и технология современной микроэлектроники; Ч. 3. Технология микроэлектроники; Ч. 4. Технология микроэлектроники. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 1997–2000. 44 с.
7. Зайцев Б. Д. Акустические волны в твердых телах: учеб. пособие для студентов старших курсов физического факультета : в 2 ч. Саратов : изд-во Сарат. ун-та, 1997. Ч. 1. 150 с. Ч. 2. 150 с.
8. Попов В. В. Введение в электродинамику двумерной электронной плазмы, Саратов: изд-во Сарат. ун-та 2000. 19 с.
9. Наянов В.И. Многополевые солитоны. М.:ФИЗМАТЛИТ, 2006. 278 с.;
10. Аникин В.М., Голубенцев А.Ф. Аналитические модели детерминированного хаоса. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 328 с.
11. Applied Surface Science. Special Issue. 4th International Vacuum Electron Sources Conference in Saratov, Russia, July 15-19, 2002 / Eds. Georg Gaertner, Valery M. Anikin, Nikolai I. Sinitsyn, Raouf Z. Bakhtizin, Yuri V. Gulyaev. 2003. Vol. 215, nos. 1–4. Pp. 1-318..
12. Аникин В.М. IVESC в Саратове // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2007. Т. 7, вып. 1. С. 75–80.
13. Аникин В.М., Усанов Д.А. Диссертация в зеркале автореферата. 3-е изд. М. : ИНФРА-М, 2013, 128 с.
14. Аникин В. М., Пойзнер Б. Н. Диссертация: грани творчества и ... Сер. "След вдохновений и трудов упорных...". Вып. 8 / Под ред. и с предисл Д. И. Трубецкова. Саратов : ООО ИЦ "Наука", 2017. 142 с.
15. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Государственная итоговая аттестация аспиранта: от формальности к превентиве // Alma Mater (Вестник высшей школы). 2015. № 11. С. 17–21.
16. Аникин В.М., Измайлов И.В., Пойзнер Б.Н., Соснин Э.А. Защищаемое положение в диссертации как трансдисциплинарный научный жанр // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58, № 8/3. С. 300–303.
17. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Научное руководство аспирантами: «внутренние» и «внешние» регуляторы // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2015. Т. 15, вып. 1. С. 83–88.
18. Аникин В.М., Измайлов И.В., Пойзнер Б.Н. Диссертанту о воспринимаемости, числовой оценке и защите научных результатов // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2014. Т. 22. № 6. С. 25–34.
19. Аникин В.М., Измайлов И.В., Пойзнер Б.Н. Диссертация: характеристики научности // Гетеромагнитная микроэлектроника : сб. науч. тр. / под ред. проф. А. В. Ляшенко. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 2014. Вып. 16. С. 105 – 118.
20. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. «Предзащита» диссертации: формальные требования и традиции // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2014. Т. 22, № 2. С. 95–102.
21. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Коммуникативная функция автореферата и уровень лингво-дисциплинарной компетенции диссертанта // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2013. Сер. Физика. Т. 13, вып. 1. С. 80-86.
22. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Какова природа интересного, или дефиниции науки и научности – эпистемологический компонент профессиональной компетенции (радио)физика как инженера исследователя // Известия вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 10/3. С. 118-120.
23. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Эпистемологические упражнения магистранта: формулировка и оценка научных положений в своей диссертации // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55, № 8/3. С. 213-214.
24. Аникин В.М., Пойзнер Б.Н. Как диссертанту аргументировать достоверность научных положений и результатов, выносимых на защиту // Известия вузов. Физика. 2011. Т. 54. № 6. С. 105–108.
25. Аникин В.М., Усанов Д.А. Автореферат диссертации: функции, структура, значимость // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2008. Т. 8. № 2. С. 61-73.
26. Аникин В.М. Послесловие к юбилею физического факультета СГУ // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16, вып. 4. С. 248-252.
27. Усанов Д.А., Аникин В.М. Саратовские научные и педагогические школы по физике (к 80-летию образования Саратовской области) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2016. Т. 16, вып. 3. С. 178-190. DOI: 10.18500/1817-3020-2016-3-178-190.
28. Аникин В.М. Физический факультет СГУ: памятные даты // Вопросы прикладной физики: межвуз. науч. сб. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 2015. С. 3–7.
29. Аникин В.М. Физический факультет в XXI веке // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика. 2014. Т. 14, вып. 2. С. 65 – 71.
30. Аникин В.М. Физика в Саратовском университете. К 100-летию физического института и 70-летию физического факультета // Гетеромагнитная микроэлектроника : сб. науч. тр. / под ред. проф. А. В. Ляшенко. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 2014. Вып. 16. С. 78 – 84 .
31. Аникин В.М. Физическому факультету – 65 лет // Гетеромагнитная электроника: сб. науч. трудов / под ред. проф. А.В. Ляшенко. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2011. Вып. 9. С. 4-16.
32. Аникин В.М. Александр Федорович Голубенцев: эскиз к портрету // Вопросы прикладной физики: Межвуз. науч. сб. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2004. Вып.11. Памяти А.Ф. Голубенцева / Под ред. Ю.В. Гуляева, Н.И. Сеницына, В.М. Аникина. С. 6-20.

33. Аникин В.М. «Фабрика молодых физиков» П.Н. Лебедева и Саратовский университет // УФН. 2016. Т. 186, вып. 2. С. 169-173.
34. Феномен научной школы: история, типология получения и передачи знаний, психология коммуникаций / В.М Аникин., Б.Н., Пойзнер, Э.А., Соснин, А.В Шувалов; под общ. ред. В. М. Аникина. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2015. 232 с.
35. Аникин В.М. «Перед нами открылся новый увлекательный мир науки...». К 60-летию присуждения Нобелевской премии Н. Н. Семёнову // Вопросы прикладной физики: Межвуз. науч. сб. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, Саратов, 2016, вып. 23. С. 63-70.
36. Аникин В.М. Физик-инноватор, земляк, учитель и друг Н. Н. Семёнова Владимир Иванович Кармилов // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16. № 1. С. 44-54.
37. Аникин В.М., Усанов Д.А. Николай Николаевич Семёнов: волжские сюжеты жизни // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2016. Т. 16, вып. 2. С. 109–121.
38. Аникин В.М. Первая Нобелевская (к 60-летию присуждения Нобелевской премии академику Н. Н. Семёнову) // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2017. Т. 17, вып. 3. С. 201–211.

FIRST DEPARTMENT ON THE BASIS OF THE ACADEMIC INSTITUTE

VM Anikin
Saratov State University

On the history, experience and achievements in the scientific, educational and methodical activity of the Department of Computer Physics and Metamaterials of the Saratov National Research University named after NG Chernyshevsky on the basis of the Saratov branch of the VA Kotelnikov's Institute of Radio Engineering and Electronics of RAS.

Приложение

РЕШЕНИЕ-ПРИКАЗ

23 декабря 1986 г. Москва

№ 209/817

Об организации филиала кафедры физики плазмы
Саратовского государственного университета
им. Н.Г. Чернышевского

В целях улучшения подготовки кадров в области физики Президиум Академии наук СССР и Министерство высшего и среднего специального образования СССР ПРИКАЗЫВАЮТ:

1. Организовать филиал кафедры физики плазмы Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского Минвуза РСФСР на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники Академии наук СССР для подготовки кадров по специальности 2016 – Физика со специализацией в области волновой электроники и плазмы твердого тела, автоматизации научных исследований и технологических процессов микроэлектроники.

2 Ректору Саратовского государственного университета имени Н.Г. Чернышевского т. Богомолу А.М.:

2.1. Совместно с директором Саратовского филиала Института радиотехники и электроники Академии наук СССР Казаковым Г.Т. разработать и утвердить рабочие учебные программы курсов филиала кафедры до 31 декабря 1986 г.

2.2. Установить штаты филиала кафедры в соответствии с объемом работы в пределах штатов и фонда заработной платы, выделенных Университету.

3. Главному управлению университетов, экономических и юридических вузов Минвуза РСФСР выделять ежегодно соответствующие лимиты на штатное совместительство для комплектования преподавателями филиала кафедры.

4. Внести соответствующие изменения в Устав Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского.

5. Контроль за выполнением настоящего решения-приказа возложить на Управление кадров Академии наук СССР и Главное управление университетов, экономических и юридических вузов Минвуза РСФСР.

Вице-президент
Академии наук СССР
Академии
Е.П. Велихов

Министр высшего и среднего
специального образования РСФСР
академик
И.Ф. Образцов

**ЭКСПЕРИМЕНТ ЗА ПЯТЬДЕСЯТ ЛЕТ
(ЕДИНСТВЕННАЯ В МИРЕ РУЧКА СО СКВОЗНЫМ ОТВЕРСТИЕМ,
ПРОБИТЫМ РУБИНОВЫМ ЛАЗЕРОМ)**

М.А. Старшов

Саратовский государственный университет

Старшов Михаил Александрович, зав учебно-исследовательской лабораторией

Описан один эпизод начального периода работ по созданию импульсного лазера на кафедре оптики Саратовского университета.

В 1960 г Теодор Мейман получил короткую вспышку красного света из кристалла рубина. Открылась эра лазеров, источников особого, когерентного, света. Именно когерентность обеспечивает уникальные свойства и широчайшие практические применения лазеров. Проще всего сказать, что каждая частичка лазерного света действует синхронно, «идёт в ногу» со всеми остальными.

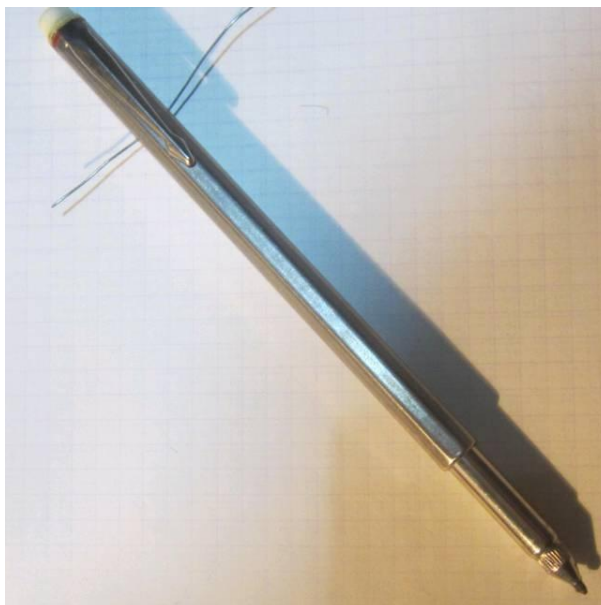
Новые источники излучения сразу привлекли внимание физиков всего мира, о них много писали и говорили, хотя понимания было очень немного. Заведующий кафедрой оптики Саратовского университета профессор Марк Львович Кац тоже загорелся свежей идеей в оптике, и привлёк новых людей, молодых и не связанных с проблематикой кафедры. И вот на этом чистом месте в конце 1963 г начались работы по созданию действующего прибора. Кое-что удалось купить, достать, сделать руками трёх ассистентов – Г.И. Асеева, Ю.П. Турбина и автора этих строк, а также лаборанта П.А. Булушева. Никто из нас не видел живого лазера и не имел никакого опыта в оптике, и всё-таки к сентябрю 1965 г генератор света был собран. И, естественно, не работал. Не догадываясь об этом, мы были примерно в таком же состоянии, как создатель первого действующего генератора света с новыми, неизвестными свойствами американский физик, уже упомянутый Теодор Мейман. Спустя много лет он напишет: «Когда я заканчивал конструирование лазера, Боб Хеллварт, один из моих коллег в отделе атомной физики, спросил меня: “А КАК ТЫ УЗНАЕШЬ, ЧТО ОН ЗАРАБОТАЛ?”... что же конкретно я надеялся увидеть? Я планировал регистрировать красный свет через маленькое отверстие в выходном серебряном зеркале, и ожидал увидеть три эффекта: уменьшение времени затухания флуоресцентного уровня, сжатие излучения в пучок и значительное уменьшение спектральной ширины красного света» [1]. Мы тоже ожидали заметного сужения светового пучка и резкого увеличения его яркости.

В нашей конструкции зеркала были внешние, не на торцах рубинового стержня, а на отдельных стеклянных подложках с многослойным диэлектрическим покрытием. Но это требовало точной юстировки, оба зеркала надо было выставить строго перпендикулярно оптической оси кристалла рубина. Никто из нас не имел ни малейшего представления, как это можно сделать. Несколько месяцев шли мучительные поиски причин неудачи, изучался характер нового устройства, и, наконец, буквально в новогоднюю ночь на листе чертёжной

бумаги, прикреплённой к стене лаборатории, мы увидели не метрового диаметра надоевшее розовое пятно вспышки люминесценции рубина, а крохотную немыслимо яркую красную точку. Она длилась примерно тысячную долю секунды, но произвела на всех нас, четверых, потрясающее впечатление.

С того момента началась увлекательная работа по освоению и улучшению нового источника света. Уже в январе научились пробивать отверстия в тонких металлических пластинках, а для этого необходимо сфокусировать излучение на мишени. При ослепительной вспышке в тысячные доли секунды сделать это непросто. И вспышки можно было производить не чаще одной в пять-шесть минут, иначе драгоценный кристалл можно было перегреть и разрушить. Сравнивали действие мощного светового импульса на различные металлы. Вскоре освоили технику сверхкоротких импульсов, длительностью в несколько стомиллионных долей секунды.

И между делом, шутки ради, было пробито сквозное отверстие в металлическом корпусе новенькой авторучки-указки. Определённо, такая ручка существует в единственном экземпляре. Сегодня, спустя ровно полвека после того эксперимента выполняю и представляю фотографии этого отверстия (Рис.1).



На снимке в полном размере крохотное отверстие невозможно показать и разглядеть, и для убедительности через него пропущена тонкая проволока. А другой снимок сделан с более

близкого расстояния по другому направлению и подсветка светодиодным фонариком наглядно показывает проходящий насквозь свет (Рис.2).

Видно, что против ожиданий, отверстие имеет совсем не круглую форму, несмотря на острую фокусировку лазерного пучка с помощью короткофокусной линзы.



Прошло ровно полвека! С тех пор придумано и применяется широко во всех областях науки и техники огромное количество самых разных типов лазеров, и чего только не делают с их помощью, но пробить светом сквозное отверстие в тонкостенной металлической трубке диаметром около сантиметра, представляет непростую задачу. Храню как память и металлический рубль, впервые выпущенный к двадцатой годовщине великой победы в Отечественной войне, с крохотным воронкообразным отверстием точно над звёздочкой в гербе. Оно было пробито за одну вспышку лазера,

мощность которого удавалось наращивать едва ли не ежедневно. И показало, что сталь пробивается легче и эффективнее, чем вязкие медные сплавы.

А вот та юбилейная монета в честь двадцатилетия Победы, пробитая светом за одну короткую вспышку лазера весной 1966г. (Рис.3).



Видимо, во всех лабораториях лазерщики оценивали мощность своих приборов прежде всего по пробиванию бритвенных лезвий, начиная с одного, а потом и нескольких, сложенных в стопку. В затемнённой лаборатории это выглядело замечательно, снопом разлетались искры, раскалённые частички мгновенно испарённого металла. Мы быстро довели свой генератор света до способности пробивать стальной пинцет. Однако, сквозное отверстие в железном корпусе авторучки-указки кажется наиболее интересным событием. Правда, для этого было сделано два «выстрела».

Библиографический список

1. Мейман Т. Лазерная одиссея. // Природа. 2010, №5, С.56-64.

EXPERIMENT FOR FIFTY YEARS

M.A. Starshov

Saratov National Research University

One episode of an initial stage of works on creation of the pulse laser at the department of optics of the Saratov university is described.



О РОЛИ ПРИМЕРОВ В ИЗУЧЕНИИ ФИЗИКИ

В.В. Машников, Л.М. Минкин, А.С. Шаповалов

Саратовский государственный университет

Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент кафедры компьютерной физики и метаматериалов
Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов

Portland State University, USA

Минкин Леонид Моисеевич, профессор

Обсуждается важность использования в лекционных курсах по физике примеров действия физических законов и эффектов, развивающих интерес к предмету. Приведены соответствующие примеры.

Первые десятилетия 21 века характеризуются бурным ростом объёма информации. Это обстоятельство существенным образом влияет на содержание университетского курса физики. Стремление отразить новые явления или новые приложения уже открытых законов, требует иногда существенных корректировок читаемого материала, как по объёму, так и по содержанию. Многие оригинальные «толкования» и примеры значимых естественно-научных явлений природы постепенно исчезают из учебников и пособий.

Чтобы убедиться в вышесказанном, достаточно сравнить литературу [1-4] с изданиями последних лет. Согласно новым ФГОС ВО 3++ именно эта литература рекомендуется студентам. Заметим также, что основные разделы курса общей физики читаются студентам первого и второго курсов, уровень математической подготовки которых ещё недостаточно высок. Это затрудняет усвоение материала, создаёт чувство неуверенности и снижает уровень мотивации обучения. Компенсировать этот недостаток можно, вернув описание решающих экспериментов в физике, нетривиальные примеры проявления наиболее ярких явлений в природе, их использование в науке и технике. Здесь, естественно, возникает вопрос, где взять дополнительное учебное время для этого материала?

Во-первых, за счёт более компактного изложения теории, используя обобщённые методики [5], по возможности избегая повторов.

Во-вторых, можно синхронизировать семинарские занятия с лекционным курсом, пересмотреть содержание задач, отдавать предпочтение заданиям исследовательского характера.

В-третьих, практиковать задания самостоятельной работы студентов, полнее раскрывающие те или другие стороны природных явлений и эффектов. Рекомендовать студентам более широкое использование публикуемых учебно-методических разработок [5-9].

В механике, представляются интересными темы движения в поле тяготения, использование гироскопических эффектов в технике, проявление сил инерции в технических механизмах и приборах. Эти эффекты допускают обобщённый подход через описание термодинамической системы, позволяющей разбиение её на подсистемы с действием силовых полей различной природы. Общность описания поведения подобных подсистем можно показать и на качественном анализе конечных

результатов.

Функция распределения плотности молекул атмосферного воздуха (система в поле гравитационных сил), как известно, описывается формулой Больцмана, из которой следует, что атмосферное давление падает с ростом расстояния от поверхности Земли. Это приводит к возникновению силы Архимеда, направленной в сторону убывания давления (вверх).

Рассмотрим пример технической центрифуги, позволяющей производить разделения частиц разной массы, взвешенных в жидкости [4]. Пусть такая система находится в цилиндрическом сосуде с крышкой и дном. Из всех частиц выберем две для наблюдения: «тяжелую», утонувшую на дно сосуда и «лёгкую», плавающую на поверхность жидкости. Пока система находится в покое, вертикальные силы тяжести, сила Архимеда и реакции дна для «тяжелой» частицы в сумме равны нулю и частицы покоятся. Приведём систему во вращение, относительно вертикальной оси. В неинерциальной системе появятся центробежные силы инерции, направленные горизонтально от оси вращения к стенке сосуда. Функция распределения давления в жидкости аналогична функции Больцмана. Но давление падает в направлении к оси, т. е «низ» системы находится у стенки, а «верх» у оси. Такое распределение давления вызывает горизонтальную «силу Архимеда», направленную от стенки к оси, т.е. противоположно силе инерции. Сила Архимеда пропорциональна объёму частицы, силы инерции - её массе. Для «тяжёлых» частиц превалирует сила инерции, для «лёгких» сила Архимеда. «Легкие» частицы будут двигаться к оси, «тяжёлые» к стенке сосуда. Так происходит разделение частиц по массе.

Пример использования силы инерции Кориолиса реализуется в механизме, называемым гидродинамической муфтой сцепления. Она представляет собой два соприкасающихся диска, один из которых жестко связан с двигателем, другой с трансмиссией. В дисках циркулирует жидкость в противоположных направлениях. При увеличении оборотов двигателя диск прижимается к ведомому диску силой Кориолиса и также приводит его во вращение. Так как движение жидкостей в дисках противоположны, то силы инерции направлены навстречу. Такая система способна передавать тысячи киловатт мощности при К.П.Д. до 98%.

Весьма поучительные и оригинальные примеры имеют место в разделе «Молекулярная физика». Приведём некоторые из них, известные как явления

переноса. Под этими явлениями обычно понимают диффузию, внутреннее трение и теплопроводность. Классическая теория явлений переноса основывается на решении кинетических уравнения для газов [2] или на статистических методах получения функций распределения координат и скоростей (импульсов) молекул [5]. По конечному виду законы переноса в определённом смысле подобны. В явлении диффузии переносится масса молекул, а её поток пропорционален градиенту абсолютной концентрации соответствующей компоненты газовой смеси и направлен в сторону убывания концентрации. В явлении внутреннего трения передаётся импульс направленного движения молекул, а сила внутреннего трения пропорциональна градиенту скорости этого движения. В явлении теплопроводности переносится средняя тепловая энергия молекул, а её поток пропорционален градиенту температуры. Важно отметить, что коэффициенты переноса (все) зависят от средней длины свободного пробега λ и средней скорости теплового движения молекул, то есть зависят как от параметров состояния системы (P, T, \dots), так и от характера взаимодействия молекул (λ) между собой и со стенками сосуда. Если характерный размер сосуда, в котором находится газ, меньше средней длины свободного пробега молекул, то состояние газа называется *вакуумом*.

Рассмотрим некоторые явления переноса в разреженных газах (в состоянии вакуума) [1].

Пусть в части А сосуда находится газ, масса молекулы которого - m , давление - P и температура - T . В части В, отделённой от А перегородкой, газа нет. Прделаем в перегородке малое отверстие диаметром $d \ll \lambda$. При обычных условиях ($d \gg \lambda$) через отверстие устремился бы аэродинамический поток молекул (подобный потоку жидкости), пропорциональный разности давлений, скорости молекул, площади отверстия S и т.д. Это вызвало бы изменение параметров состояния газа около отверстия и, в конечном счёте, в части А. В условиях вакуума ($d \ll \lambda$) столкновения между молекулами перестают играть роль, всё определяется столкновениями со стенками сосуда (внутри отверстия). Теперь поток молекул газа через отверстие из части А в часть В может быть рассчитан по числу «молекулярных ударов» N за единицу времени по эквивалентной площадке S в равновесном (начальном) состоянии

$$N = \frac{1}{4} n \bar{v} S = n S \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} = C \frac{SP}{\sqrt{mT}}, \quad (1)$$

где

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi k}},$$

n – концентрация молекул, \bar{v} - средняя скорость теплового движения молекул, m – масса молекулы, k – постоянная Больцмана.

Поток молекул газа через малое отверстие в состоянии вакуума называется эффузионным потоком.

Полученное уравнение эффузии можно обобщить на случай, когда в разных частях сосуда находятся разные газы с массами молекул m_1, m_2 . Парциальные давления газов в разных частях сосуда соответственно равны $P_{1A}, P_{2A}, P_{1B}, P_{2B}$, а температуры – T_A, T_B .

Эффузионный поток N_1 газа 1 из А в В запишется так [1]:

$$N_1 = \frac{CS}{\sqrt{m_1}} \left(\frac{P_{1A}}{\sqrt{T_A}} - \frac{P_{1B}}{\sqrt{T_B}} \right). \quad (2)$$

Обратный поток N_2 газа 2 из В в А определится аналогичным выражением

$$N_2 = \frac{CS}{\sqrt{m_2}} \left(\frac{P_{2B}}{\sqrt{T_B}} - \frac{P_{2A}}{\sqrt{T_A}} \right), \quad (3)$$

а отношение потоков составит

$$\frac{N_1}{N_2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \frac{\sqrt{T_B} P_{1A} - \sqrt{T_A} P_{1B}}{\sqrt{T_A} P_{2B} - \sqrt{T_B} P_{2A}}. \quad (4)$$

Если в начальный момент времени

$$P_{2A} = P_{1B} = 0, \quad (5)$$

то

$$\frac{N_1}{N_2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}} \frac{\sqrt{T_B} P_{1A}}{\sqrt{T_A} P_{2B}}. \quad (6)$$

В частном случае, когда $P_{1A} = P_{2B}$ и $T_A = T_B$ выражение (6) принимает вид

$$\frac{N_1}{N_2} = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}. \quad (7)$$

Как следует из полученных соотношений, явления эффузии могут использоваться для решения многих практических задач по разделению потоков молекул: Одной из них является разделении изотопов.

Вследствие тождественности химических свойств изотопов, принадлежащих одному и тому же химическому элементу, отсутствию электрического заряда, их не удаётся разделить электромагнитными полями и химическими способами. Выражение (7) лежит в основе принципа эффузионного разделения изотопов. Он наиболее эффективен при каскадном способе [3], предусматривающем многократное, последовательное разделение потока частиц.

Наконец, пример тепловой эффузии или эффект Кнудсена.

Предполагается, что в частях А и В сосуда находится один и тот же газ при разных давлениях и температурах, удовлетворяющих состоянию высокого вакуума. Тогда возникнут два эффузионных потока, которые в равновесном состоянии ($\Delta N=0$) согласно (1) должны удовлетворять [1],[3] условию:

$$\frac{P_A}{\sqrt{T_A}} = \frac{P_B}{\sqrt{T_B}}. \quad (8)$$

Из (8) следует, что если температуры различны, то должны быть различны и давления. Соединяя части А и В сосуда множеством малых отверстий (пористая перегородка) и поддерживая разницу

температур при равных начальных давлениях, получим эффузионный поток молекул от части системы с низкой температурой к части с более высокой. Этот эффект проявляется повсеместно в материалах, обладающих пористой структурой и достаточной разностью температур. Им объясняется суточная вентиляция почв, поглощение и выделение различных газов пористыми твёрдыми строительными материалами и т.д.

Эффект Кнудсена является серьёзным научным обоснованием физического механизма проникновения радона в различные помещения, в том числе жилые [10]. «Радоновая проблема» относится к числу важнейших экологических проблем [11-12]. Её решению в США и ряде европейских стран придаётся большое значение.

Радон - это природный радиоактивный газ, не имеющий цвета, запаха и вкуса, в 7,5 раза тяжелее воздуха. Радон постоянно образуется в процессе радиоактивного распада урана и радия. Эти элементы находятся повсеместно в различных количествах в недрах земли и воде. Человек не способен увидеть, почувствовать или унюхать радон, но может столкнуться с его опасным

воздействием. Среди естественных источников радиации «пальму первенства» уверенно держит радон, обуславливающий до 54% от естественного излучения. Если температура в помещении выше, чем на улице, то вследствие тепловой эффузии поток радона через пористую структуру стен «всасывается» внутрь помещения. При обратном соотношении температур направление потока, естественно, меняется.

Не менее яркие примеры проявления физических эффектов и явлений можно использовать и в разделе «Электричество и магнетизм».

В заключение отметим, что приведённые выше выводы выражений для эффузии, описаны довольно подробно в связи с тем, что в подобных выкладках, представленных в работе [1], содержится описка. Начальные условия, при которых из выражений (2) - (3) следует (6), записаны в [1] как $P_{2A}=P_{1B}$. В действительности при таких начальных условиях из (2) и (3) следует (4), а результат (6) отвечает начальным условиям (5). Не смотря на это, подчеркнём, что, по нашему мнению, учебное пособие [1] может служить образцом продуманного отношения к приводимым примерам.

Библиографический список

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики, т. II, Термодинамика и молекулярная физика. - М. Наука, 1975. - 552 с.
2. Ландау Л.Д., Ахиезер А.И., Лифшиц Е.М. Курс общей физики. Механика и молекулярная физика. - М. Наука, 1965. - 384 с.
3. Савельев И.В., Курс общей физики, Т. I. Механика, колебания и волны, молекулярная физика. - М. Наука, 1970. - 333 с.
4. Поль Р.В. Механика, акустика и учение о теплоте. - М. Наука, 1971. - 480 с.
5. Коноваленко В.А., Машников В.В., Шаповалов А.С. Каноническое распределение Гиббса в общем курсе физики. // Вопросы прикладной физики. - Саратов, 2010. - Вып. 17. - С. 11-14.
6. Машников В.В., Шаповалов А.С. Ангармонический осциллятор в общем курсе физики // Вопросы прикладной физики. Саратов, 1998. - Вып. 4. - С. 10-11.
7. Mashnicov V.V., Minkin L.M., Shapovalov A.S. Dimensional Analysis of Magnet Falling Through a Vertical Conductive Tube. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2009. - Вып. 16. - С. 12-14.
8. Шаповалов А.С., Машников В.В., Шаповалов С.А. О статистическом выводе закона Ома. // Вопросы прикладной физики. - Саратов, 2015. - Вып. 22. - С. 21-22.
9. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики. - Саратов, 2015. - Вып. 22. - С. 48-51.
10. L. Minkin and A.S. Shapovalov. Indoor Radon Entry: 30 Years Later. // Iranian Journal of Radiation Research. - Summer 2008. - V. 6, № 1. P. 159-164.
11. L. Minkin, A.S. Shapovalov. Heat of Transport of Air in Clay. // Radiation Protection Dosimetry. - 2007.- V. 123, № 2, - P. 221-225.
12. Minkin L.M., Shapovalov A.S. Thermo-diffusional radon waves in soils // Science of the Total Environment / Volume 565, 15 september 2016, Pages 1-7.

ABOUT THE ROLE OF THE EXAMPLES IN THE STUDYING OF PHYSICS

¹V.V. Mashnikov, ²L.M. Minkin, ¹A.S. Shapovalov

¹Saratov State University,

²Portland State University, USA

The article discusses the importance of use in the lecture course in physics examples of action of physical laws and effects that develop interest in the subject. The appropriate examples are given.

ПРОСТАЯ СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕОДНОРОДНОГО ЭМИТТЕРА,
ГЕНЕРИРУЮЩЕГО АНОМАЛЬНЫЙ ДРОБОВОЙ ШУМ

А.С. Шаповалов, М.Г. Инкин, С.А. Шаповалов

Саратовский государственный университет

Шаповалов Александр Степанович,

д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов

Инкин Максим Глебович, студент физического факультета

КРЭТ, АО «АП Восход», г. Москва

Шаповалов Степан Александрович, начальник группы ОВК

Обсуждается простая статистическая модель неоднородного эмиттера, генерирующего аномальный дробовой шум. Приводятся спектральные характеристики шума.

Как показывает анализ литературных источников, одной из причин аномально высокого уровня дробового шума [1] является эмиссионная неоднородность катода. Данная работа иллюстрирует возникновение аномального дробового шума на примере одной из простейших моделей неоднородного эмиттера.

С позиции классической теории дробового эффекта процесс испускания электронов однородным катодом принимается Пуассоновским (процессом без последствия), а интервал времени τ между двумя последовательными актами испускания электронов считается распределённым по экспоненциальному закону. При этом параметр λ этого закона, представляющий среднее числа электронов, эмитируемых в единицу времени, естественно, является детерминированной величиной. Фактически он играет роль параметра интенсивности эмиссии.

Физические процессы, протекающие на поверхности и в глубине эмиссионного покрытия реального катода, порождают множество различных эмиссионных состояний эмиттера, каждому из которых соответствует своё значение параметра интенсивности эмиссии. Реальный катод всегда в той или иной степени неоднороден с точки зрения состава эмиссионных состояний. Параметр интенсивности эмиссии λ является случайной величиной и представляет собой условное математическое ожидание числа электронов, эмитируемых в единицу времени, при условии, что катод находится в данном эмиссионном состоянии. Непрерывная смена эмиссионных состояний приводит к появлению дополнительной (аномальной) компоненты дробового шума [2-6] и увеличению полного уровня шума.

Общая теории дробового эффекта [2-6] разработана для произвольного закона распределения интервала времени τ , который, в свою очередь, определяется видом плотности распределения параметра интенсивности λ . Таким образом, практическое использование общей теории требует построения соответствующей статистической модели неоднородного эмиттера. Основу этой модели, по существу, составляет выбор закона распределения параметра интенсивности эмиссии λ , так как условную плотность распределения интервала τ , естественно, принять в виде экспоненциального закона.

С целью получения численных данных об энергетических и частотных характеристиках аномального дробового шума построена серия статистических моделей неоднородных эмиттеров, в рамках которых параметр λ принимается как непрерывной, так и дискретной случайной величиной [5,7-12]. Большинство указанных моделей достаточно сложны. Однако для выяснения статистического механизма возникновения аномального дробового шума и получения его численных оценок можно воспользоваться более простыми моделями, которые описывают неоднородный эмиттер менее детально, но они более компактны и удобны для использования в учебном процессе. В качестве таких моделей можно рассматривать различные частные случаи и упрощённые варианты статистических схем, разработанных ранее.

Для выбора простого закона распределения параметра интенсивности эмиссии λ проведём последовательное упрощение одной из наиболее обоснованных моделей неоднородного эмиттера, в рамках которой величина λ считается распределённой по нормальному закону. Далее, пользуясь известным «правилом трёх сигм» [5], заменим указанный закон усечённым нормальным распределением, заданным только для области значений параметра интенсивности $\lambda_0 - 3\sigma < \lambda < \lambda_0 + 3\sigma$ (здесь λ_0 и σ – соответственно математическое ожидание и среднее квадратическое отклонение параметра λ). На следующем этапе упрощения аппроксимируем непрерывное распределение параметра λ дискретным, то есть предположим, что величина λ в указанной области может принимать лишь ряд дискретных значений. Причём вероятности дозволённых значений λ будем считать пропорциональными соответствующим ординатам нормального закона. Исходная непрерывная модель неоднородного эмиттера трансформируется в многоуровневую дискретную. Дальнейшее упрощение модели связано с выбором числа дозволённых значений λ . При наиболее простой и одновременно наиболее грубой аппроксимации нормального распределения можно ограничиться всего тремя дозволёнными значениями параметра интенсивности: $\lambda = \lambda_p = \lambda_0 - 3\sigma$, $\lambda = \lambda_0$, $\lambda = \lambda_d = \lambda_0 + 3\sigma$. После такой операции формируемая модель превращается в частный случай симметричной дискретной модели с числом уровней $N=3$, которая рассмотрена в [9,10].

Вероятности основного эмиссионного состояния p_0 , пассивного p_p и активного p_a , найденные из условия нормировки, составляют

$$p_0 = \left(2 + \exp \frac{9}{2}\right)^{-1} \exp \frac{9}{2}, \quad (1)$$

$$p_p = p_a = \frac{1 - p_0}{2} = \left(2 + \exp \frac{9}{2}\right)^{-1}. \quad (2)$$

С точностью до 0,01 они равны: $p_0=0,98$; $p_p=p_a=0,01$.

Если условную плотность вероятности интервала времени τ в любом эмиссионном состоянии принять экспоненциальной, то безусловный закон распределения интервала $f(\tau)$ можно записать так [5]:

$$f(\tau) = p_p \lambda_0 (1 - q) e^{-\lambda_0(1-q)\tau} + p_0 \lambda_0 e^{-\lambda_0 \tau} + p_a \lambda_0 (1 + q) e^{-\lambda_0(1+q)\tau}, \quad (3)$$

где $q=3\sigma/\lambda_0$ - параметр неоднородности эмиссионных состояний, равный относительной полуширине полосы возможных значений λ . Величина q ограничивается очевидным условием: $q < 1$.

Выражения (1)-(3) составляют математическую основу предлагаемой модели. Используя их, рассмотрим энергетические и частотные характеристики аномального дробового шума.

Как следует из общей теории аномального дробового шума спектральная плотность полного дробового шума на поверхности катода $S_i(\omega)$ (пролётными эффектами пренебрегается) имеет вид [2-6]

$$S_i(\omega) = \frac{eI_0}{2\pi} + [\gamma(\omega) - 1] \frac{eI_0}{2\pi}, \quad (4)$$

где

$$\gamma(\omega) - 1 = 2 \operatorname{Re} \frac{\varphi(\omega)}{1 - \varphi(\omega)}, \quad (5)$$

$$\varphi(\omega) = M \left\{ e^{j\omega\tau} \right\},$$

M - символ взятия математического ожидания; i - флуктуационная составляющая тока эмиссии; $I_0=e/M(\tau)$ - постоянная составляющая тока эмиссии; e - модуль заряда электрона; $\gamma(\omega)$ - коэффициент повышения интенсивности полного дробового шума относительно уровня Шоттки $eI_0/2\pi$; ω - круговая частота. Первое слагаемое в выражении (1) описывает классический дробовой эффект и не зависит от частоты (белый шум). Второе слагаемое, зависящее от частоты в связи с появлением последствия, описывает спектр аномальной компоненты шума.

Нетрудно показать, что для однородного катода, когда $q=0$, второе слагаемое в выражении (4) равно нулю. Для $q \neq 0$ это слагаемое отлично от нуля, монотонно уменьшается с увеличением частоты и при $\omega \gg I_0/e$ стремится к нулю. Наибольший уровень аномальной компоненты шума наблюдается при $\omega \rightarrow 0$. В относительных единицах, то есть по отношению к уровню Шоттки, он определяется величиной $\gamma_0 - 1$, где $\gamma_0 = \gamma(\omega \rightarrow 0)$. Эту величину целесообразно рассматривать как основную энергетическую характеристику аномального шума.

Элементарный расчёт показывает [5], что величина γ_0 совпадает с квадратом коэффициента вариации интервала τ . Используя (3) и вычислив $M(\tau)$ и $M(\tau^2)$, нетрудно показать [5], что

$$\gamma_0 - 1 = 2q^2(1 - p_0) \frac{1 + p_0q^2}{(1 - p_0q^2)^2}. \quad (6)$$

Кривая зависимости уровня $\gamma_0 - 1$ аномального дробового шума от параметра неоднородности эмиссионных состояний q при $p_0=0,98$ представлена на рис.1. Как видно из рисунка, с увеличением параметра неоднородности q уровень $\gamma_0 - 1$ аномального дробового шума непрерывно растёт. При этом основное увеличение уровня аномального дробового шума наблюдается при достаточно высоких значениях q , когда $q > 0,95 - 0,96$, и уровень аномального дробового шума начинает на порядок и более превышать уровень Шоттки.

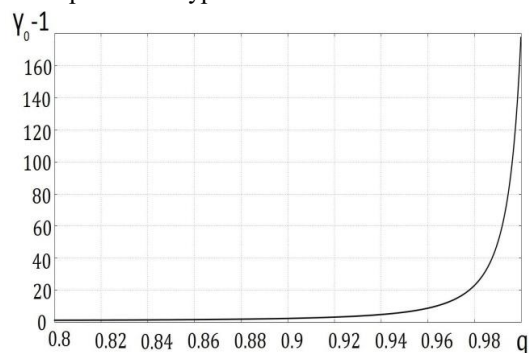


Рис.1.

Из рисунка следует принципиально важный вывод. Оказывается уровень аномального дробового шума может быть весьма значительным даже при такой малой вероятности не основных (пассивного и активного) эмиссионных состояний, какие приняты в данном расчёте. Главным и достаточным условием высокого уровня $\gamma_0 - 1$ является значительная степень неоднородности состояний.

Кривая рис.1 наглядно отражает основную тенденцию в поведении уровня $\gamma_0 - 1$. Однако пользоваться этой кривой для определения численных значений уровня $\gamma_0 - 1$ в области её высокой крутизны не совсем удобно. Кроме того, по виду кривой можно сделать ошибочный вывод о том, что приближение q к 1 ведёт к неограниченному росту $\gamma_0 - 1$. В действительности этого не происходит. Из (6) следует, что при $q \rightarrow 1$ величина $\gamma_0 - 1$ стремится к конечному пределу

$$\gamma_0(q \rightarrow 1) - 1 = 2 \frac{1 + p_0}{1 - p_0},$$

который в рассматриваемом случае равен 198.

По этим причинам для характеристики неоднородности есть смысл ввести в рассмотрение дополнительный параметр - максимальный перепад $\eta = \lambda_a/\lambda_p$ эмиссионной способности отдельных состояний. Через параметр q он выражается следующим образом:

$$\eta = \frac{1 + q}{1 - q}.$$

На рис.2 представлена кривая зависимости уровня $\gamma_0 - 1$ аномального дробового шума от

параметра перепада η эмиссионной способности. Эта кривая наглядно иллюстрирует тот факт, что при увеличении неоднородности эмиссионных состояний уровень аномального дробового шума $\gamma_0 - 1$, возрастая по величине, стремится к определённом конечному значению.

В рассматриваемом случае, когда спектр дробовых флуктуаций тока определяется на поверхности катода (теоретически время пролёта равно нулю), между классической и аномальной компонентами шума имеется принципиальное различие. Классическая компонента спектральной плотности не зависит от частоты, а аномальная компонента - зависит. Методика расчёта зависимости спектральной плотности аномального дробового шума от частоты достаточно хорошо отработана и описана в работах [5,9,10]. Для получения такой зависимости достаточно хорошо подставить в соответствующие выражения указанных работ $p_0=0,98$ и интересующее значение q .

Для иллюстрации влияния эффекта последствия на спектр аномального дробового шума приведём несколько графиков, рассчитанных по указанной схеме. На рис. 3 показана типичная кривая зависимости уровня аномального шума $\gamma - 1$ от приведённой частоты $\Omega = \omega / \lambda_0$. Параметр неоднородности эмиссионных состояний q , отвечающий этой кривой, равен 0,99. Вероятность основного эмиссионного состояния $p_0=0,98$. Учитывая, что $\lambda_0 = I_0 / e$, по этой кривой нетрудно построить зависимость $\gamma - 1$ от ω .

Для определения зависимости ширины спектра аномальной компоненты дробового шума от параметра неоднородности q на рис. 4 приведены кривые зависимости от приведённой частоты отношения $(\gamma - 1) / (\gamma_0 - 1)$. Кривые соответствуют $p_0=0,98$.

Рис. 4.

Зависимость ширины спектра $\Delta\Omega$ от параметра неоднородности q иллюстрирует кривая рис. 5. Ширина спектра определялась с помощью кривых рис. 4 на уровне: $(\gamma - 1) / (\gamma_0 - 1) = 0,5$.

С увеличением параметра неоднородности q ширина спектра аномальной компоненты дробового шума монотонно уменьшается. Максимальное изменение ширины спектра достигает 10 единиц приведённой частоты. Таким образом, увеличение параметра неоднородности эмиссионных состояний при прочих равных условиях ведёт к повышению максимального уровня аномальной компоненты и уменьшению ширины спектра.

Сравнение полученных данных с результатами исследований, выполненных с использованием более сложных моделей неоднородного эмиттера, показывает, что многие важные особенности аномального дробового шума можно вскрыть и обсудить, положив в основу анализа значительно более простые модели.

В заключение отметим, что проведение расчётов, подобных представленному, способствует развитию

у учащихся навыков статистического анализа, необходимых для успешной научно-исследовательской деятельности.

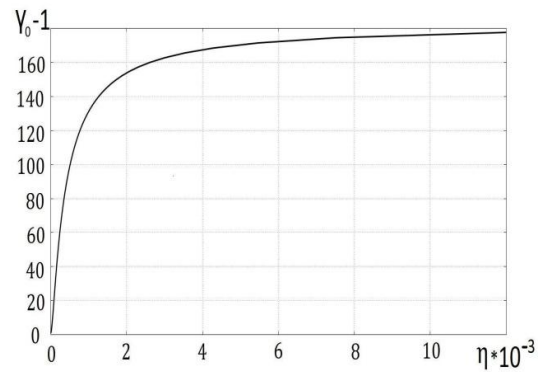


Рис. 2.

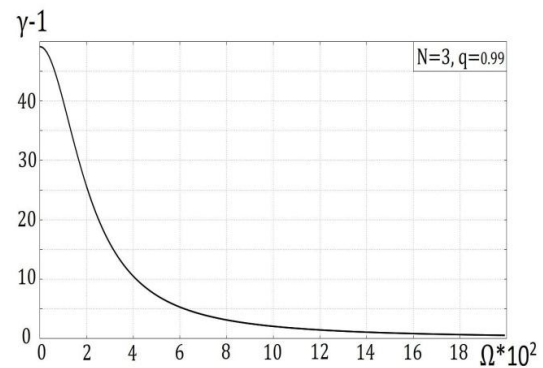


Рис. 3.

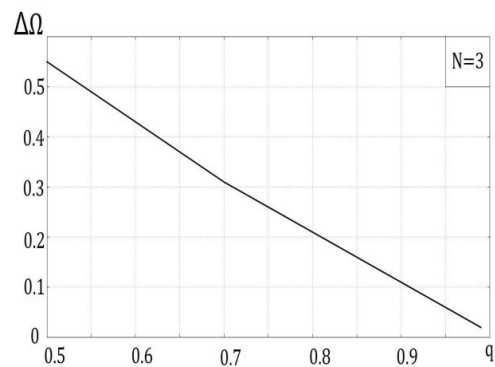
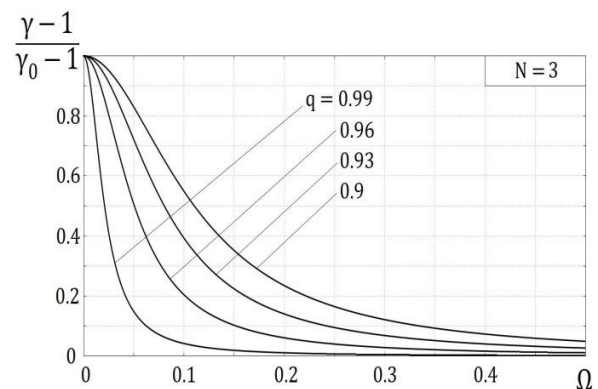


Рис. 5.

Библиографический список

1. Набоков Ю.И., Авдеев В.Е. Об аномальном дробовом эффекте в приборах с оксидным катодом // Изв. АН СССР. Сер. Физическая. – 1969. – Т. 33, № 3. – С. 452-457.
2. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу об уровне дробового шума термокатода // ЖТФ. – 1974. – Т. 44, № 10. – С. 2174-2177.
3. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу о спектральной плотности флуктуаций тока эмиссии термокатода // Изв. вузов. Радиофизика. – 1974. – Т. 17, № 12. – С. 1885-1890.
4. Шаповалов А.С., Денисов Ю.И. Статистический механизм возникновения аномальных дробовых шумов в потоках носителей заряда // Изв. вузов. Радиоэлектроника. – 1985. – Т. 28, № 5. – С. 88.
5. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
6. Шаповалов А.С. Вероятностные расчёты в физике. Саратов.: Издательство «Саратовский источник», 2015, - 72 с.
7. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В. Аномальный дробовой шум на неоднородном потенциальном барьере // Гетеромагнитная микроэлектроника: Сб. науч. тр. / Под ред. проф. А.В. Ляшенко. – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, - 2016. – Вып. 20 : Гетеромагнитная микро- и нанoeлектроника. Методические аспекты физического образования. Экономика в промышленности. – С. 41-46.
8. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Особенности спектра аномального дробового шума неоднородного эмиттера при равномерном распределении параметра интенсивности эмиссии // Вопросы прикладной физики.– Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 35-38.
9. Мироненко К.В., Инкин М.Г., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Энергетические характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики.– Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 52-53.
10. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики.–Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 48-51.
11. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Многоуровневая дискретная модель неоднородного эмиттера и максимальный уровень аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.– Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 39-41.
12. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для многоуровневой дискретной модели неоднородного эмиттера // Вопросы прикладной физики. – Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 42-44.

THE SIMPLE STATISTICAL MODEL
OF THE INHOMOGENEOUS EMITTER,
GENERATING ANOMALOUS SHOT NOISE

¹A. S. Shapovalov, ¹M. G. Inkin, ²S.A. Shapovalov
¹Saratov State University
²«AP Voskhod», Moscow

It is discussed the simple statistical model of the inhomogeneous emitter, that generates an anomalous shot noise. Spectral characteristics of noise are given.

О МЕТОДИКЕ ПРЕПОДАВАНИЯ ТЕОРИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЦЕПЕЙ ДЛЯ СТУДЕНТОВ НЕФИЗИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ ПОДГОТОВКИ

О.Е. Глухова, В.Г. Андрианов, М.М. Слепченков, В.В. Шунаев

Саратовский национальный исследовательский государственный университет

Глухова Ольга Евгеньевна, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики,
Андрианов Виталий Геннадьевич, заведующий учебной лабораторией электрорадиотехники
Шунаев Владислав Викторович, к.ф.-м.н., ассистент кафедры радиотехники и электродинамики,
Слепченков Михаил Михайлович, к.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики,

Представлены методические рекомендации по преподаванию теории электрических цепей для студентов, обучающихся по направлениям подготовки бакалавров института химии и геологического факультета СГУ.

Учебными планами подготовки бакалавров института химии и геологического факультета СГУ предусмотрено изучение студентами дисциплины «Электротехника и электроника». Эта дисциплина преподается, как правило, на втором курсе и является самостоятельной дисциплиной, не принадлежащей тематическому блоку учебных курсов, поэтапно знакомящих студентов на протяжении нескольких семестров с основными разделами выбранной для изучения области знаний. Учитывая непрофильный характер дисциплины для студентов, обучающихся по образовательным программам химической и геологической направленностей, необходимо построить изложение курса таким образом, чтобы обучающиеся смогли приобрести базовые теоретические знания и практические навыки, не имея за плечами предварительно прослушанных курсов физического профиля. Поскольку дисциплина «Электротехника и электроника» изучается только лишь в рамках одного семестра, важно выбрать для преподавания тематический раздел, знание которого позволят студентам сформировать общие представления о сути происходящих в электротехнических и электронных устройствах физических процессах и способах их математического описания, а также самостоятельно осваивать другие разделы электротехники и электроники. По мнению авторов работы, таким базовым тематическим разделом является теория электрических цепей, на основных положениях которой строится работа электротехнических и радиоэлектронных устройств, применяемых, в том числе, и для проведения исследовательских и промышленных работ в области химии и геологии. Другими словами, теория электрических цепей является центральным блоком знаний, важных для знакомства с электротехникой и электроникой студентов нефизического профиля подготовки. Изложению основ теории электрических цепей посвящено много учебно-методической литературы [1-10], однако, большая ее часть ориентирована на студентов технических вузов. В данной работе авторы предлагают свою методику изложения основ теории электрических цепей для бакалавров нефизического профиля подготовки, основываясь на опыте преподавания курса «Электротехника и электроника» студентам института химии и геологического факультета СГУ.

С первых же теоретических и практических занятий по теории электрических цепей студент, слушая о физических принципах работы радиотехнических устройств, сталкивается с новыми для себя терминами – сопротивление, проводимость, индук-

тивность, емкость, источника тока, источник напряжений и другие. Важно начать изложение теории электрических цепей с раскрытия физического содержания каждого используемого понятия и введения их математического описания. Особое значение следует придавать пояснению отдельных математических операций в используемых формулах. В частности, такие операции как дифференцирование и интегрирование физических величин, операции с комплексными числами и их геометрическое представление, а также базовые элементы линейной алгебры и аналитической геометрии могут быть еще не знакомы студентам нефизического профиля подготовки и вызывать серьезные затруднения при изучении разделов теории электрических цепей. Независимо от того, предусмотрено ли учебным планом наличие семинарских занятий следует закреплять введенные в рамках лекционных занятий математических модели физических величин на конкретных примерах, демонстрируя, как работает используемый математический аппарат. Помимо базовых понятий в рамках вводной части курса необходимо рассмотреть фундаментальные законы теории электрических цепей, на основе которых впоследствии будет строиться изложение методов расчета цепей. Таковыми являются законы Ома и Кирхгофа, а также баланс мощностей, иллюстрирующий закон сохранения энергии в электрической цепи. Без знания этих законов студент не сможет воспринимать информацию о методах расчета электрических цепей, овладение которыми – одна из задач курса теории электрических цепей. При рассмотрении законов Кирхгофа приходится оперировать некоторыми топологическими понятиями теории электрических цепей, в том числе понятиями ветвь, узел, контур, двухполюсник и четырехполюсник. Эти понятия являются важным звеном в логической цепочке «понятия-законы-методы расчета-физические явления», которая приводит студента к пониманию сути задач анализа и синтеза электрических цепей, и не должна остаться без внимания при изучении данного раздела курса.

Усвоение физической и математической трактовки базовых понятий и законов теории электрических цепей позволит перейти студентам на следующий уровень изучения курса, а именно, методам расчета цепей. Этот раздел теории цепей изобилует математическими выкладками, поэтому, при его прочтении следует делать акцент на логические связи между этапами расчета физических величин в рамках того или иного метода расчета. То есть,

изложение каждого метода должно сопровождаться построением алгоритма расчета, который затем будет проиллюстрирован на примерах простейших электрических RLC-цепей с последовательным, параллельным и смешанным типом соединения элементов. Чем точнее будет сформулирован алгоритм, тем выше будет у студентов эффективность применения методов расчета электрических цепей. Среди различных классов методов отдавать предпочтение нужно наиболее распространенным методам расчета, а именно методу комплексных амплитуд, методу контурных токов и узловых напряжений, методу эквивалентных преобразований. Перечисленные выше методы должны быть дополнены так называемыми основными теоремами теории электрической цепи – теоремой наложения (принцип суперпозиции), теоремой об эквивалентном источнике энергии, теоремой взаимности (обратимости) и теоремой компенсации (замещения). Знание этих теорем позволит студентам лучше понять вычислительные особенности методов и существенно упростить процедуру расчетов в ряде случаев. Важно не только ознакомить студентов с методами расчета электрических цепей, но и научить их выбирать наиболее оптимальный с точки зрения трудоемкости метод исходя из начальных условий задачи, под которыми, в первую очередь, будем понимать топологические особенности рассматриваемой электрической цепи. Например, в том случае, когда уменьшенное на единицу число узлов цепи меньше числа ее независимых контуров, целесообразно для расчета сложных электрических цепей применять метод узловых напряжений.

Существенным дополнением к лекционной программе курса теории электрических цепей является выполнение лабораторных работ в радиотехническом практикуме. Если разбор примеров решения конкретных задач по расчету электрических цепей позволит сформировать у студентов базовые практические навыки определения рабочих параметров и характеристик цепи, то выполнение лабораторных работ позволит приобрести студентам навыки экспериментального определения характеристик цепи посредством работы с радиотехническим измерительным оборудованием. Лабораторные работы должны быть подобраны для студентов таким образом, чтобы они могли поэтапно двигаться от выполнения простых заданий к более сложным, совершенствуя при этом как навыки работы с измерительными приборами, так и закрепляя пройденный теоретический материал. Начинать работу в практикуме лучше всего с выполнения лабораторной работы, целью которой является знакомство студентов с основными радиотехническими приборами – генератором, осциллографом, вольтметром и амперметром. Каждый студент должен выполнить ряд тестовых заданий на экспериментальное определение с

помощью лабораторного измерительного оборудования основных физических величин в теории электрических цепей – тока, напряжения и ЭДС. В частности, типовыми упражнениями является измерение выходных напряжений генератора и сдвига фаз на входе и выходе четырехполюсника, а также измерение частоты генератора методом фигур Лиссажу. В ходе выполнения этих упражнений студент должен уделить особое внимание вопросам калибровки приборов перед началом выполнения измерений. Немаловажным является и обучение студентов количественной оценке погрешности результатов проведенных измерений, как неотъемлемой составляющей экспериментального исследования физических процессов в электрических цепях. После знакомства с основными радиотехническими измерительными приборами студентам необходимо выполнить ряд работ, направленных на закрепление изученных в рамках лекционных занятий методов расчета электрических цепей. Авторы рекомендуют выбор таких работ, как «Анализ гармонических процессов в линейных электрических цепях» и «Методы расчета гармонических токов и напряжений в линейных электрических цепях», разработанных в учебной лаборатории электрорадиотехники при кафедре радиотехники и электродинамики. Более подробно описание указанных выше работ приводится в учебно-методическом пособии [11].

Подводя итоги, можно предложить следующую тематическую программу для изучения теории электрических цепей студентами нефизического профиля подготовки.

Раздел 1. Основные понятия теории электрических цепей

Классификация элементов электрических цепей. Пассивные и активные элементы электрических цепей. Источники ЭДС и тока. Топологические понятия схемы электрической цепи. Законы Кирхгофа. Общий алгоритм анализа цепей на основе законов Кирхгофа.

Раздел 2. Линейные цепи под гармоническим воздействием

Синусоидальные ЭДС, напряжения и токи. Векторные диаграммы. Установившийся синусоидальный ток в цепи с последовательным, параллельным и смешанным соединениями сопротивления (проводимости), индуктивности и емкости.

Раздел 3. Методы расчета электрических цепей при установившихся синусоидальных токах

Метод комплексных амплитуд. Метод эквивалентных преобразований. Методы контурных токов, узловых напряжений. Теоремы наложения, взаимности, компенсации. Теорема об эквивалентном источнике энергии.

Библиографический список

1. Демирчян К.С., Нейман Л.Р., Коровкин Н.В. Теоретические основы электротехники: учеб. для вузов: в 3 т. 5-е изд. Т. 2. – Москва; СПб: Питер, 2009. – 431 с.
2. Атабеков Г.И. Теоретические основы электротехники. Линейные электрические цепи: Учебное пособие. 7е изд., стер.– СПб.: Изд-во «Лань», 2009. – 592 с.: ил.
3. Ляшев В.А., Мережин Н.И., Попов В.П. Основы теории цепей. М.: Изд-во Юрайт, 2015. – 696 с.
4. Прянишников В.А. Теоретические основы электротехники - СПб: Корона принт, 2004. – 368 с.
5. Матханов, П.Н. Основы анализа электрических цепей: Линейные цепи. М.: Высшая школа, 1990 . - 400 с.
6. Бессонов Л.А. Линейные электрические цепи. М.: Изд-во Юрайт, 2014. - 317 с.
7. Данилов И.А. Общая электротехника: учеб. пособие. - М.: Изд-во Юрайт, 2010. - 673 с.
8. Кузовкин В.А., Филатов В.В. Электротехника и электроника: учебник для СПО. - М.: Изд-во Юрайт, 2016. - 431 с.
9. Татур Т.А. Основы теории электрических цепей. М.: Высшая школа, 1980 г. - 271 с.
10. Бычков Ю. А., Золотницкий В. М., Чернышев Э. П. Основы теории электрических цепей: Учебник для вузов – СПб.: Изд-во «Лань», 2002. – 464 с.
11. Глухова О.Е., Андрианов В.Г., Колосов Д.А., Шунаев В.В. Практикум по радиоэлектронике: учебное пособие для студентов, обучающихся по направления подготовки бакалавров «Конструирование и технология электронных средств», «Радиофизика», «Компьютерная безопасность», «Информатика и вычислительная техника», «Геология», «Прикладная геология», «Химическая технология», «Техносферная безопасность» – Саратов: Саратовский источник, 2017. – 56 с.

**ABOUT THE METHODOLOGY OF TEACHING THE ELECTRIC CIRCUIT THEORY
FOR STUDENTS OF NONPHYSICAL PROFILE OF TRAINING**

O.E. Glukhova, V.G. Andrianov, M.M. Slepchenkov, V.V. Shunaev
Saratov State University

Methodical recommendations for teaching the theory of electrical circuits for students studying in the areas of bachelor training at the Institute of Chemistry and Geological Faculty of Saratov State University are presented.

УДК 53.043

О МЕТОДИКЕ РАСЧЕТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НАНОСТРУКТУР

О.Е. Глухова, В.В. Шунаев, М.М. Слепченков
Саратовский государственный университет

Глухова Ольга Евгеньевна, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики,
Шунаев Владислав Викторович, к.ф.-м.н., ассистент кафедры радиотехники и электродинамики,
Слепченков Михаил Михайлович, к.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики,

Предложена методика расчета основных энергетических параметров наноструктур - энтальпии реакции, энергии связи и энергии активационного барьера. Предложенная методика может быть использована для выполнения студентами физического факультета СГУ практических занятий по курсам «Введение в физику наноструктур», «Физические основы работы микро- и нанoeлектроники».

Внимание научного мира к наноструктурам и их различным модификациям обуславливает появление соответствующих дисциплин в учебных планах естественно-научных факультетов ведущих вузов России. В Саратовском государственном университете учебный план таких курсов, как «Структурная механика в технических приложениях», «Введение в физику наноструктур», «Теория конденсированного состояния», предусматривает изучение наноструктур в дисплейных классах [1]. Кроме того, все большее количество выпускных квалификационных работ посвящено изучению механических, электронных, оптических и прочих свойств нанобъектов, в том числе ранее не исследованных. Однако прежде чем изучать свойства наноструктуры, необходимо найти ее равновесную конфигурацию, а также убедиться, что такая структура является термодинамически стабильной, то есть может существовать на практике. Для этого студентам необходимо уметь вычислять такие энергетические параметры, как

«энтальпия реакции», «энергия связи», «энергия активационного барьера», а также понимать, каким образом проводится так называемая «оптимизация» структуры.

Для расчета таких параметров, как «энтальпия реакции», «энергия связи» и «энергия активационного барьера» структура должна быть прооптимизирована. Под оптимизацией в данном случае подразумевается поиск глобального минимума энергии система путем изменения взаимного расположения атомов. В наиболее востребованных пакетах математического моделирования наноструктур Gaussian [2], DFTB+ [3], Kqvazar [4], реализованы такие методы минимизации энергии, как метод наискорейшего спуска (steepest Descent method) и метод сопряженного градиента (conjugate gradient method). Расчет энтальпии реакции зависит от типа рассматриваемого объекта. Если структура является гомогенной и образована из атомов одного типа (например, фуллерен, нанотрубки), то энтальпия реакции образова-

ния такой системы будет находиться как разница между полной энергией оптимизированной системы и суммой энергий каждого атома в отдельности. Например, для фуллеренов C_N – структур, образованных из N атомов углерода, – формула для энтальпии реакции ΔH_f будет находиться следующим образом:

$$\Delta H_f(C_N) = E(C_N^{OPT}) - N \cdot E(C) \quad (1)$$

где $E(C_N^{OPT})$ – энергия оптимизированного фуллерена C_N ; $E(C)$ – энергия атома углерода в свободном состоянии. В случае, если необходимо найти энтальпию реакции образования гибридного объекта, состоящего из двух гомогенных объектов или гомогенного объекта, функционализированного атомами другого типа, энтальпия реакции образования вычисляется как разница между энергией оптимизированного гибридного объекта и энергией оптимизированных по отдельности объектов, из которых он состоит. Например, энтальпии реакции образования композита, состоящего из углеродной нанотрубки и фуллерена C_{60} ($C_{60}@УНТ$), и графена, функционализированного гидроксильной группой $-OH$, будут находиться по формулам:

$$\Delta H_f(C_{60}@УНТ) = E(C_{60}@УНТ^{OPT}) - E(C_{60}^{OPT}) - E(УНТ^{OPT}) \quad (2)$$

$$\Delta H_f(\text{графен} + OH) = E(\text{графен} + OH^{OPT}) - E(\text{графен}^{OPT}) - E(OH^{OPT}), \quad (3)$$

где $E(C_{60}@УНТ^{OPT})$ и $E(\text{графен} + OH^{OPT})$ – энергии оптимизированных гибридных структур, а $E(C_{60}^{OPT})$, $E(УНТ^{OPT})$, $E(\text{графен}^{OPT})$, $E(OH^{OPT})$ – энергии оптимизированных структур, из которых состоит композит.

Энергия связи соответствует энергии, которую нужно затратить для образования химической связи. Чтобы рассчитать энергию образования связи, необходимо сначала прооптимизировать гибридную структуру, разорвать связь между составляющими ее объектами и рассчитать энергию этих объектов в изолированном состоянии, не оптимизируя их по отдельности (произвести так называемый «одноточечный» расчет энергии). Затем из энергии оптимизированной гибридной структуры вычитаются энергии изолированных объектов. Например, для графена, функционализированного гидроксильной группой $-OH$, энергия связи будет находиться:

$$\Delta E(\text{графен} + OH) = E(\text{графен} + OH^{OPT}) - E(\text{графен}) - E(OH) \quad (4)$$

Для оптимизации структуры необходимо установить определенный режим. Так, в программном комплексе KVAZAR в конфигурационном файле в графе «calculation mode» нужно прописать «molecular dynamics», а в графе «thermostat» – «dissipative»; для расчета энергии в одной точке в графе «calculation mode» задается режим «single point» [5]. В программном комплексе DFTB+ для поиска ми-

нимума энергии задается режим «optimization», а также необходимые параметры: метод оптимизации, количество шагов, число сходимости; для одноточечного расчета такой режим отключается.

Энергия активационного барьера (или энергия диффузии) соответствует энергии, которую нужно внести в систему для начала химической реакции между объектами. Чтобы рассчитать такую энергию, необходимо найти равновесную структуру гибридного объекта, затем разорвать связь между его составляющими и отдалить их на достаточно большое расстояние (4-5 Å). Получившееся значение энергии и будет являться высотой активационного барьера, или энергией активации [6].

Для расчета химической стабильности соединения рассчитываются такие параметры, как вертикальный потенциал ионизации (VPI – vertical potential ionization) – энергия, необходимая для того, что электрон покинул систему, и энергия электронного сродства (VDE – vertical detachment energy) – энергия, необходимая системе для присоединения электрона. Формулы для расчета данных параметров системы N выглядят следующим образом [7]:

$$VIP(N) = E(N^+) - E(N) \quad (5)$$

$$VDE(N) = E(N) - E(N^-) \quad (6)$$

где $E(N)$ – энергия нейтральной системы, $E(N^+)$ – энергия с положительным зарядом «+1», $E(N^-)$ – энергия системы с отрицательным зарядом «-1». Для того чтобы задать системе заряд «+1» или «-1» в программном пакете DFTB+, необходимо в конфигурационном файле добавить графу «Charge» – тогда заряд будет равномерно распределен между атомами системы. Для задания заряда в программном пакете Kvazar необходимо выделить всю в структуру и зайти во вкладку «Set parameters»=> «Set charges» и ввести необходимое значение заряда таким образом, чтобы сумма зарядов всей системы равнялась определенному числу. Отметим, что в DFTB+ используется заряд по Малликену (смещение электронного облака) [ссылка], в то время как в Kvazar – заряд Кулона ($1e=1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл).

Таким образом, в статье подробно описаны методики расчета таких важных энергетических параметров, как энтальпия реакции, энергия связи, энергия активации, вертикальный потенциал ионизации, энергия электронного сродства. Данные параметры являются главным индикаторами термодинамической и химической стабильности материалов и должны быть найдены студентом перед расчетом электронных, механических и прочих физико-химических свойств веществ. Пользуясь данными формулами, студент должен также иметь точное представление о методе расчета, точности расчета и границах применимости того или иного метода к рассматриваемой структуре.

Библиографический список

1. Глухова О.Е., Шунаев В.В., Слепченков М.М. О курсе лекций по структурной механике наноматериалов // Вопросы прикладной физики. Саратов. 2016. Вып. 23. С. 30-32.
2. Foresman J.B., Frish A. Exploring Chemistry with Electronic Structures Methods. Second Edition. 1996. Gaussian Inc., Pittsburg, 302 p.
3. Elstner M., Porezag, D., Jungnickel G., Elsner J., Haugk M., Frauenheim T., Suhai S., Seifert G. Self-consistent charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties // Physical Review B. 1998. Vol. 58. P. 7260-7268.
4. Глухова О.Е., Колесникова А.С., Савостьянов Г.В., Слепченков М.М. ПО «KVAZAR» - платформа для прогностического моделирования в области нано- и биомедицинских технологий // Саратов: Изд-во «Саратовский источник», 2015. 247 с.
5. Глухова О.Е., Савостьянов Г.В. Вычислительный практикум по моделированию наноструктур в программном комплексе Kvazar [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие для студентов по направлениям подготовки "Радиофизика" и "Конструирование и технология электронных средств". Саратов, 2015. 44 с.
6. Shunaev V.V., Glukhova O.E. The Topology Influence on the Process of Graphene Functionalization by Epoxy and Hydroxyl Groups // Journal of Physical Chemistry C. 2016. Vol. 120 (7). P. 4145-4149.
7. Trivedi, R., Dhaka, K. and Bandyopadhyay, D. Study of electronic properties, stabilities and magnetic quenching of molybdenum-doped germanium clusters: a density functional investigation // RSC Advanced. 2014. Vol. 4. P. 64825-64834.

ON THE METHOD OF CALCULATING THE ENERGY PARAMETERS OF NANOSTRUCTURES

O.E. Glukhova, V.V. Shunaev, M.M. Slepchenkov

Saratov State University

A technique for calculating the basic energy parameters of nanostructures – the enthalpy of the reaction, the binding energy and the energy of the activation barrier is proposed. The proposed methodology can be used to carry out practical classes by students of the Physics Faculty of the Saratov State in courses "Introduction to the physics of nanostructures", "Physical fundamentals of the work of micro- and nanoelectronics".

УДК 802/808(082)

**КОММУНИКАТИВНЫЙ МЕТОД ОБУЧЕНИЯ АНГЛИЙСКОМУ ЯЗЫКУ
И РОЛЬ ПРЕПОДАВАТЕЛЯ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ.**

И.А. Шаповалова

МОУ «Гимназия № 31» Кировского района г. Саратова

Шаповалова Ирина Александровна, учитель английского языка высшей категории

Обсуждается новая методика преподавания иностранного языка, её компоненты и цели. В статье показывается роль преподавателя в достижении результатов этой методики.

Задача научить студентов свободно разговаривать на иностранном языке – не простая. Она включает в себя ряд основных компонент, которые позволяют говорить о важности комплексного подхода к развитию у студентов языковых умений и навыков, которые помогают им раскрывать их творческий потенциал во время профессионального общения на английском языке.

Нельзя не учитывать тот факт, что обучение иностранному языку не может быть отделено от того социального окружения, в котором он используется, и поэтому знание этой среды тоже очень важно.

Также нельзя забывать о том, что общение строится на двух процессах - порождение речи и её восприятие, - и его эффективность связана с достижением тех целей, которое ставит участник общения в данной коммуникативной ситуации.[1].

И немаловажным является то, что существует ряд условий, соблюдение которых необходимо для получения эффективного речевого взаимодействия. К этим условиям относятся:

1. знание общих правил общения и их выполнения;
2. соблюдение правил бесконфликтного общения;
3. выполнение правил и приёмов речевого воздействия.

Что касается методики преподавания, в этом вопросе существенным является роль преподавателя. Ведь не секрет, что эффективная учебно-методическая работа в системе высшего образования во многом зависит от личного отношения преподавателя к новым форматам обучения. Если говорить об уровне компетентности преподавателя, нужно иметь в виду не только знание самого предмета и желание преподавателя постоянно расширять свой интеллектуальный уровень, но и придумывать формы мотивации студентов для их обучения. И здесь все большую популярность завоевывает коммуникативная методика. Эта методика основана на принципе групповой работы, при которой коммуникативные задания, проектная деятельность или игра деловой направленности представляются

самым эффективным способом изучения учебного материала.

Важным принципом коммуникативного метода является профессиональная направленность обучения. Преподаватель отбирает такой материал, чтобы он способствовал углублению познавательной деятельности студентов, стимулировал их мыслительную деятельность и помогал формировать знания и умения, в которых студент нуждается для выполнения своих профессиональных функций. Практические занятия и задания должны быть основаны как на уже изученном материале, так и на фоновых знаниях студентов. Учитывать фоновые знания также необходимо, так как они помогают формированию профессиональных интересов, и это ведёт к повышению творческой активности студентов [2].

Известно, что в коммуникативном задании или проектной работе важным является коммуникативная целесообразность высказывания, особое внимание уделяется использованию в процессе обучения лексики игровых приёмов и техник, которые рассматриваются как эффективные, заставляющие обучаемых пользоваться языком, а не заучивать языковые формы. Нужно определённое время для того, чтобы студенты усвоили, что при профессиональном общении их ответы должны быть полными, объёмными и с ответом на вопрос нужно дать доказательство или опровержение, научиться высказывать своё отношение к тому или иному вопросу [3]. Практика показывает: если студенту предложить определённый алгоритм ответа, то он начинает более активно выражать свои мысли и выстраивать их в определённой логической последовательности. Важный элемент в этой работе - введение и заучивание разговорных фраз, которые отрабатываются в лексических упражнениях и заданиях и затем закрепляются на последующих этапах обучения. Далее, студенты, владея этими лексическими единицами, начинают легко строить свою собственную речь на иностранном языке и без помощи алгоритмов ответа. Каждое из

коммуникативных заданий системы соотносится с конкретным уровнем обученности студентов и впоследствии выполняет функцию «выращивания» и развития обучаемого до такого уровня, при котором можно перейти на следующий этап обучения.

Естественно, такая форма обучения отличается от лекций или семинаров и имеет много преимуществ. Групповая работа – это всегда творческий процесс, мозговой штурм, в котором участвуют все члены группы. И здесь первостепенное значение имеет такое качество, как умение идти на компромисс ради успеха общего дела. Работая в группе, студенты, с одной стороны, учатся слушать мнения других людей, а с другой, - могут высказывать своё мнение. Всё это способствует более глубокому пониманию пройденного материала, развитию творческого мышления и осознания того, что ты приносишь пользу своей группе единомышленников. Очень важно работу в группе распределить не только по принципу формального распределения ролей, но и по принципу внутреннего осознания и принятия этих ролей каждым членом группы. Таким образом, создаётся «командный дух», и группа начинает представлять собой ресурс, который можно и нужно эффективно использовать [4].

Роль преподавателя остаётся всё же приоритетной, так как он является главным источником знаний и информации, ему отводится моделирующая, организующая, направляющая и контролирующая роль.

Одна из главных задач преподавателя - создать такую обстановку учебного процесса, в которой увеличивается роль непосредственного участия самого студента в изучении языка. Студент начинает чувствовать необходимость работать самостоятельно и повышать уровень своих знаний. Тем не менее, он нуждается в помощи преподавателя, который поможет ему организовать эту самостоятельную работу, особенно на начальном этапе изучения языка. Вот в этом-то и состоит главная задача преподавателя – методически помочь студенту.

Библиографический список

1. Современные теории и методы обучения иностранным языкам. Материалы второй международной конференции «Языки мира и мир языка» М.: «Экзамен», 2006.
2. Федотова О.Л. Бизнес на английском языке. М.: «Экзамен», 2007.
3. Фёдорова Л.М., Рязанцева Т.И. Современные теории и методики обучения иностранным языкам. М.: «Высшая школа», 2010.
4. Силутина Е.А. Функциональное моделирование и анализ учебного процесса. Минск: БГЭУ, 1998.

COMMUNICATIVE METHOD OF TEACHING ENGLISH AND TEACHER'S ROLE IN THE PROCESS OF TEACHING

I.A.Shapovalova

Saratov Gymnasium № 31

A novel methodology for teaching a foreign language, its components and goals are discussed. The article shows the role of the teacher in achieving the results of this methodology.

ФЛУКТУАЦИИ ФАЗЫ СИГНАЛА МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, Л.М. Минкин

Саратовский государственный университет

Шаповалов Александр Степанович,

д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов

Машников Валерий Васильевич,

к.ф.-м.н., доцент кафедры компьютерной физики и метаматериалов

Portland State University, USA

Минкин Леонид Моисеевич, профессор

Исследуются флуктуации фазы сигнала многодиодного генератора СВЧ. Представлены выражения для спектра фазовых флуктуаций, вызванных СВЧ шумами активных элементов. Показано, что уровень фазового шума генератора зависит от стратегии настройки и особенностей его электродинамической системы.

Необходимость оценки возможностей практического применения многодиодных генераторов – сумматоров мощности требует теоретического и экспериментального исследования не только их энергетических характеристик, но и шумовых свойств. Прежде всего, это относится к определению зависимости уровня шумов выходного сигнала от числа активных элементов генератора. Ранние работы, посвящённые этому вопросу, приводили к противоречивым выводам [1,2]. Последующие исследования [3-7] устранили этот недостаток, представив и проанализировав спектры амплитудно-частотных флуктуаций, рассчитанные по более последовательной методике. Однако такой важный шумовой параметр как спектральная плотность флуктуаций фазы в указанных работах был оставлен без внимания. Данная работа посвящена расчёту спектра фазовых флуктуаций сигнала, вызываемых собственными СВЧ шумами активных элементов сумматора.

В основу метода исследования фазовых шумов положена обобщённая эквивалентная схема автоколебательной системы [8], представляющая собой высокочастотную петлю из последовательно включённых импедансов диода, нагрузки и эдс собственных шумов диода. Для такой схемы уже получены общие выражения для спектров флуктуаций генерируемого сигнала. Реальная схема сумматора мощности представляет собой суммирующий резонатор, связанный с системой диодных модулей и нагрузкой трансформаторами связи. Используя метод редуцирования [3,4], пересчитав элементы диодных модулей в контур суммирующего резонатора и объединив соответствующие элементы, исходную схему сумматора можно свести к указанной выше обобщённой схеме. Таким образом, дальнейший расчёт интересующего спектра флуктуаций сводится к применению результатов, полученных для обобщённой схемы [8].

Естественно, что итоги исследования, основанного на совместном использовании методов редуцирования и обобщённой эквивалентной схемы, зависят от результатов пересчёта элементов диодных модулей в контур суммирующего резонатора. Результаты указанного пересчёта, в свою очередь, зависят от стратегии настройки генератора в процессе увеличения числа диодов [3,4]. Очевидно, что при изменении числа диодов электродинамическую систему генератора необходимо подстраивать так, чтобы амплитуда колебаний на каждом активном

элементе оставалась неизменной. Выполнения этого условия можно достичь разными способами, в том числе двумя типичными [3,4]. Первый способ – подстройка нагрузки (изменение связи суммирующего резонатора с нагрузкой), второй – подстройка диодных модулей (изменение связи каждого диодного модуля с суммирующим резонатором).

Таким образом, расчёт спектра флуктуаций фазы должен быть проведён для различных способов настройки генератора. В дальнейшем будем полагать, что источниками флуктуаций являются собственные СВЧ шумы диодных модулей, корреляция квадратурных компонент источников шума отсутствует, все модули идентичны, а связь модулей и нагрузки с суммирующим резонатором осуществляется идеальными трансформаторами.

Указанные упрощающие предположения не снимают принципиальных трудностей определения спектра фазовых флуктуаций. Дело в том, что спектральная плотность $S_{\varphi}(\Omega)$ флуктуаций $\varphi(t)$ фазы сигнала (здесь Ω – частота флуктуаций, t – время), как правило, вводится при условии стационарности случайных процессов. В этом случае спектральная плотность флуктуаций фазы $S_{\varphi}(\Omega)$ связана со спектральной плотностью $S_{\nu}(\Omega)$ флуктуаций $\nu(t)$ круговой частоты ω сигнала соотношением [9-11]

$$S_{\varphi}(\Omega) = \frac{1}{\Omega^2} S_{\nu}(\Omega). \quad (1)$$

Это равенство обусловлено тем, что флуктуация частоты $\nu(t)$ является производной от флуктуации фазы $\varphi(t)$ [9].

Однако фаза колебания реального автогенератора в большинстве случаев статистически нестационарна [10,11]. Тем не менее, в [10] показано, что спектральную плотность флуктуаций фазы можно определить и для нестационарных процессов, если они являются процессами со стационарными приращениями. Дополнительно к сказанному можно дать ещё одно приближённое обоснование применимости понятия спектральной плотности флуктуаций фазы для нестационарных процессов. Очевидно, что «достаточно быстрые изменения фазы можно приближённо считать стационарными в интервале времени, ограниченном малостью изменения среднего значения фазы» [11]. Это означает, что на частотах значительно превышающих ширину спектральной линии, флуктуации фазы условно можно считать стационарными, а их энергетический спектр – не зависящим от времени

параметром. Вышесказанное следует учитывать при учёте границ применимости искомой спектральной плотности.

Для определения спектра флуктуаций фазы многодиодного генератора воспользуемся данными расчёта спектральной плотности флуктуаций частоты, полученными в работе [6], и выражением (1).

Предположим, что настройка генераторов проводится первым способом. В этом случае спектральные плотности флуктуаций частоты многодиодного $S_{vN}(\Omega)$ и однодиодного $S_{v1}(\Omega)$ генераторов определяются выражениями [6]

$$S_{vN}(\Omega) = \frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \frac{a^2}{N} \left(1 + \frac{q_N^2}{p_N^2 + \Omega^2} \right), \quad (2)$$

$$S_{v1}(\Omega) = \frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \left(1 + \frac{q_1^2}{p_1^2 + \Omega^2} \right), \quad (3)$$

где

$$p_1^2 = \frac{I_1^2}{(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \left(\frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1} \right)^2, \\ q_1^2 = \frac{I_1^2}{(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \left(\frac{\partial X_1}{\partial I_1} \right)^2, \\ a = \frac{N(q_\phi + 1)}{q_\phi + N}, \quad (4)$$

$$p_N = p_1 a, \quad (5)$$

$$q_N = q_1 a. \quad (6)$$

В этих и последующих выражениях индексы 1 и N у символов означают, что они относятся соответственно к однодиодному и N -диодному генератору, штрих означает производную по частоте; $2S_{u1}$ – сумма спектральных плотностей напряжения квадратурных компонент собственных шумов диода [5,6]; I_1 – амплитуда СВЧ тока в контуре суммирующего резонатора однодиодного генератора; $q_\phi = X_p'/X_1'$ – параметр фиксирующей способности контура, равный отношению фиксирующей способности суммирующего резонатора X_p' к внесённой фиксирующей способности X_1' диодного модуля в однодиодном генераторе; X_p' – мнимая часть импеданса суммирующего резонатора; X_1' – мнимая часть импеданса диодного модуля, включающая и реактивность диода и пересчитанная в контур суммирующего резонатора; p_1 и p_N – прочность предельного цикла соответственно однодиодного и многодиодного генераторов; q_1 и q_N – величины неизохронности соответственно однодиодного и многодиодного генераторов; R_{d1} – модуль активного сопротивления диода, пересчитанный в контур суммирующего резонатора, a – коэффициент преобразования прочности предельного цикла, равный отношению прочности предельного цикла p_N многодиодного генератора к прочности предельного цикла p_1 однодиодного [6]. При увеличении параметра фиксирующей способности контура q_ϕ от значений $q_\phi \approx 0$ до величин $q_\phi \gg N$ коэффициент a возрастает в пределах от 1 до N .

Подстановка в (1) соотношений (2) и (3), приводит к следующим выражениям для спектральных

плотностей флуктуаций фазы многодиодного $S_{\phi N}(\Omega)$ и однодиодного $S_{\phi 1}(\Omega)$ генераторов

$$S_{\phi N}(\Omega) = \frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \frac{a^2}{N} \frac{1}{\Omega^2} \left(1 + \frac{q_N^2}{p_N^2 + \Omega^2} \right), \quad (7)$$

$$S_{\phi 1}(\Omega) = \frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \frac{1}{\Omega^2} \left(1 + \frac{q_1^2}{p_1^2 + \Omega^2} \right). \quad (8)$$

Характер зависимости спектров флуктуаций фазы $S_{\phi N}(\Omega)$ и $S_{\phi 1}(\Omega)$ от частоты одинаков, но числовые характеристики этой зависимости, естественно, отличаются, так как в соответствии с выражениями (4-6) отличаются прочность предельного цикла и неизохронность генераторов.

Для сравнения уровней фазовых флуктуаций одно- и многодиодного генераторов на различных частотах выражения (7) и (8) не совсем удобны. В работах [12-15] обосновано, что в таких случаях целесообразно вводить в рассмотрение коэффициенты коллективной трансформации шумов. В качестве коэффициента коллективной трансформации фазовых шумов в многодиодном генераторе примем отношение спектральных плотностей $G_\phi(\Omega) = S_{\phi N}(\Omega) / S_{\phi 1}(\Omega)$. Согласно выражениям (7) и (8), указанный коэффициент имеет вид

$$G_\phi(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 + q_1^2)a^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{(p_1^2 + q_1^2) + \Omega^2}. \quad (9)$$

Проанализируем зависимость коэффициент коллективной трансформации $G_\phi(\Omega)$ от параметра фиксирующей способности контура q_ϕ , определяемого свойствами электродинамической системы генераторов.

Предположим, что параметр фиксирующей способности контура мал и $q_\phi \ll 1$. Тогда коэффициент преобразования прочности предельного цикла и неизохронности генератора $a \approx 1$, и коэффициент коллективной трансформации $G_\phi(\Omega)$ на всех частотах Ω практически одинаков и равен $1/N$. Уровень фазового шума многодиодного генератора в N раз ниже, чем у однодиодного

Если параметр фиксирующей способности достаточно высок и $q_\phi \gg N$, то коэффициент преобразования $a \approx N$, характер зависимости коэффициента коллективной трансформации от частоты сохраняется, но принимает вид

$$G_\phi(\Omega) = N \frac{(p_1^2 + q_1^2)N^2 + \Omega^2}{p_1^2 N^2 + \Omega^2} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{(p_1^2 + q_1^2) + \Omega^2}. \quad (10)$$

Особенность зависимости (10) заключается в том, что и на низких частотах Ω , когда $\Omega \ll (p_1^2 + q_1^2)^{1/2}$, и на высоких частотах, когда $\Omega \gg (p_1^2 + q_1^2)^{1/2}$ предельные значения коэффициента коллективной трансформации $G_\phi(\Omega)$ одинаковы и равны N . Уровень фазового шума многодиодного генератора в среднем оказывается в N раз выше, чем у однодиодного.

Перейдём к рассмотрению связи спектров флуктуаций фазы при втором способе настройки многодиодного генератора, когда увеличение числа диодов сопровождается подстройкой диодных модулей. Используя выражения работы [6] для частотных спектров флуктуаций, нетрудно показать, что в этом случае указанная связь имеет простой вид

$$S_{\varphi N}(\Omega) = S_{\varphi 1}(\Omega) \frac{1}{N}.$$

Уровень фазовых флуктуаций сигнала многодиодного генератора по сравнению с однодиодным в N раз ниже.

Таким образом, вопросы минимизации фазовых шумов многодиодного генератора тесно связаны с оптимальным выбором стратегии его настройки и параметров электродинамической системы. Основные выводы представленного расчёта были подтверждены

экспериментами на многодиодных генераторах 1,5 – сантиметрового диапазона длин волн [3,16,17]. В заключение отметим, что использованная методика расчёта может быть применена также для расчёта спектра флуктуаций фазы с учётом корреляции квадратурных компонент внутренних источников СВЧ шумов [18]. Необходимые для этого сведения о спектрах флуктуаций частоты содержатся в работе [18].

Библиографический список

1. Kurokawa K. The single-cavity multiple-device oscillator // IEEE Trans. - 1971. - V. MTT-19, № 10. - P.793-801.
2. Абрамов С.М., Гершензон Е.М., Левитес А.А., Плохова Л.А. Особенности работы многодиодного СВЧ-генератора в автономном режиме и режиме внешней синхронизации // Радиотехника и электроника. – 1988. - Т. 33, № 1. – С. 103-113.
3. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С. Анализ энергетических и шумовых характеристик многодиодных СВЧ-генераторов при различных способах настройки // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ-техника. - 1997. - В. 2. - С. 28-31.
4. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодных СВЧ генераторов с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики. Саратов, 1997. – Вып. 3. – С. 47-70.
5. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Кудряшов С.А. Амплитудный шум многодиодных генераторов СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2003. – Вып. 9. – С. 86-88.
6. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Частотный шум многодиодных генераторов СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2004. – Вып. 10. – С. 22-26.
7. Шаповалов А.С., Машников В.В., Шаповалов С.А. Взаимный спектр амплитудно-частотных флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2005. – Вып. 12. – С. 84-89.
8. Шаповалов А.С. Исследование флуктуаций сигнала полупроводникового СВЧ генератора // Вопросы электроники СВЧ: Межвуз. науч. сб. Саратов. Изд-во Саратов. ун-та. – 1985. – В. 14. – С. 15-22.
9. Свешников А.А. Прикладные методы теории случайных функций. - М. Наука, 1968. – 464 с.
10. Малахов А.Н. Флуктуации в автоколебательных системах. – М. Наука, 1968. – 660 с.
11. Корнилов С.А., Савшинский В.А., Уман С.Д. Шумы клистронных генераторов малой мощности. – М. Советское радио, 1972. – 200 с.
12. Шаповалов А.С., Машников В.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Система коэффициентов коллективной трансформации флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2010. – Вып. 17. – С. 33-38.
13. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Анализ коэффициентов коллективной трансформации амплитудных и амплитудно-частотных спектров флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2011. – Вып. 18. – С. 29-33.
14. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Анализ коэффициента коллективной трансформации модуляционных спектров частотных флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2012. – Вып. 19. – С. 44-48.
15. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Об одном коэффициенте коллективной трансформации шумов многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2013. – Вып. 20. – С. 35-38.
16. Никитин А.А., Шаповалов А.С. Экспериментальное исследование многодиодных генераторов на многоструктурных ЛПД // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ-техника. - 1999. - В. 2. - С. 7-9.
17. Шаповалов А.С., Никитин А.А., Кудряшов С.А. Многодиодный СВЧ-генератор с электрической перестройкой частоты // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. - 1991. - В. 10. - С. 19-21.
18. Шаповалов А.С., Кудряшов С.А., Шаповалова И.А. Влияние корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников на спектр флуктуаций частоты сигнала многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2008. – Вып. 15. – С. 40-43.

PHASE FLUCTUATIONS OF SIGNAL OF THE MULTIDIODE MICROWAVE OSCILLATOR

¹A.S. Shapovalov, ¹V.V. Mashnikov, ²L.M. Minkin

¹Saratov State University,

²Portland State University, USA

The phase fluctuations of the signal of a multi-diode microwave generator are investigated. Expressions are presented for the spectrum of phase fluctuations caused by microwave noise of active elements. It is shown that the level of the phase noise of the generator depends on the tuning strategy and the features of its electrodynamic system.

ВЗАИМНЫЙ СПЕКТР ФЛУКТУАЦИЙ АМПЛИТУДЫ И ФАЗЫ СИГНАЛА МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ

А.С. Шаповалов, Л.М. Минкин

Саратовский государственный университет

Шаповалов Александр Степанович,

д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов

Portland State University, USA

Минкин Леонид Моисеевич, профессор

Исследуется влияние числа активных элементов на взаимный спектр амплитудно-фазовых флуктуации сигнала многодиодного генератора СВЧ. Определяется взаимная спектральная плотность флуктуаций многодиодного генератора СВЧ с произвольной фиксирующей способностью колебательного контура. Показано, что изменение взаимной спектральной плотности флуктуаций при увеличении числа диодов зависит от стратегии настройки генератора и особенностей его электродинамической системы.

Исследования зависимости выходных шумов многодиодных генераторов – сумматоров мощности от числа активных элементов потребовали расчёта спектральных плотностей флуктуаций сигнала, генерируемого подобными системами [1-3]. Большая часть таких спектров была представлена в работах [4-8]. Однако некоторые из них в отмеченных работах получены не были. К их числу относится и такой теоретически важный шумовой параметр, как взаимный спектр амплитудно-фазовых флуктуаций сигнала. Это обстоятельство придаёт расчётам [4-8] незавершённый характер. Данная работа направлена на устранение этого пробела и расчёт взаимной спектральной плотности амплитудно-фазовых флуктуаций, вызываемых собственными шумами диодных модулей генератора.

Основу исследуемого многодиодного генератора составляет суммирующий резонатор, связанный с нагрузкой и системой диодных модулей трансформаторами связи. Путём пересчёта нагрузки и элементов диодных модулей (импедансов, эдс источников шума) в контур суммирующего резонатора исходную эквивалентную схему устройства нетрудно свести к обобщённой эквивалентной схеме автоколебательной системы, рассмотренной в [9]. Ранее для этой схемы были получены общие выражения для спектров флуктуаций генерируемого сигнала. Таким образом, для решения поставленной задачи можно использовать выражения, соответствующие обобщённой схеме, при условии, что её параметры учитывают результаты пересчёта элементов диодных модулей и нагрузки в контур суммирующего резонатора. Итоги указанного пересчёта, а, следовательно, и параметры обобщённой схемы, естественно, зависят от стратегии настройки генератора, обеспечивающей неизменность амплитуды колебаний на каждом активном элементе.

В данной работе взаимный спектр амплитудно-фазовых флуктуаций рассчитывается для двух типичных способов настройки генератора [4,5]. В качестве первого способа принимается подстройка нагрузки путём изменения её связи с суммирующим резонатором. Второй способ – подстройка диодных модулей путём изменения их связи с суммирующим резонатором. Диодные модули считаются идентичными, трансформаторы связи – идеальными, источники собственных шумов диодных модулей – независимыми. Корреляцией квадратурных компонент собственных источников шума будем пренебрегать.

Поскольку флуктуация $v(t)$ круговой частоты является производной от флуктуации $\varphi(t)$ фазы сигнала взаимная спектральная плотность $S_{av}(\Omega)$ амплитудно-частотных флуктуаций связана с взаимным спектром амплитудно-фазовых флуктуаций $S_{\alpha\varphi}(\Omega)$ (здесь t – время, Ω – частота флуктуаций) соотношением [10]

$$S_{av}(\Omega) = -j\Omega S_{\alpha\varphi}(\Omega). \tag{1}$$

Следовательно, для определения взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций можно воспользоваться выражениями для взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций сигнала, полученными в работе [8] по описанной методике, и соотношением (1).

Рассмотрим взаимные спектры флуктуаций сигнала при первом способе настройки генераторов (подстройка нагрузки). В этом случае выражения для взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций N -диодного $S_{avN}(\Omega)$ и однодиодного $S_{av1}(\Omega)$ генераторов имеют вид [8]

$$S_{avN}(\Omega) = -\frac{2S_{u1}N}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + N)^2} \frac{q_N}{p_N^2 + \Omega^2}, \tag{2}$$

$$S_{av1}(\Omega) = -\frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \frac{q_1}{p_1^2 + \Omega^2}, \tag{3}$$

где

$$p_1^2 = \frac{I_1^2}{(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \left(\frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1} \right)^2,$$

$$q_1^2 = \frac{I_1^2}{(X_1')^2(q_\phi + 1)^2} \left(\frac{\partial X_1}{\partial I_1} \right)^2,$$

$$p_N = p_1 a, \tag{4}$$

$$q_N = q_1 a. \tag{5}$$

$$a = \frac{N(q_\phi + 1)}{q_\phi + N}, \tag{6}$$

индексы 1 и N у символов означают, что они относятся соответственно к однодиодному и N -диодному генератору, штрих означает производную по частоте; $2S_{u1}$ – сумма спектральных плотностей напряжения квадратурных компонент собственных шумов диода [8]; I_1 – амплитуда СВЧ тока в контуре суммирующего резонатора однодиодного генератора; $q_\phi = X_p'/X_1'$ – параметр фиксирующей способности контура; X_p' – фиксирующая способности суммирующего резонато-

ра; X_1^* – внесенная фиксирующей способности диодного модуля в однодиодном генераторе; X_p – мнимая часть импеданса суммирующего резонатора; X_1 – мнимая часть импеданса диодного модуля, включающая и реактивность диода и пересчитанная в контур суммирующего резонатора; p_1 и p_N – прочность предельного цикла соответственно однодиодного и N -диодного генераторов; q_1 и q_N величины неизохронности соответственно однодиодного и N -диодного генераторов; R_{d1} – модуль активного сопротивления диода, пересчитанный в контур суммирующего резонатора, a – коэффициент преобразования прочности предельного цикла и неизохронности генератора;

Используя соотношения (2),(3) и (1), взаимные спектральные плотности амплитудно-фазовых флуктуаций N -диодного и однодиодного генераторов можно представить так:

$$S_{\alpha\phi N}(\Omega) = -j \frac{2S_{u1}N}{I_1^2(X_1^*)^2(q_\phi + N)^2} \frac{1}{\Omega} \frac{q_N}{p_N^2 + \Omega^2}, \quad (7)$$

$$S_{\alpha\phi 1}(\Omega) = -j \frac{2S_{u1}}{I_1^2(X_1^*)^2(q_\phi + 1)^2} \frac{1}{\Omega} \frac{q_1}{p_1^2 + \Omega^2}, \quad (8)$$

В рассмотренном случае спектр флуктуаций оказался мнимым. Это объясняется тем, что он возникает вследствие неизохронности генераторов. Нетрудно показать [8,11], что причиной корреляция амплитудных и фазовых флуктуаций может служить не только неизохронность генератора, но и корреляция квадратурных компонент источников шума. В этом случае взаимный спектр имеет и вещественную часть.

Полученные спектральные плотности зависят от достаточно большого числа параметров, в том числе от числа диодов N , параметра фиксирующей способности контура q_ϕ , частоты Ω . Поэтому сравнение уровней взаимного спектра флуктуаций для N -диодного и однодиодного генераторов в общем случае является затруднительным. Простая связь спектров наблюдается лишь при малых значениях параметра фиксирующей способности контура, когда $q_\phi \ll 1$. В этом случае коэффициент преобразования прочности предельного цикла и неизохронности генератора $a \approx 1$ и из выражений (7),(8) следует

$$S_{\alpha\phi N}(\Omega) = \frac{1}{N} S_{\alpha\phi 1}(\Omega). \quad (9)$$

В общем случае для удобства сравнения взаимных спектров N -диодного и однодиодного генераторов целесообразно ввести в рассмотрение коэффициент коллективной трансформации спектров [12-15]. Применительно к решаемой задаче его можно определить как отношение взаимных спектральных плотностей амплитудно-фазовых флуктуаций выходных сигналов сравниваемых генераторов $G_{\alpha\phi}(\Omega) = S_{\alpha\phi N}(\Omega)/S_{\alpha\phi 1}(\Omega)$. Согласно выражениям (4)-(8) он имеет вид

$$G_{\alpha\phi}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (10)$$

Если параметр фиксирующей способности контура мал (уже рассмотренный случай) и $q_\phi \ll 1$, $a \approx 1$, то на всех частотах флуктуаций $G_{\alpha\phi}(\Omega) = 1/N$.

Рост параметра фиксирующей способности контура ведёт к увеличению параметра преобразования a и повышению коэффициента коллективной трансформации $G_{\alpha\phi}(\Omega)$. Так при высоких значениях параметра фиксирующей способности, когда $q_\phi \gg N$ и $a \approx N$, из (10) следует, что

$$G_{\alpha\phi}(\Omega) = N^2 \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 N^2 + \Omega^2}, \quad (11)$$

а эта величина превышает 1 на всех частотах, кроме точки $\Omega=0$. Уровень взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций сигнала многодиодного генератора превышает соответствующую величину однодиодной системы. При этом степень повышения уровня спектра тем выше, чем выше частота флуктуаций. На низких частотах флуктуаций, удовлетворяющих условию $\Omega^2 \ll p_1^2$, коэффициент трансформации взаимного спектра $G_{\alpha\phi}(\Omega)$, как видно из (11), практически равен 1. На высоких частотах, когда $\Omega^2 \gg N^2 p_1^2$, он фактически равен $G_{\alpha\phi}(\Omega) = N^2$.

Рассмотрим преобразование взаимных спектров флуктуаций сигнала при втором способе настройки генератора, когда в процессе увеличения числа диодов согласование импедансов диодов и нагрузки осуществляется посредством корректировки связи каждого диодного модуля с суммирующим резонатором при неизменной связи суммирующего резонатора с нагрузкой. Использование результатов работы [8] в этом случае показывает, что взаимные спектральные плотности амплитудно-фазовых флуктуаций сигналов многодиодного и однодиодного генераторов связаны соотношением (9) и, следовательно,

$$G_{\alpha\phi}(\Omega) = \frac{1}{N}.$$

Уровень взаимной спектральной плотности флуктуаций сигнала многодиодного генератора на всех частотах в N раз ниже, чем у однодиодного.

Таким образом, проведённый анализ показывает, что зависимость взаимной спектральной плотности флуктуаций сигнала многодиодного генератора от числа активных элементов определяется выбором стратегии настройки и параметров электродинамической системы. Это обстоятельство необходимо учитывать при решении проблемы уменьшения шумов выходного сигнала многодиодного генератора.

В заключение отметим, что аналогичный расчёт взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций можно провести и с учётом корреляции квадратурных компонент источников шума. Все необходимые для этого исходные данные имеются в работе [8].

Библиографический список

1. Абрамов С.М., Гершензон Е.М., Левитес А.А., Плохова Л.А. Особенности работы многодиодного СВЧ-генератора в автономном режиме и режиме внешней синхронизации // Радиотехника и электроника. – 1988. - Т. 33, № 1. – С. 103-113.
2. Шаповалов А.С., Никитин А.А., Кудряшов С.А. Многодиодный СВЧ-генератор с электрической перестройкой частоты // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. - 1991. - В. 10. - С. 19-21.
3. Никитин А.А., Шаповалов А.С. Экспериментальное исследование многодиодных генераторов на многоструктурных ЛПД // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ-техника. - 1999. - Вып. 2. - С. 7-9.
4. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С. Анализ энергетических и шумовых характеристик многодиодных СВЧ-генераторов при различных способах настройки // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ-техника. - 1997. - Вып. 2. - С. 28-31.
5. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодных СВЧ генераторов с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики. Саратов, 1997. – Вып. 3. – С. 47-70.
6. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Кудряшов С.А. Амплитудный шум многодиодных генераторов СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2003. – Вып. 9. – С. 86-88.
7. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Частотный шум многодиодных генераторов СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2004. – Вып. 10. – С. 22-26.
8. Шаповалов А.С., Машников В.В., Шаповалов С.А. Взаимный спектр амплитудно-частотных флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2005. – Вып. 12. – С. 84-89.
9. Шаповалов А.С. Исследование флуктуаций сигнала полупроводникового СВЧ генератора // Вопросы электроники СВЧ: Межвуз. науч. сб. Саратов. Изд-во СГУ. – 1985. – Вып. 14. – С. 15-22.
10. Свешников А.А. Прикладные методы теории случайных функций. - М. Наука, 1968. – 464 с.
11. Шаповалов А.С. Исследование влияния сверхвысокочастотных и низкочастотных источников флуктуаций на шумовые параметры твёрдотельного генератора // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов. Изд-во СГУ. – 1989. – В. 2. – С. 3-19. – ISSN 0868-6238.
12. Шаповалов А.С., Машников В.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Система коэффициентов коллективной трансформации флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2010. – Вып. 17. – С. 33-38.
13. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Анализ коэффициентов коллективной трансформации амплитудных и амплитудно-частотных спектров флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2011. – Вып. 18. – С. 29-33.
14. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Анализ коэффициента коллективной трансформации модуляционных спектров частотных флуктуаций многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2012. – Вып. 19. – С. 44-48.
15. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Об одном коэффициенте коллективной трансформации шумов многодиодного генератора СВЧ. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2013. – Вып. 20. – С. 35-38.

**MUTUAL SPECTRUM OF AMPLITUDE AND PHASE FLUCTUATIONS
OF SIGNAL OF MULTIDIODE MICROWAVE GENERATOR**

¹A.S. Shapovalov, ²L.M. Minkin

¹Saratov State University,

²Portland State University, USA

The influence of the number of active elements on the mutual spectrum of the amplitude and phase fluctuations of the signal of a multi-diode microwave generator is investigated. The mutual spectral density of the fluctuations of the multichannel microwave generator with an arbitrary fixing capacity of the oscillatory circuit is determined. It is shown that the change in the mutual spectral density of fluctuations with increasing number of diodes depends on the tuning strategy of the generator and the features of its electrodynamic system.

ВЛИЯНИЕ ДИСКРЕТИЗАЦИИ ТРЕУГОЛЬНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ПАРАМЕТРА ИНТЕНСИВНОСТИ ЭМИССИИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА
НЕОДНОРОДНОГО ЭМИТТЕРА

М.Г. Инкин, К.В. Мироненко, А.С. Шаповалов

Саратовский государственный университет

Инкин Максим Глебович, студент физического факультета

Мироненко Ксения Витальевна, студентка физического факультета

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов

На примере усечённого распределения Симпсона исследуется влияние дискретизации и вида кривой распределения параметра интенсивности эмиссии на уровень аномального дробового шума неоднородного катода. Проведена численная оценка влияния дискретизации на уровень шума.

При практическом использовании общей теории аномального дробового шума неоднородного эмиттера [1-5] используется значительное количество статистических моделей неоднородного катода, отличающихся различными законами распределения параметра интенсивности эмиссии [2,6-12]. Все они разрабатывались для получения дополнительных данных об энергетических и частотных характеристиках этой разновидности шума. В рамках этих работ параметр интенсивности эмиссии λ (условное математическое ожидание числа электронов, эмитируемых в единицу времени при условии, что катод находится в данном эмиссионном состоянии) рассматривался как непрерывной, так и дискретной случайной величиной. Указанные модели были названы соответственно непрерывными и дискретными. Такое направление теоретических работ объясняется необходимостью обобщения данных о свойствах аномального дробового шума по множеству распределений параметра интенсивности. В данной работе на примере распределения λ по усечённому модификациям закона Симпсона решаются две задачи. Одна из них заключается в определении влияния на максимальный уровень шума эффекта дискретизации возможных значений λ . Другая – в оценке влияния на этот уровень вида кривой исходного распределения.

Как показали предыдущие исследования [1-5], коэффициент повышения интенсивности полного дробового шума γ по сравнению с уровнем Шоттки зависит от частоты ω . С ростом частоты он монотонно уменьшается и асимптотически стремится к 1, что означает стремление спектральной плотности дробового шума к величине $eI_0/2\pi$, определяемой формулой Шоттки (здесь I_0 – постоянная составляющая тока эмиссии, e – модуль заряда электрона). Такое поведение коэффициента γ объясняется снижением уровня аномальной компоненты полного дробового шума. Фактически величина γ является нормированной к величине $eI_0/2\pi$ спектральной плотностью полного дробового шума, а величина $\gamma-1$ представляет собой нормированную спектральную плотность аномальной компоненты дробового шума. Для краткости и ту, и другую можно называть уровнями соответственно полного дробового шума или его аномальной компоненты.

В дальнейшем под максимальным уровнем полного дробового будет пониматься величина $\gamma_0 = \gamma(\omega \rightarrow 0)$. В работах [1-5] показано, что при $\omega \rightarrow 0$

максимальный уровень шума γ_0 совпадает с квадратом коэффициента вариации интервала τ . Таким образом, поставленная задача сводится к расчёту коэффициента вариации интервала.

Вопрос о максимальном уровне дробового шума γ_0 при распределении параметра интенсивности λ по закону Симпсона и его усечённым модификациям уже рассматривался в работе [7], но, естественно, только в рамках непрерывных моделей неоднородного эмиттера, когда λ является непрерывной случайной величиной. В дальнейшем будем рассматривать только две модификации непрерывной модели. Для первой модификации усечённого закона Симпсона, содержащей только линейно нарастающую ветвь плотности вероятности λ , максимальный уровень шума γ_0 определяется выражением [7]

$$\gamma_0 = \frac{(\eta - 1)^2 (1 - \eta + \eta \ln \eta)}{\eta (\eta - 1 - \ln \eta)^2} - 1, \quad (1)$$

где $\eta = \lambda_a / \lambda_p$ – перепад параметра интенсивности эмиссии, λ_a и λ_p – соответственно наибольшее и наименьшее значения параметра интенсивности ($\lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a$), соответствующие наиболее активному и наиболее пассивному эмиссионным состояниям. Для краткости подобный тип модели назовём «растущим треугольником распределения». Объяснение происхождения этого термина будет дано ниже. Для второй модификации усечённого закона Симпсона, содержащей только спадающую ветвь плотности вероятности λ , (назовём её моделью «падающего треугольника распределения») уровень γ_0 имеет вид [7]

$$\gamma_0 = \frac{(\eta - 1)^2 (\eta - 1 - \ln \eta)}{(\eta - 1 - \eta \ln \eta)^2} - 1, \quad (2)$$

Таким образом, выражения (1),(2) позволяют рассчитать γ_0 для любой из двух непрерывных моделей. Теперь введём в рассмотрение соответственно две дискретных модели эмиттера, отвечающих приведённым типам распределения.

При построении дискретных моделей неоднородного эмиттера предположим, что параметр интенсивности может принимать лишь N возможных значений λ_i ($i=1,2,\dots,N$) в интервале $\lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a$, расстояние между его ближайшими значениями одинаково и равно $(\lambda_a - \lambda_p)/(N-1)$. Тогда выражение для λ_i в общем виде запишется так:

$$\lambda_i = \lambda_0 \left[1 + \frac{\eta - 1}{\eta + 1} \left(2 \frac{i - 1}{N - 1} - 1 \right) \right].$$

Для дискретной модели «растущего треугольника распределения» вероятность p_i значения λ_i пропорциональна величине $\lambda_i - \lambda_p$ и с учётом условия нормировки имеет вид

$$p_i = (\lambda_i - \lambda_p) \left[\sum_{i=1}^N (\lambda_i - \lambda_p) \right]^{-1}. \quad (3)$$

Для дискретных случайных величин одной из форм закона распределения является многоугольник распределения [13]. Нетрудно видеть, что в данном случае многоугольник распределения случайной величины λ_i имеет вид треугольника. Это объясняет происхождение названий обсуждаемых моделей.

Для модели «падающего треугольника распределения» аналогичные рассуждения приводят к выражению

$$p_i = (\lambda_a - \lambda_i) \left[\sum_{i=1}^N (\lambda_a - \lambda_i) \right]^{-1}. \quad (4)$$

Если в качестве условной плотности распределения интервала τ , отвечающей условию, что катод находится в данном эмиссионном состоянии, принять экспоненциальный закон, то безусловная плотность распределения интервала $f(\tau)$ опишется гиперэкспоненциальным законом [6,13]

$$f(\tau) = \sum_{i=1}^N p_i \lambda_i \exp(-\lambda_i \tau). \quad (5)$$

Выражения (3),(4) и (5) позволяют рассчитать квадрат коэффициента вариации интервала τ , а следовательно, и коэффициент максимального повышения уровня дробового шума для любой из дискретных моделей неоднородного эмиттера.

Для оценки влияния дискретизации параметра интенсивности λ на уровень дробового шума для двух описанных выше дискретных моделей неоднородного эмиттера были построены кривые зависимости величины γ_0 от числа N дозволённых значения λ . Указанные кривые показаны на рис. 1.

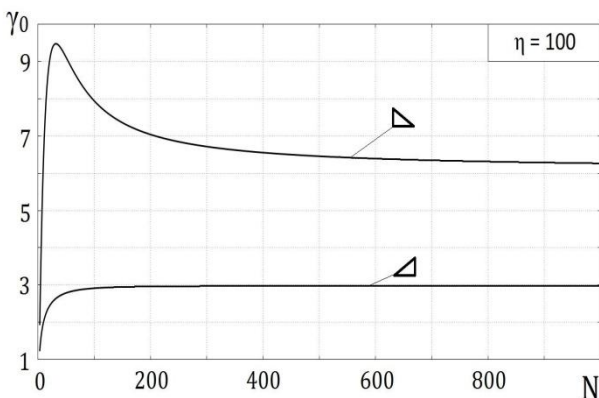


Рис. 1.

Соответствие кривых той или иной модели обозначено символами «треугольников растущего или падающего распределения». Расчёт проведён для

значения перепада параметра интенсивности эмиссии $\eta=100$.

Как и следовало ожидать, ординаты обеих кривых при $N=1000$ практически совпадают с расчётными значениями γ_0 , полученными для непрерывных моделей эмиттера на основе выражений (1) и (2). Более того, близость указанных значений γ_0 для непрерывных и дискретных моделей наблюдается уже при $N \approx 200$, если они соответствуют распределениям типа «падающий треугольник» вероятностей, и при $N \approx 100$ – если они соответствуют типу «растущий треугольник» вероятностей. Существенное отличие данных о γ_0 , соответствующих непрерывным и дискретным моделям, наблюдается в области $N < 200$. В дальнейшем при сравнении уровней шумов дискретных и непрерывных моделей ординаты кривых рис. 1 при $N=1000$ будем рассматривать как уровни шумов непрерывных моделей. Проведём такое сравнение последовательно для моделей различных типов, начиная с модели «падающий треугольник вероятностей».

Кривая рис. 1, отвечающая дискретной модели типа «падающий треугольник вероятностей», ведёт себя немонотонно и имеет максимум при $N \approx 30$. (При других значениях параметра перепада η положение максимума, естественно, будет другим). Приближение к точке $N \approx 30$ со стороны более высоких значений N сопровождается увеличением уровня шума γ_0 . Вблизи указанного значения N уровень дробового шума дискретной модели может превышать аналогичную величину для непрерывной модели этого же типа примерно в 1,5 раза. При уменьшении N в области $N < 30$ происходит падение уровня шума дискретной модели в несколько раз. В результате для дискретной модели он становится ниже, чем для непрерывной.

Кривая рис. 1, отвечающая дискретной модели типа «растущий треугольник» вероятностей показывает непрерывный рост уровня дробового шума с увеличением N . Это означает, что дискретизация модели отмеченного типа сопровождается уменьшением уровня шума.

Отметим, что при всех описанных изменениях полного уровня дробовых шумов величина γ_0 всегда остаётся больше 1, так как изменяется только аномальная составляющая спектральной плотности шума, а классическая составляющая, равная $eI_0/2\pi$ остаётся неизменной.

Сопоставление уровней шумов дискретных моделей различных типов показывает, что при прочих равных условиях уровень шума для модели типа «падающий треугольник вероятностей» всегда выше, чем для модели «растущий треугольник вероятностей».

Кривые рис.1 позволяют оценить степень влияния дискретизации распределения λ на уровень дробового шума только при одном фиксированном значении перепада параметра интенсивности эмиссии η . Для более полного представления о степени влиянии эффекта дискретизации целесообразно рассмотреть зависимость $\gamma_0 = \gamma_0(\eta)$ в максимально широких пределах изменения η и значениях N , близких к точке максимума рассмотренной выше кривой зависимости

$\gamma_0 = \gamma_0(N)$. С этой целью на основе выражений (3),(4) и (5) для дискретных моделей неоднородного эмиттера были рассчитаны кривые зависимости $\gamma_0 = \gamma_0(\eta)$, соответствующие $N=100$. Указанные кривые представлены на рис.2.

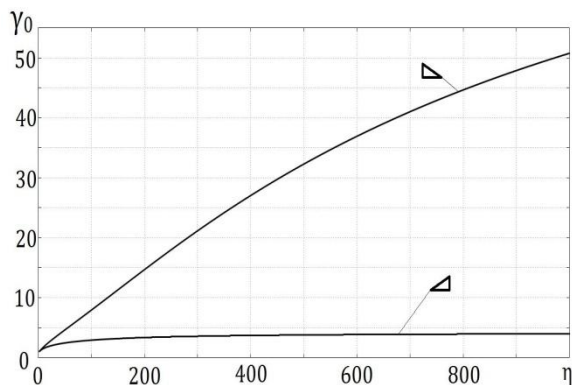


Рис. 2.

Аналогичные кривые для непрерывных моделей неоднородных эмиттеров рассматриваемых типов имеются в работе [7].

Кривые рис. 2 демонстрируют непрерывный рост уровня шумов γ_0 при увеличении степени неоднородности эмиттера, то есть перепада η параметра интенсивности эмиссии. При любом η уровень шумов модели типа «падающий треугольник вероятностей» существенно выше аналогичной величины для модели «растущий треугольник вероятностей»

Совместное использование кривых рис. 2 и кривых, представленных в работе [7], позволяет сравнить уровни шумов дискретных и непрерывных

моделей и дополнить данные о степень влияния эффекта дискретизации на γ_0 . Так, для модели «падающий треугольник вероятностей» степень влияния дискретизации может быть существенно выше той, что иллюстрируется кривой рис. 1. Действительно, по данным рис. 2 при $N=100$ и $\eta=1000$ для указанной дискретной модели $\gamma_0 = 52$. По данным работы [7] для непрерывной модели указанного типа эта величина составляет 27. Дискретизация значений λ приводит к увеличению уровня шума почти в 2 раза. При $N=100$ и $\eta=1000$ для дискретной модели «растущий треугольник вероятностей» из кривой рис. 2 следует $\gamma_0 = 4$. Для непрерывной модели указанного типа эта величина по результатам работы [7] составляет 5. Дискретизация модели этого типа вызывает уменьшения уровня на 20%.

Таким образом, проведённое исследование показывает, что дискретизация параметра интенсивности эмиссии рассмотренных моделей неоднородного эмиттера может приводить как к уменьшению, так и к увеличению уровня дробового шума. Характер изменения уровня шума зависит от вида многоугольника распределения параметра интенсивности эмиссии. Для модели неоднородного эмиттера типа «падающий треугольник распределения» увеличение уровня шума вследствие дискретизации параметра интенсивности эмиссии может составлять 1,5 - 2 раза.

Приведённые данные следует учитывать при объяснении результатов экспериментальных исследований.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С. Вероятностные расчёты в физике. Саратов.: Издательство «Саратовский источник», 2015, - 72 с.
2. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В. Аномальный дробовой шум на неоднородном потенциальном барьере // Гетеромагнитная микроэлектроника: Сб. науч. тр. / Под ред. проф. А.В. Ляшенко. – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, - 2016. – Вып. 20 : Гетеромагнитная микро- и наноэлектроника. Методические аспекты физического образования. Экономика в промышленности. – С. 41-46.
3. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу об уровне дробового шума термокатода // ЖТФ. – 1974. – Т. 44, № 10. – С. 2174-2177.
4. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу о спектральной плотности флуктуаций тока эмиссии термокатода // Изв. вузов. Радиофизика. – 1974. – Т. 17, № 12. – С. 1885-1890.
5. Шаповалов А.С., Денисов Ю.И. Статистический механизм возникновения аномальных дробовых шумов в потоках носителей заряда // Изв. вузов. Радиоэлектроника. – 1985. – Т. 28, № 5. – С. 88.
6. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
7. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Аношкин В.А. Влияние распределения параметра интенсивности эмиссии катода на уровень дробовых шумов // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2001. – Вып. 7. – С. 22-25.
8. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Особенности спектра аномального дробового шума неоднородного эмиттера при равномерном распределении параметра интенсивности эмиссии // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 35-38.
9. Мироненко К.В., Инкин М.Г., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Энергетические характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 52-53.
10. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 48-51.
11. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Многоуровневая дискретная модель неоднородного эмиттера и максимальный уровень аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 39-41.

12. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для многоуровневой дискретной модели неоднородного эмиттера // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 42-44.
13. Королук В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистике. М., Наука. 1985. – 640 с.

**THE INFLUENCE OF THE SAMPLING OF TRIANGULAR DISTRIBUTION
OF EMISSION INTENSITY PARAMETER TO ENERGY CHARACTERISTICS OF ANOMALOUS SHOT
NOISE OF THE INHOMOGENEOUS EMITTER**

M. G. Inkin., K.V. Mironenko, A. S. Shapovalov
Saratov State University

Using the example of the truncated Simpson distribution, the influence of sampling and the shape of the distribution curve of the emission intensity parameter on the level of anomalous shot noise of the inhomogeneous cathode is investigated. A numerical estimation of the influence of sampling on the noise level is carried out.

УВК 621.3.032.21

**ЧАСТОТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА
НЕОДНОРОДНОГО ЭМИТТЕРА С ДИСКРЕТНЫМ ТРЕУГОЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ
ПАРАМЕТРА ИНТЕНСИВНОСТИ ЭМИССИИ**

М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов, С.А. Шаповалов
Саратовский государственный университет
Инкин Максим Глебович, студент физического факультета
Шаповалов Александр Степанович,

д.ф.-м.н., профессор кафедры компьютерной физики и метаматериалов
КРЭТ, АО «АП Восход», г. Москва

Шаповалов Степан Александрович, начальник группы ОВК

Исследуются частотные характеристики аномального дробового шума неоднородного эмиттера с дискретным треугольным распределением параметра интенсивности эмиссии. Приводятся численные оценки ширины спектра шумов.

Исследование свойств аномального дробового шума [1], наблюдающегося на неоднородных эмиттерах электронов, представляет существенный интерес. Данная работа посвящена изучению частотных характеристик аномального дробового шума.

Как показано общей теорией флуктуаций тока эмиссии [1-5], спектральная плотность дробового шума на поверхности неоднородных эмиттеров, содержит две компоненты. Первая компонента – классическая - не зависит от частоты (временем пролёта пренебрегается) и описывается формулой Шоттки. Вторая компонента – аномальная - зависит от частоты и имеет ограниченный спектр. Её возникновение обычно связывают с тем, что реальный катод имеет множество эмиссионных состояний, непрерывно сменяющих друг друга. Различным эмиссионным состояниям соответствуют разные значения параметра интенсивности эмиссии λ . Вследствие непрерывной смены эмиссионных состояний этот параметр приобретает случайный характер, то есть рандомизируется. Для однородного эмиттера под параметром λ понимается среднее число электронов, эмитируемых в единицу времени. Для неоднородного катода – это условное математическое ожидание числа электронов, эмитируемых в единицу времени при условии, что эмиттер находится в данном эмиссионном состоянии. Эффект смены эмиссионных состояний приводит к тому, что последовательность актов испускания электронов перестаёт быть Пуассоновским процессом, то есть процессом «без последствия». Появление

последствия приводит к возникновению аномальной компоненты дробового шума и, следовательно, к увеличению полного уровня дробовых флуктуаций тока.

Энергетические и частотные характеристики аномального дробового шума определяются законом распределения параметра интенсивности эмиссии λ . В рамках различных статистических моделей неоднородного эмиттера параметр λ рассматривался и непрерывной [5-8], и дискретной [5,9-12] случайными величинами. Соответственно эти модели назывались непрерывными или дискретными. В связи с этим возникает вопрос: как изменяются свойства аномального дробового шума при дискретизации распределения λ . В данной работе осуществляется дискретизация двух усечённых модификаций треугольного распределения (распределения Симпсона), каждая из которых содержит или только нарастающую, или только спадающую ветвь плотности вероятности. По этой причине две исходные непрерывные модели будем называть соответственно моделями типа «растущий или падающий треугольник распределения». В результате дискретизации непрерывных моделей формируются две дискретных модели 1-го и 2-го типа, которые характеризуются «многоугольниками распределением» [13], имеющими вид «растущего или падающего треугольника».

Процедура дискретизации исходных непрерывных моделей эмиттера, когда $\lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a$, описана в работе [14]. Предполагается, что в указанной области катод имеет N эмиссионных состояний. В i -ом эмиссионном

состоянии катода условный закон распределения интервала времени τ между двумя последовательными актами испускания электронов является экспоненциальным и характеризуется значением параметром интенсивности эмиссии λ_i ($i=1,2,\dots,N$). Тогда безусловное распределение интервала $f(\tau)$ опишется гиперэкспоненциальным законом [13]

$$f(\tau) = \sum_{i=1}^N p_i \lambda_i \exp(-\lambda_i \tau), \quad (1)$$

где

$$\lambda_i = \lambda_0 \left[1 + \frac{\eta-1}{\eta+1} \left(2 \frac{i-1}{N-1} - 1 \right) \right], \quad (2)$$

$$p_i = \begin{cases} \left(\lambda_i - \lambda_p \right) \left[\sum_{i=1}^N (\lambda_i - \lambda_p) \right]^{-1} & \text{— для модели 1-го типа,} \\ \left(\lambda_a - \lambda_i \right) \left[\sum_{i=1}^N (\lambda_a - \lambda_i) \right]^{-1} & \text{— для модели 2-го типа,} \end{cases} \quad (3)$$

$\lambda_0 = (\lambda_a + \lambda_p)/2$ — центральное значение параметра интенсивности эмиссии; p_i — вероятность i -го эмиссионного состояния, рассчитанная при условии, что интервалы между двумя ближайшими значениями λ равны $(\lambda_a - \lambda_p)/(N-1)$; $\eta = \lambda_a / \lambda_p$ — перепад параметра интенсивности эмиссии.

Как показано общей теорией дробового шума [15], построенной для произвольного закона распределения $f(\tau)$, двухсторонняя спектральная плотность полного дробового шума (с учётом классической и аномальной компонент) в $\gamma(\omega)$ раз превышает уровень классической компоненты, определяемый формулой Шоттки и равный $eI_0/2\pi$ (здесь ω — круговая частота, e — модуль заряда электрона, I_0 — постоянная составляющая тока эмиссии). Таким образом, в нормированных к величине $eI_0/2\pi$ единицах уровень классической компоненты дробового шума равен 1, уровень аномальной компоненты равен $\gamma(\omega)-1$, уровень полного дробового шума — $\gamma(\omega)$. Задача о частотных характеристиках аномального дробового шума, по существу, сводится к расчёту коэффициента повышения $\gamma(\omega)$ полного дробового шума.

Используя выражение для $\gamma(\omega)$, отвечающее произвольному закону распределения интервала [1], и соотношения (1), (2) и (3) нетрудно получить следующую зависимость коэффициента $\gamma(\omega)$ от частоты для дискретной модели 1-го типа («растущий треугольник распределения»)

$$\gamma(\Omega) = 1 + 2 \frac{A_1 C_1 - B_1^2}{\Omega^2 C_1^2 + B_1^2}, \quad (4)$$

где

$$A_1(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(\lambda_i / \lambda_0)^2 (i-1)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}, \quad (5)$$

$$B_1(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(\lambda_i / \lambda_0) (i-1)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}, \quad (6)$$

$$C_1(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(i-1)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}, \quad (7)$$

$\Omega = \omega / \lambda_0$ — нормированная частота.

Для дискретной модели 2-го типа («падающий треугольник распределения») аналогичные выражения имеют вид

$$\gamma(\Omega) = 1 + 2 \frac{A_2 C_2 - B_2^2}{\Omega^2 C_2^2 + B_2^2}, \quad (8)$$

где

$$A_2(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(\lambda_i / \lambda_0)^2 (N-i)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}, \quad (9)$$

$$B_2(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(\lambda_i / \lambda_0) (N-i)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}, \quad (10)$$

$$C_2(\Omega) = \sum_{i=1}^N \frac{(N-i)}{(\lambda_i / \lambda_0)^2 + \Omega^2}. \quad (11)$$

Результаты численных расчетов зависимости коэффициента γ от безразмерной частоты Ω при фиксированном перепаде параметра интенсивности эмиссии $\eta=100$ и различных значениях N показаны на рис. 1-3. Соответствие кривых этих рисунков дискретным моделям 1-го и 2-го типов обозначено символами соответственно «растущего и падающего треугольников».

Кривые рис.1 соответствуют дискретной модели неоднородного эмиттера, содержащей $N=1000$ дозволённых значений параметра интенсивности эмиссии. Для дискретных моделей обоих типов кривые иллюстрируют монотонное уменьшение уровня полного шума γ при увеличении частоты. Его наибольшее значение γ_0 наблюдается при $\Omega \rightarrow 0$. При любой частоте уровень шумов для модели 1-го типа ниже, чем для модели 2-го типа. В то же время ширина спектра $\Delta\Omega$ аномальной компоненты дробового шума для 1-й модели оказывается выше.

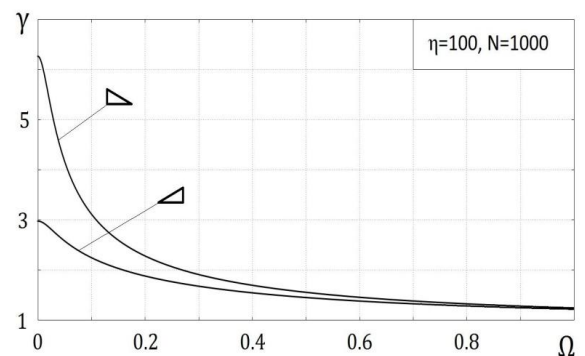


Рис. 1.

При $\Omega \gg 1$ величина γ стремится к 1, что свидетельствует о постепенном падении уровня аномальной компоненты и соответствующем ограничении ширины её спектра. Анализ кривых показывает, что ширина спектра $\Delta\Omega$ аномального дробового шума, определённая на уровне $(\gamma_0-1)/2$, для 1-й модели составляет 0,16, а для 2-й — равна 0,07. Для 1-й модели ширина спектра более, чем в 2 раза больше, чем для второй. Сравнение спектров шумов обсуждаемых моделей показывает, что при $N=1000$ проявляется следующая закономерность: чем больше γ_0 (наибольший, то есть низкочастотный, уровень дробового шума), тем меньше ширина спектр. В

результате произведение $\gamma_0\Delta\Omega$ для рассмотренных моделей довольно близки: для 1-й модели $\gamma_0\Delta\Omega=0,5$, для 2-й - $\gamma_0\Delta\Omega=0,45$.

Одна из важных особенностей кривых рис.1 заключается в том, что они подтверждают вывод, сделанный ранее для других моделей [11,12]. При $N\approx 1000$ энергетические (γ_0, γ_0-1) и частотные ($\gamma(\Omega), \Delta\Omega$) характеристики дискретных моделей практически близки к аналогичным характеристикам для соответствующих непрерывных моделей. Таким образом, при анализе кривых для различных дискретных моделей, рассматриваемых ниже, фактически можно считать, что рис.1 отражает свойства соответствующих непрерывных моделей. Как уже отмечалось ранее [14], заметное отличие характеристик дискретных и соответствующих непрерывных моделей начинает проявляться лишь при $N<100\div 200$. Это обстоятельство иллюстрируют кривые последующих рисунков.

На рис. 2 представлены кривые зависимости $\gamma=\gamma(\Omega)$ для рассматриваемых дискретных моделей при $N=100$. Их отличие от кривых рис.1 невелико. Для модели 1-го типа максимальный уровень шума γ_0 и ширина спектра изменились незначительно. Для модели 2-го типа максимальный уровень шума γ_0 увеличился на 30%, а ширина спектра уменьшилась на 35%. Тем не менее, кривые этого рисунка представляют существенный интерес. Они подтверждают отмеченную выше закономерность, наблюдающуюся при сравнении моделей различных типов: повышение максимального уровня шума γ_0 сопровождается уменьшением ширины спектра так, что произведение $\gamma_0\Delta\Omega$ изменяется незначительно. В данном случае для модели 1-го типа $\gamma_0\Delta\Omega=0,47$, а для модели 2-го типа - $\gamma_0\Delta\Omega=0,37$.

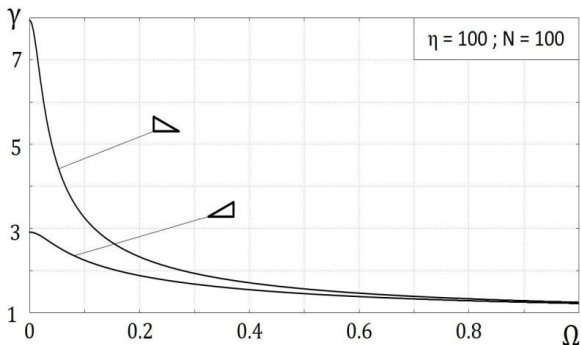


Рис. 2.

Существенное отличие характеристик дискретных моделей и их непрерывных аналогов наблюдается при $N<100$.

На рис. 3 приведены спектральные характеристики для дискретных моделей, которым отвечает $N=10$.

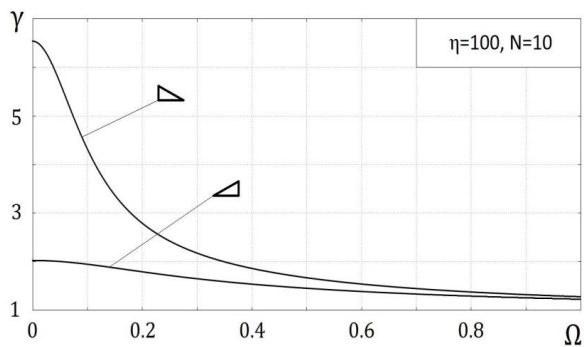


Рис. 3

Сравнение кривых рисунков 3 и 1 показывает, что переход от непрерывной модели к дискретной модели 1-го типа сопровождается увеличением ширины спектра аномального шума почти в 4 раза. При аналогичном переходе к дискретной модели 2-го типа ширина спектра увеличивается примерно в 2 раза.

Сопоставление кривых рис. 3 между собой подтверждает ранее сделанный вывод о том, что при смене типа дискретных моделей величина $\gamma_0\Delta\Omega$ играет роль приближённого инварианта. Действительно, при $N=10$ для 1-й модели $\gamma_0\Delta\Omega=1,2$, а для 2-й - $\gamma_0\Delta\Omega=0,8$.

Обобщение сведений о поведении величины $\gamma_0\Delta\Omega$ для всех рассмотренных моделей показывает, что при переходе от моделей типа «растущий треугольник распределения» к модели типа «падающий треугольник распределения» произведение $\gamma_0\Delta\Omega$ меняется незначительно. В первом приближении его можно считать инвариантом величиной порядка 1.

Таким образом, проведённый анализ показывает, что дискретизация рассмотренных усечённых модификаций распределения Симпсона может приводить к увеличению ширины спектра аномальной компоненты дробового шума в 2-4 раза. При изменении типов моделей произведение максимального уровня шума и ширины спектра в первом приближении остаётся неизменным.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С. Вероятностные расчёты в физике. Саратов.: Издательство «Саратовский источник», 2015, - 72 с.
2. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу об уровне дробового шума термокатода // ЖТФ. – 1974. – Т. 44, № 10. – С. 2174–2177.
3. Голубенцев А.Ф., Шаповалов А.С. К вопросу о спектральной плотности флуктуаций тока эмиссии термокатода // Изв. вузов. Радиофизика. – 1974. – Т. 17, № 12. – С. 1885-1890.
4. Шаповалов А.С., Денисов Ю.И. Статистический механизм возникновения аномальных дробовых шумов в потоках носителей заряда // Изв. вузов. Радиоэлектроника. – 1985. – Т. 28, № 5. – С. 88.
5. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
6. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В. Аномальный дробовой шум на неоднородном потенциальном барьере // Гетеромагнитная микроэлектроника: Сб. науч. тр. / Под ред. проф. А.В. Ляшенко. – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, - 2016. – Вып. 20 : Гетеромагнитная микро- и наноэлектроника. Методические аспекты физического образования. Экономика в промышленности. – С. 41-46.

7. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Аношкин В.А. Влияние распределения параметра интенсивности эмиссии катода на уровень дробовых шумов // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2001. – Вып. 7. – С. 22-25.
8. Шаповалов А.С., Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Особенности спектра аномального дробового шума неоднородного эмиттера при равномерном распределении параметра интенсивности эмиссии // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 35-38.
9. Мироненко К.В., Инкин М.Г., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Энергетические характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 52-53.
10. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Минкин Л.М., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для трёхуровневой симметричной модели неоднородного эмиттера. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2015. – Вып. 22. – С. 48-51.
11. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Многоуровневая дискретная модель неоднородного эмиттера и максимальный уровень аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – В. 23. – С. 39-41.
12. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для многоуровневой дискретной модели неоднородного эмиттера // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2016. – Вып. 23. – С. 42-44.
13. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятностей и математической статистики. М., Наука. 1985. – 640 с.
14. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Влияние дискретизации треугольного распределения параметра интенсивности эмиссии на энергетические характеристики аномального дробового шума неоднородного эмиттера // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2017. – Вып. 24. – С.33–36.

THE FREQUENCY CHARACTERISTICS OF ANOMALOUS SHOT NOISE
OF THE INHOMOGENEOUS EMITTER WITH DISCRETE TRIANGULAR DISTRIBUTION
OF EMISSION INTENSITY PARAMETER

¹M. G. Inkin, ¹A. S. Shapovalov, ²S.A. Shapovalov

¹Saratov State University

²«AP Voskhod», Moscow

The frequency characteristics of the anomalous shot noise of an inhomogeneous emitter with a discrete triangular distribution of the emission intensity parameter are investigated. Numerical estimates of the width of the noise spectrum are given.



**ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК СПЕКТРОВ
АЛИФАТИЧЕСКИХ α -АМИНОКИСЛОТ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ**

Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, В.И. Баранов

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н.

Саратовский научно-исследовательский противочумной институт «Микроб»

Щербакова Наталья Евгеньевна, м.н.с.

Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН

Баранов Виктор Иванович, д.ф.-м.н., зав. лаб. молекулярного моделирования

Выполнен расчёт и интерпретация колебательных спектров алифатических α -аминокислот – глицина, аланина, валина, лейцина и изолейцина – в водном растворе. Показано, что теоретические спектры, вычисленные с использованием метода реактивного поля SCRF, находятся в хорошем согласии с экспериментальными ИК спектрами, зарегистрированными в водных растворах.

Введение. При интерпретации алифатических α -аминокислот, к которым относятся глицин (Gly), аланин (Ala), валин (Val), лейцин (Leu) и изолейцин (Ile) необходимо учитывать два фактора. Во-первых, структура аминокислот зависит от агрегатного состояния, а в растворе и от pH среды. Известно, что рассматриваемые α -аминокислоты в водном растворе при значениях pH, близких к 7, имеют цвиттер-ионную форму. Во-вторых, алифатические аминокислоты обладают свойством гидрофобности, которая становится более ощутимой с увеличением размеров радикала, т.е. числа C атомов.

В связи с вышесказанным целесообразно выполнять расчёты колебательных спектров в водной среде с использованием метода эффективного учёта межмолекулярного взаимодействия, когда используется одна из моделей согласованного реактивного поля (например, SCRF), где нет необходимости рассматривать непосредственное образование комплексов аминокислот с молекулами воды [1]. Данный метод позволяет стабилизировать цвиттер-ионную форму аминокислот и в то же время учитывать гидрофобность алифатических α -аминокислот.

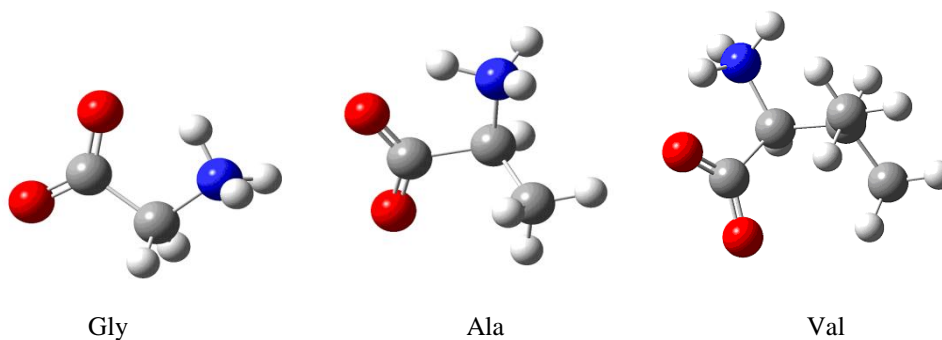
Ранее авторами работ [2,3] был использован комплексный подход к расчёту колебательных спектров алифатических α -аминокислот – была

выполнена экспериментальная регистрация ИК и КР спектров и выполнен расчёт колебательных спектров методом DFT. Существенным недостатком выполненного расчёта является способ стабилизации цвиттер-ионных форм. Для этого было выполнено моделирование комплексов аминокислот с молекулами воды – от 5 до 12, что существенно усложняет интерпретацию спектров, т.к. наблюдается сильное смешение колебаний аминокислот с колебаниями воды, особенно для биполярных групп [2,3].

Цель данной работы – выполнить расчёт колебательных спектров цвиттер-ионных форм алифатических α -аминокислот (Gly, Ala, Val, Leu и Ile) в гармоническом приближении, сравнить с экспериментальными спектрами и провести интерпретацию ИК колебательных спектров с целью определения методики расчёта колебательных спектров гидрофобных аминокислот в водном растворе.

Оптимизация геометрии и расчёт колебательных спектров проводился по программе Gaussian-09 [4] с использованием метода DFT в приближении B3LYP и базисного набора 6-311++g(d,p).

Результаты и обсуждение. Молекулярные диаграммы алифатических α -аминокислот приведены на рис. 1, а вычисленные значения частот – в таблицах 1-4.



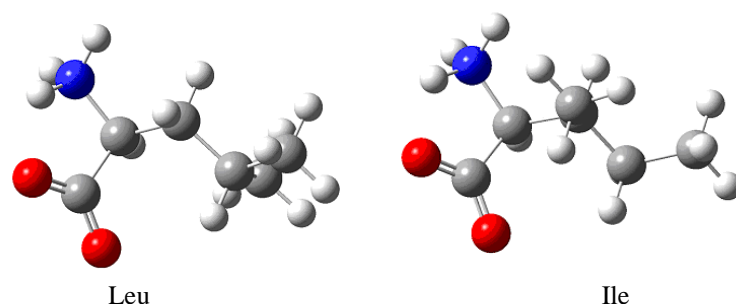


Рис. 1. Молекулярные диаграммы алифатических α-аминокислот – Gly, Ala, Val, Leu и Ile

Наибольшие отличия экспериментальных колебательных ИК спектров аминокислот, измеренных в H₂O и D₂O, наблюдаются в области 1400-1700 см⁻¹, что связано с поглощением молекулы H₂O и проявлением в этой области деформационных колебаний воды. Поэтому целесообразно выполнять интерпретацию колебательных ИК спектров и оценивать достоинства и недостатки используемого теоретического подхода на основе сравнения с обоими экспериментальными спектрами.

В таблице 1 (как и приведённых в данной статье других таблицах) рассматривается спектральная область 1000-1700 см⁻¹, в которой расположены наиболее интенсивные полосы поглощения α-аминокислот и где отличие спектров, измеренных в H₂O и D₂O, проявляется очень сильно.

Глицин. Gly – простейшая по структуре алифатическая аминокислота, у которой гидрофобный радикал определяется только связью СН. В высокочастотной области вычисленные частоты деформационных колебаний δ(N⁺H₃) на 70-

120 см⁻¹ выше экспериментальных значений, измеренных в H₂O. Это результат смешения форм валентных ν(COO⁻) и деформационных δ(N⁺H₃) колебаний, а также недостатки расчёта частот в гармоническом приближении. Как было показано в работе [5], учёт ангармонизма колебаний приводит к тому, что частоты деформационных δ(N⁺H₃) колебаний Gly имеют значения 1543 и 1584 см⁻¹. Это приводит к хорошему согласию теоретических и экспериментальных частот колебаний 17 и 18 (табл. 1).

Дейтерирование N⁺H₃ группы также приводит к понижению частот деформационных δ(N⁺H₃) колебаний, но более существенно – в область ~1170 см⁻¹, и сопровождается уменьшением интенсивности соответствующей полосы поглощения, что приводит к уменьшению смешения форм валентных ν(COO⁻) и деформационных δ(N⁺H₃) колебаний. Поэтому для интерпретации колебаний алифатических α-аминокислот целесообразно использовать оба экспериментальных спектра (рис. 2-6).

Таблица 1. Экспериментальные (ν_э, см⁻¹) [2] и вычисленные значения частот (ν_р, см⁻¹) и интенсивностей спектров ИК (I_{ИК}, км/моль) Gly

№	Эксперимент [2]		Расчёт		Отнесение
	ν _э (раствор в H ₂ O)	ν _э (раствор в D ₂ O)	ν _р	I _{ИК}	
10			1095	1.4	ν(CC), δ(CH ₂)
11	1130 ср.	1170 ср.	1101	125.5	ν(CC), δ(CCN ⁺)
12			1303	8.0	δ(CH ₂)
13			1322	31.5	δ(CH ₂)
14	1332 с.	1323 ср.	1358	295.5	ν(COO ⁻) sym
15	1413 с.	1412 ср.	1435	538.9	δ(N ⁺ H ₃)
16	1444 ср.	1444 сл.	1481	21.8	δ(CH ₂)
17	1510 с.		1634	154.3	δ(N ⁺ H ₃)
18	1599 с.		1663	48.8	δ(N ⁺ H ₃)
19	1637 пл.	1618 с.	1668	701.4	ν(COO ⁻) asym

В табл. 1 приведено отнесение колебаний Gly для колебаний 10-19. Наиболее интенсивные полосы поглощения – это валентные (колебания 14 и 19) и деформационные (колебания 15 и 17) колебания

биполярной группы, а также колебание 11, форма которого является смешанной и содержит изменение связи CC и изменение валентного угла CCN (колебание 11) (рис. 2).

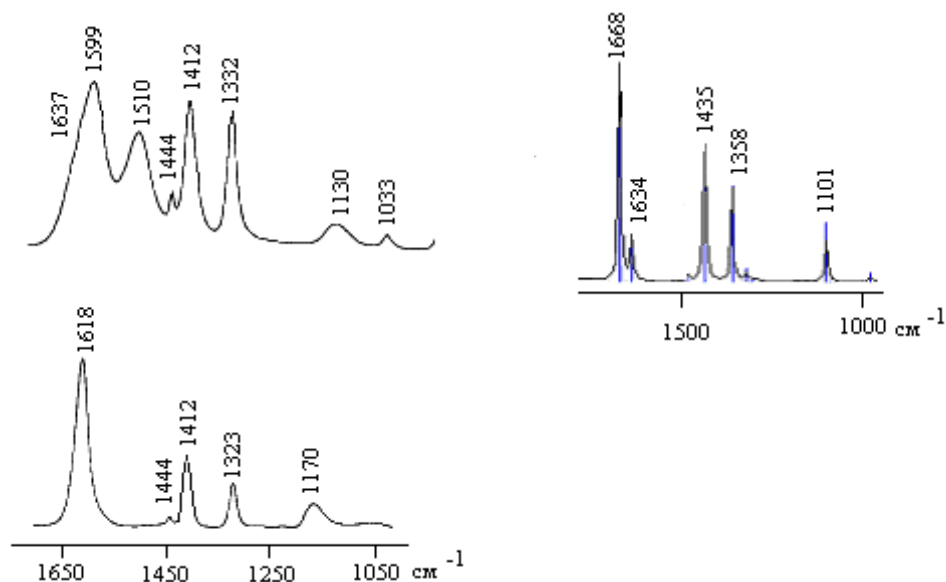


Рис. 2. Вычисленные (справа) и экспериментальные (слева) [2] ИК спектры Gly в растворе H₂O (вверху) и D₂O (внизу)

Аланин. У Ala гидрофобный радикал определяется метильной группой CH₃. Обычно данная группа практически не взаимодействует с соседними фрагментами молекулы, как, например, это наблюдается в молекуле тимина [6]. Поэтому можно ожидать, что замена радикала NH на NH₃ мало скажется на значениях частот и интенсивностей большинства колебаний Ala по сравнению с колебаниями Gly, что подтверждается анализом и сравнением колебательных спектров Ala и Gly (табл. 1, 2; рис. 2, 3).

В то же время, наличие в цвиттер-ионной форме Ala биполярных групп может привести к их

взаимодействию с метильной группой. Действительно, в экспериментальном спектре Ala в области ~1400-1470 см⁻¹ проявляются два колебания 20, 21 с частотами 1413, 1465 см⁻¹, которым соответствуют две полосы поглощения сильной и средней интенсивности (рис. 3). Соответственно и в теоретическом спектре колебаниям 20 и 21 отвечают сильные полосы поглощения с частотами 1404 и 1426 см⁻¹. Формы этих колебаний являются смешанными и отвечают изменениям валентных углов полярной N⁺H₃ и метильной CH₃ группы.

Таблица 2. Экспериментальные (ν_s , см⁻¹) [3] и вычисленные значения частот (ν_p , см⁻¹) и интенсивностей спектров ИК ($I_{ИК}$, км/моль) Ala

№	Эксперимент [3]		Расчёт		Отнесение
	ν_s (раствор в H ₂ O)	ν_s (раствор в D ₂ O)	ν_p	$I_{ИК}$	
14			1093	33.0	$\delta(\text{CCN}^+)$
15	1113 ср.		1114	70.0	$\delta(\text{CH}_3)$, $\nu(\text{CC})$
16	1215 сл.		1210	37.6	$\delta(\text{CH}_3)$, $\nu(\text{CC})$
17	1303 ср.	1292 сл.	1305	46.8	$\delta(\text{CH})$
18	1354 ср.	1340 ср.	1349	216.7	$\nu(\text{COO}^-)$ sym
19	1378 ср.	1378 ср.	1374	30.3	$\delta(\text{CH})$
20	1413 с.	1413 ср.	1404	339.9	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$, $\delta(\text{CH}_3)$
21	1465 ср.	1465 ср.	1426	289.6	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$, $\delta(\text{CH}_3)$
22			1489	4.7	$\delta(\text{CH}_3)$
23			1492	19.4	$\delta(\text{CH}_3)$
24	1519 с.		1632	116.2	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
25	1595 с.		1654	73.9	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
26	1630 пл.	1612 с.	1665	648.9	$\nu(\text{COO}^-)$ asym

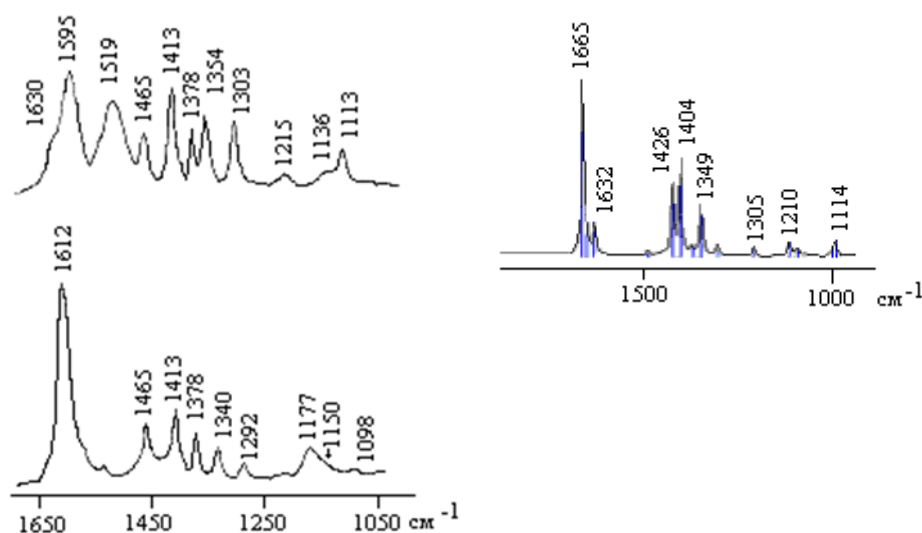


Рис. 3. Вычисленные (справа) и экспериментальные (слева) [3] ИК спектры Ala в растворе H₂O (вверху) и D₂O (внизу)

Валин. Усложнение структуры аминокислотного остатка приводит к резкому увеличению числа конформеров рассматриваемой аминокислоты, и, как следствие, возможному одновременному существованию двух или более конформеров, в результате чего колебательный спектр также может быть результатом наложения спектров нескольких конформеров. Такая ситуация может привести к

существенному отличию экспериментальных и вычисленных спектров.

В данном случае число возможных конформеров ограничивалось, во-первых, рассмотрением только L-изомеров, и, во-вторых, были проведены расчёты нескольких изомерных структур, из которых выбиралась структура с наиболее низким значением энергии (рис. 1).

Таблица 3. Экспериментальные (ν_s , см⁻¹) [3] и вычисленные значения частот (ν_p , см⁻¹) и интенсивностей спектров ИК ($I_{ИК}$, км/моль) Val

№	Эксперимент [3]		Расчёт		Отнесение
	ν_s (раствор в H ₂ O)	ν_s (раствор в D ₂ O)	ν_p	$I_{ИК}$	
21			1069	20.4	$\delta(\text{CH}), \delta(\text{CH}_3)$
22			1085	97.3	$\delta(\text{CCN}^+)$
23			1117	10.2	$\delta(\text{CH}), \delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
24			1177	9.3	$\delta(\text{CCC})$
25			1206	1.5	$\delta(\text{CH}), \delta(\text{CH}_3)$
26			1275	6.7	$\delta(\text{CH})$
27	1358 с.	1355 ср.	1331	263.3	$\nu(\text{COO}^-)$ sym
28			1349	21.2	$\delta(\text{CH})$
29			1377	17.2	$\delta(\text{CH})$
30			1398	70.8	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH}_3)$
31			1400	52.9	$\delta(\text{CH})$
32			1421	52.9	$\delta(\text{CH}_3)$
33	1411 с.	1410 ср.	1422	483.2	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
34			1480	1.2	$\delta(\text{CH}_3)$
35			1484	3.2	$\delta(\text{CH}_3)$
36			1496	15.8	$\delta(\text{CH}_3)$
37			1502	23.2	$\delta(\text{CH}_3)$
38	1521 с.		1629	101.0	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
39	1597 с.	1612 с.	1666	53.2	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
40	1633 пл.		1663	663.2	$\nu(\text{COO}^-)$ asym

В колебательном спектре Val усложнение спектра по сравнению с колебательным спектром Ala происходит за счёт появления в структуре Val молекулярного фрагмента $-\text{CH}-\text{CH}_3$. Взаимодействие групп N^+H_3 и CH_3 ослабляется за счёт увеличения расстояния между ними – если для Ala расстояние между атомами $\text{C}_{(\text{CH}_3)}$ $\text{N}_{(\text{N}^+\text{H}_3)}$ составляло 2.5 \AA , то для Val расстояние между этими же атомами стало равным 3.1 \AA . В результате мы имеем слабое смешение форм колебаний и каждое новое по сравнению с Val колебание может быть отнесено к

колебаниям молекулярного фрагмента $-\text{CH}-\text{CH}_3$ (табл. 3).

Колебание с частотой в области 1177 см^{-1} в экспериментальном спектре Val, измеренного в растворе D_2O , так же как и в спектрах Gly и Ala (колебания с частотами 1170 и 1177 см^{-1}), являются деформационными колебаниями группы N^+D_3 . В теоретических ИК спектрах Gly, Ala и Val в этой области полоса поглощения средней интенсивности отвечает колебаниям валентного угла CCN^+ (табл. 1-3).

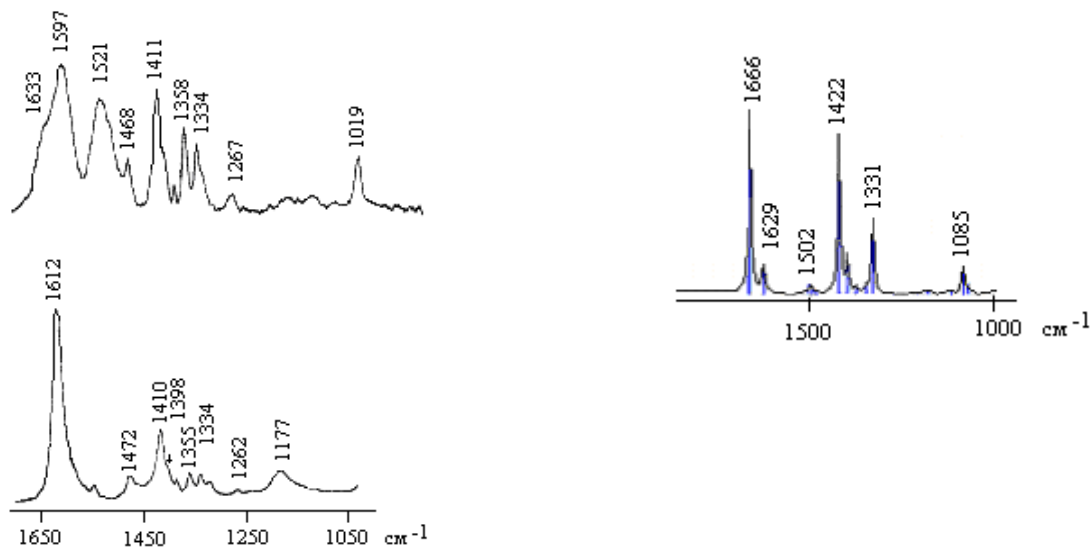


Рис. 4. Вычисленные (справа) и экспериментальные (слева) [3] ИК спектры Val в растворе H_2O (вверху) и D_2O (внизу) *Лейцин и Изолейцин*. Leu и Ile имеют наиболее сложные аминокислотные остатки среди α -аминокислот. По сравнению с Val в их структуре дополнительно появляется метиленовая группа CH_2 , отличающаяся разной последовательностью её включения в строение Leu и Ile.

Анализ вычисленных спектров Leu показывает, что для колебаний 46 и 47 наблюдается сильное смешение форм колебаний, что приводит к значительному (в ~ 5 раз) усилению интенсивности полосы поглощения колебания 47 по сравнению с интенсивностью аналогичного колебания для Gly,

Ala, Val, а также Ile. В то же время, интенсивность симметричного валентного колебания $\nu(\text{COO}^-)$ понижается в 2-3 раза по сравнению с интенсивностью полосы поглощения аналогичных колебаний в ИК спектрах Gly, Ala, Val и Ile.

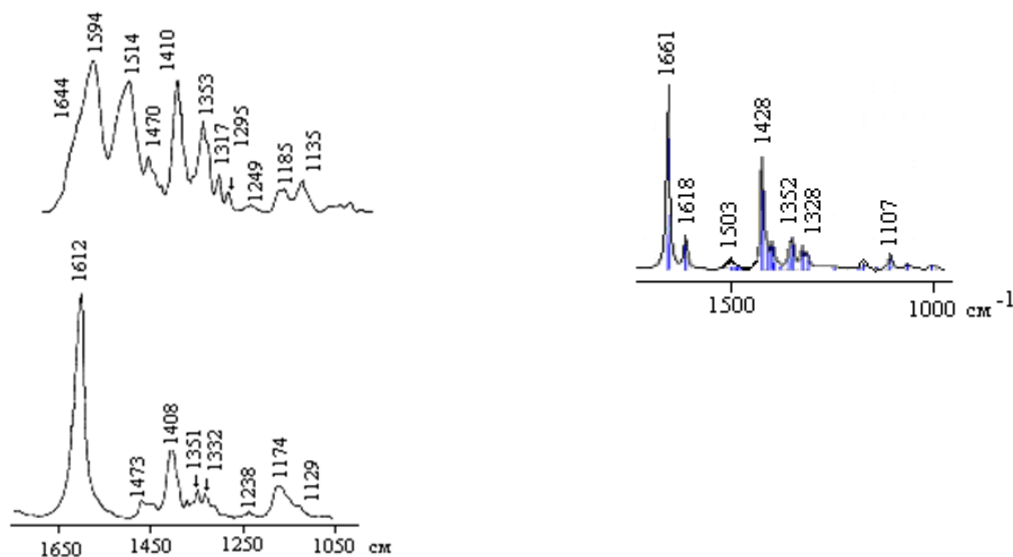


Рис. 5. Вычисленные (справа) и экспериментальные (слева) [3] ИК спектры Leu в растворе H_2O (вверху) и D_2O (внизу)

Таблица 4. Экспериментальные (ν_s , см^{-1}) [3] и вычисленные значения частот (ν_p , см^{-1}) и интенсивностей спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) Leu и Ile

Leu						Ile					
№	Эксперимент [3]		Расчёт		Отнесение	№	Эксперимент [3]		Расчёт		Отнесение
	ν_s (раствор в H_2O)	ν_s (раствор в D_2O)	ν_p	$I_{\text{ИК}}$			ν_s (раствор в H_2O)	ν_s (раствор в D_2O)	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	
24			1002	18.9	$\delta(\text{CH}_2)$, $\delta(\text{CCN}^+)$	23			1004	9.9	$\nu(\text{CC})$, $\delta(\text{CH}_2)$
25			1068	28.4	$\delta(\text{CH}_2)$, $\nu(\text{CC})$	24			1035	26.8	$\nu(\text{CC})$, $\delta(\text{CH}_2)$
26			1107	61.6	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$	25			1078	36.9	$\delta(\text{CH}_2)$, $\delta(\text{CCN}^+)$
27			1143	4.2	$\nu(\text{CC})$, $\delta(\text{CCC})$	26			1090	42.7	$\nu(\text{CN})$
28			1175	21.0	$\delta(\text{CCC})$	27			1112	19.6	$\nu(\text{CC})$, $\delta(\text{CCC})$
29			1190	7.7	$\nu(\text{CC})$	28			1181	14.7	$\delta(\text{CCC})$
30			1248	4.3	$\delta(\text{CH}_2)$	29			1193	0.02	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$
31			1315	63.7	$\nu(\text{CC})$	30			1267	5.6	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$
32			1328	82.1	$\delta(\text{CH})$	31			1291	1.9	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$
33	1353 с.	1315 с.	1352	107.7	$\nu(\text{COO}^-)$ sym	32	1350 с.	1336 ср.	1326	226.0	$\nu(\text{COO}^-)$ sym
34			1360	70.0	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$	33			1341	37.3	$\nu(\text{CC})$, $\delta(\text{CH}_3)$
35			1382	6.0	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$	34			1369	48.5	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$
36			1397	15.8	$\delta(\text{CH}_3)$, $\delta(\text{CH}_2)$	35			1386	23.5	$\delta(\text{CH})$, $\nu(\text{CC})$
37			1402	80.3	$\delta(\text{CH}_3)$	36			1399	104.6	$\delta(\text{CH})$
38			1415	64.1	$\delta(\text{CH}_3)$, $\delta(\text{CH}_2)$	37			1407	14.7	$\delta(\text{CH}_3)$
39	1410 с.	1408 ср	1428	446.4	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	38	1410 с.	1465 ср.	1417	453.3	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
						39			1422	36.4	$\delta(\text{CH}_2)$
40			1478	0.5	$\delta(\text{CH}_3)$, $\delta(\text{CH}_2)$	40			1479	1.2	$\delta(\text{CH}_3)$, $\delta(\text{CH}_2)$
41			1485	4.7	$\delta(\text{CH}_2)$	41			1487	14.4	$\delta(\text{CH}_2)$
42			1491	4.3	$\delta(\text{CH}_3)$	42			1494	12.9	$\delta(\text{CH}_3)$
43			1494	5.9	$\delta(\text{CH}_3)$	43			1500	24.1	$\delta(\text{CH}_3)$
44			1503	31.3	$\delta(\text{CH}_3)$	44			1507	5.3	$\delta(\text{CH}_3)$
45	1514 с.		1618	127.7	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	45	1519 с.		1629	88.3	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
46	1594 с.		1661	400.3	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$, $\nu(\text{COO}^-)$ asym	46	1594 с.		1661	45.7	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
47	1644 пл.	1612 с.	1663	329.4	$\nu(\text{COO}^-)$ asym, $\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	47	1635 пл.	1611 с.	1666	684.7	$\nu(\text{COO}^-)$ asym

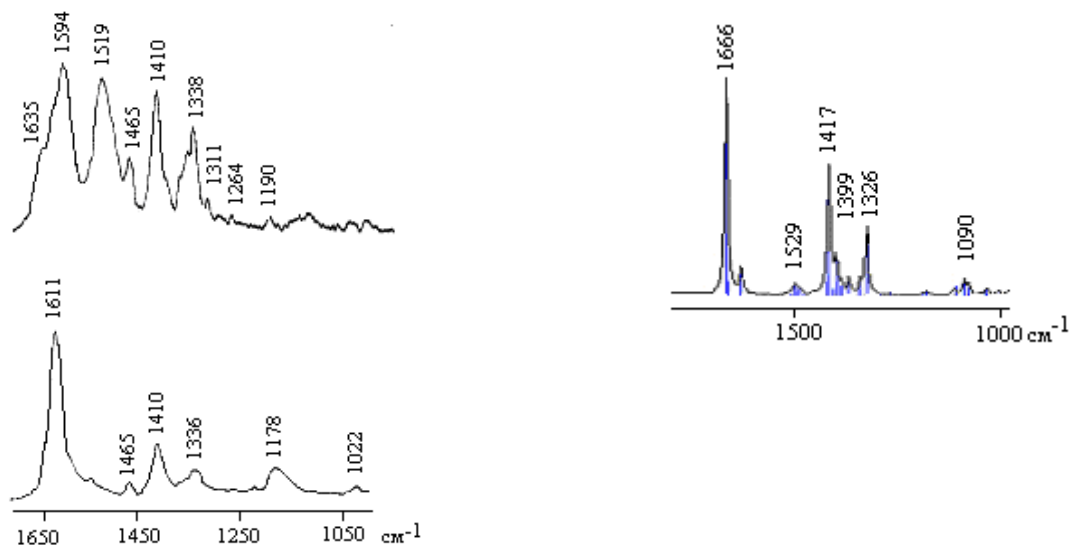


Рис. 6. Вычисленные (справа) и экспериментальные (слева) ИК [3] спектры Пе в растворе H₂O (вверху) и D₂O (внизу)

Заключение. Таким образом, выполненный расчёт показал высокую эффективность применения метода SCRf для расчёта колебательных спектров алифатических α-аминокислот, позволяющий одновременно стабилизировать цвиттер-ионную форму и учитывать гидрофобность алифатических α-аминокислот.

Анализ колебательных спектров Gly, Ala, Val, Leu и Пе показал, что в области 1000-1700 см⁻¹ Таблица 5. Частоты (ν_p , см⁻¹) и интенсивностей алифатических α-аминокислот Gly, Ala, Val, Leu и Пе

расположены колебания, частоты которых мало зависят от аминокислотного остатка – это валентные $\nu(\text{COO}^-)$ и деформационные $\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$ колебания биполярных групп (табл. 5). В то же время усложнение структуры аминокислотных остатков приводит к характерным изменениям, позволяющим судить об их взаимодействии с биполярными группами.

спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) биполярных групп

Gly		Ala		Val		Leu		Пе		Отнесение
ν_p	$I_{\text{ИК}}$	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	
1358	295.5	1349	216.7	1331	263.3	1352	107.7	1326	226.0	$\nu(\text{COO}^-)$ sym
		1404	339.9							$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$, $\delta(\text{CH}_3)$
		1426	289.6							
1435	538.9			1422	483.2	1428	446.4	1417	453.3	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
1634	154.3	1632	116.2	1629	101.0	1618	127.7	1629	88.3	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
1663	48.8	1654	73.9	1669	53.2	1661	400.3	1661	45.7	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$
1668	701.4	1665	648.9	1666	663.2	1663	329.4	1666	684.7	$\nu(\text{COO}^-)$ asym

Библиографический список

1. Wong M.W., Wiberg K.B., Frisch M. // J. Chem. Phys. 1991. V.95. P. 8991-8998.
2. Derbel N., Hernández B., Pflüger F., Liquier J., Geinguenaud F., Jaidane N., Lakhdar Y.B., Ghomi M. // J. Phys. Chem. B 2007. V.111. P.1470-1477.
3. Hernández B., Pflüger F., Nsangou M., Ghomi M. // J. Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 3169-3178.
4. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2009.
5. Тен Г.Н., Кадров Д.М., Баранов В.И. // Журнал прикладной спектроскопии. 2014. № 2. С.178-186.
6. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Березин В.И., Баранов В.И. // Журнал структурной химии. 2010. Т. 51, № 5. С. 889-895.

INTERPRETATION OF IR SPECTRA OF α-ALIPHATIC AMINO ACIDS IN AQUEOUS SOLUTION

¹ Ten G. N., ² Shcherbakova N. E., ³ Baranov V.I.

¹ N.G.Chernyshevsky Saratov State University

² Russian Research Anti-Plague Institute "Microbe", Saratov

³ V.I.Vernadsky Institute of geochemistry and analytical chemistry of the Russian Academy of Sciences

Calculation and interpretation of the vibrational spectra of aliphatic amino acids - glycine, alanine, valine, leucine and isoleucine in aqueous solution was performed. It was shown that theoretical spectra calculated using the SCRf reactive field method are in good agreement with experimental IR spectra recorded in aqueous solutions.

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ПАР АДЕНИН-ТИМИН ПО УОТСОНУ-КРИКУ И ХУГСТИНУ

Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, М.К. Березин, В.И. Баранов

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н.

Саратовский научно-исследовательский противочумной институт «Микроб»

Щербакова Наталья Евгеньевна, м.н.с.

Саратовский государственный университет

Березин Максим Кириллович, аспирант

Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН

Баранов Виктор Иванович, д.ф.-м.н., зав. лаб. молекулярного моделирования

Выполнена интерпретация колебательных спектров комплементарных пар Ade-Thy, образованных по Уотсону-Крику и Хугстину. Определены энергетические характеристики обеих пар и геометрические параметры водородных связей. Показаны спектральные отличия, позволяющие по ИК и КР спектрам однозначно идентифицировать комплементарные пары, образованные по Уотсону-Крику или Хугстину.

Введение. Как известно, в 1953 году Джеймс Уотсон и Френсис Крик построили пространственную модель ДНК, в которой комплементарные пары образуются между каноническими основаниями нуклеиновых кислот (ОНК) аденин – тимин (Ade-Thy) и гуанин – цитозин [1]. Оказалось, что помимо уотсон–криковских пар возможны пары, в которых ОНК развернуты в пространстве друг относительно друга и водородные связи образуются между другими атомами. Эти пары были названы хугстиновскими по имени автора новой схемы спаривания ОНК Карста Хугстина [2]. Поскольку уотсон-криковские и хугстиновские пары имеют разную структуру, то свойства и роль, которую они выполняют в ДНК, у них разная.

Цель работы – выполнить интерпретацию колебательных спектров комплементарных пар, образованных по Уотсону-Крику и Хугстину,

позволяющую проводить их идентификацию.

Оптимизация геометрии и расчёт колебательных спектров проводился по программе Gaussian-09 [3] с использованием метода DFT в приближении B3LYP и базисного набора 6-311++g(d,p).

Результаты и обсуждение. Молекулярные диаграммы комплементарных пар Ade-Thy, образованных по Уотсону-Крику (I) и Хугстину (II) представлены на рис. 1, а результаты расчёта колебаний – в таблице.

Согласно выполненному расчёту наиболее стабильной структурой в изолированном состоянии является комплементарная пара, образованная по Хугстину, энергия которой ниже энергии комплементарной пары по Уотсону–Крику на 0.74 ккал/моль. Такая небольшая энергетическая разница создаёт практически равные условия для одновременного существования пар I и II.

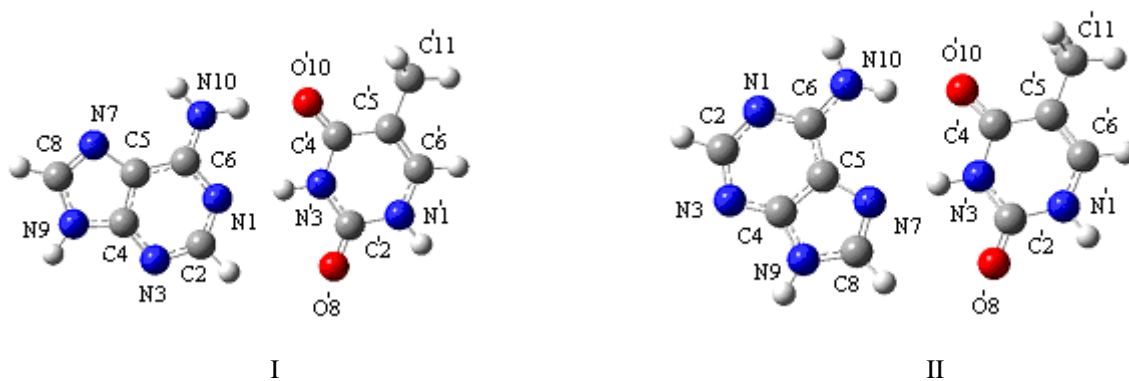


Рис 1. Молекулярные диаграммы комплементарных пар Ade-Thy, образованных по Уотсону-Крику (I) и Хугстину (II)

Обе пары образуются с помощью двух водородных связей типа N...HN и NH...O, длины которых в паре I равны 2.89 и 2.94, а в паре II – 2.85 и 2.97 Å, соответственно.

Поскольку архитектура комплементарных пар отличается разными водородными связями, то при анализе колебательных спектров в первую очередь целесообразно анализировать колебания связей,

принимающих непосредственное участие в образовании ВС.

На рис. 2, 3 и 4 приведены колебательные спектры обеих пар в области 700-1800 и 3000-4000 см⁻¹. Для анализа колебаний в таблице выполнена интерпретация колебаний и проведено сравнение частот и интенсивностей полос поглощения и линий КР.

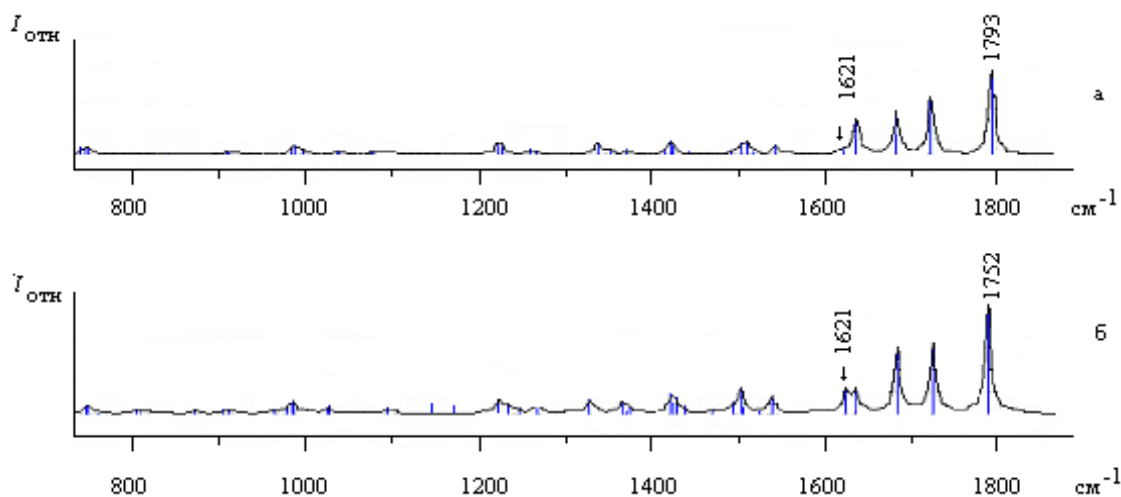


Рис. 2. ИК спектры пары по Уотсону–Крику (а) и пары по Хугстину (б) в области 700-1800 cm^{-1}

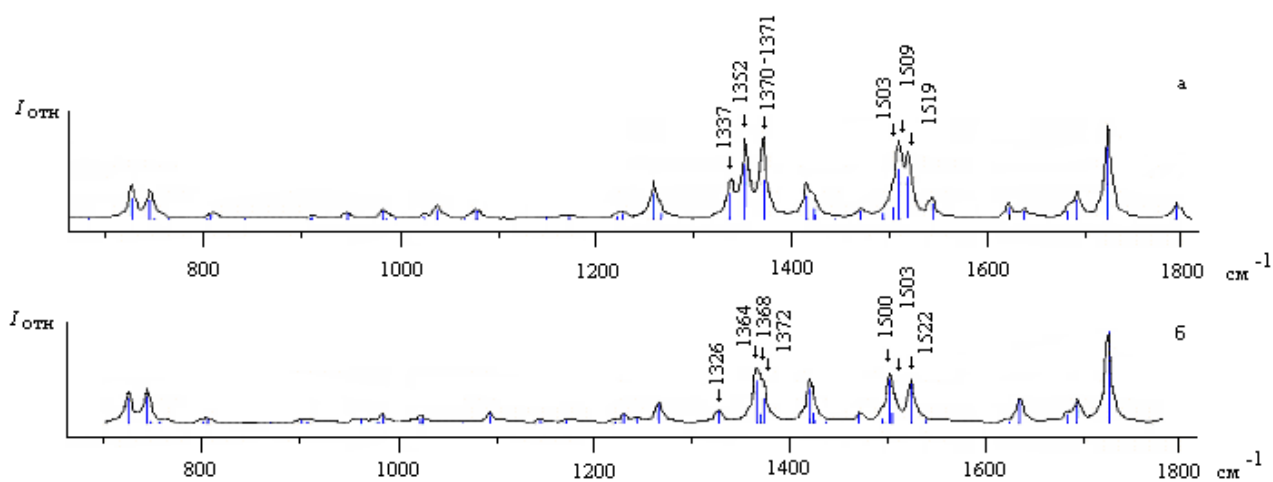


Рис. 3. Спектры КР пары по Уотсону–Крику (а) и пары по Хугстину (б) в области 800- 1800 cm^{-1}

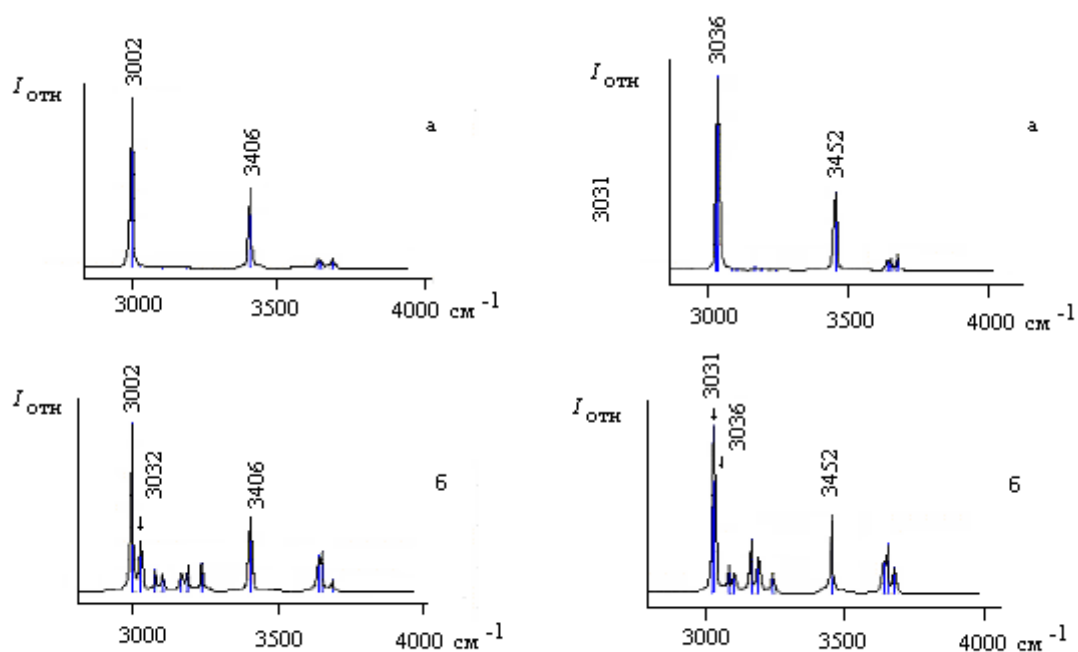


Рис. 4. ИК (а) и КР (б) спектры пары по Уотсону–Крику (слева) и пары по Хугстину (справа) в области 3000-4000 cm^{-1}

Таблица. Вычисленные значения частот (ν_p , см^{-1}) и интенсивностей спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) и КР ($I_{\text{КР}}$, $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$) комплементарных пар Ade-Thy по Уотсону-Крику (I) и Хугстину (II) в изолированном состоянии

N(молекула)	I			Отнесение	II			Отнесение
	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$		ν_p	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	
50 (Thy)	1223	87.7	2.4	Q($\beta(\text{C}'_5\text{C}'_{11})$)	1221	88.9	1.2	Q($\beta(\text{C}'_5\text{C}'_{11})$)
51 (Thy)	1227	47.5	5.4	Q($\text{C}'_2\text{N}'_3, \text{N}'_3\text{C}'_4$)	1230	32.9	9.1	Q($\text{C}'_2\text{N}'_3, \text{N}'_3\text{C}'_4$)
52 (Ade)	1259	35.1	33.3	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$	1243	19.7	5.5	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$
53 (Ade)	1266	21.7	5.3	$\beta(\text{C}_8\text{H}, \text{N}_9\text{H})$	1265	42.1	22.0	$\beta(\text{C}_8\text{H}, \text{N}_9\text{H})$
54 (Ade)	1337	104.6	32.9	Q($\text{N}_1\text{C}_2, \text{C}_2\text{N}_3$)	1326	82.2	13.4	Q($\text{N}_1\text{C}_2, \text{C}_2\text{N}_3$)
55 (Ade)	1352	39.1	71.7	Q(Pur)	1364	76.7	47.4	Q(Pur)
56 (Ade+Thy)	1370	7.9	51.0	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'_6\text{H}')$ + Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H})$	1368	2.9	8.7	Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H})$ + Q(Pyr), $\beta(\text{C}'_6\text{H}')$
57 (Ade+Thy)	1371	20.4	25.0	Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H})$ + Q(Pyr), $\beta(\text{C}'_6\text{H}')$	1372	14.7	29.2	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'_6\text{H}')$ + Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H})$
58 (Ade)	1415	14.8	29.9	Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H}, \text{N}_9\text{H})$	1419	61.3	39.6	Q(Im), $\beta(\text{C}_2\text{H}, \text{N}_9\text{H})$
59 (Thy)	1422	93.1	13.1	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$	1422	20.4	10.4	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$
60 (Thy)	1425	31.9	4.4	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$	1425	64.8	1.8	Q(Pyr), $\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$
61 (Ade)	1442	10.0	0.3	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{C}_2\text{H})$	1435	14.6	0.3	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{C}_2\text{H})$
62 (Thy)	1471	7.8	9.5	$\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$	1470	8.0	9.3	$\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$
63 (Thy)	1492	14.2	5.2	$\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$	1492	18.4	3.6	$\beta(\text{C}'\text{H}'_3)$
64 (Ade+Thy)	1503	48.4	14.2	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{NH})$ + $\beta(\text{N}'_3\text{H}')$	1500	148.5	48.7	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{NH})$ + $\beta(\text{N}'_3\text{H}')$
65 (Ade+Thy)	1509	112.7	64.3	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{NH})$ + $\beta(\text{N}'_3\text{H}')$	1503	13.4	10.4	Q(Pur, C_6N_{10}), $\beta(\text{NH})$ + $\beta(\text{N}'_3\text{H}')$
66 (Thy)	1519	12.5	54.8	$\beta(\text{N}'_3\text{H}')$	1522	3.1	46.3	$\beta(\text{N}'_3\text{H}')$
67 (Thy)	1543	72.8	18.7	$\beta(\text{N}'_3\text{H}')$	1536	105.3	3.5	$\beta(\text{N}'_3\text{H}')$
68 (Ade)	1621	29.9	14.8	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$	1621	152.0	1.1	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$
69 (Ade)	1636	304.9	9.9	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$	1632	152.1	27.4	Q(Pur), $\beta(\text{NH}_2)$
70 (Ade)	1682	388.2	8.8	$\beta(\text{NH}_2)$	1680	434.3	9.7	$\beta(\text{NH}_2)$
71 (Thy)	1691	8.3	26.0	Q($\text{C}'_5=\text{C}'_6$)	1691	5.0	23.9	Q($\text{C}'_5=\text{C}'_6$)
72 (Thy)	1722	506.2	98.0	Q($\text{C}'_4=\text{O}'_{10}$)	1722	486.6	104.4	Q($\text{C}'_4=\text{O}'_{10}$)
73 (Thy)	1793	729.3	16.1	Q($\text{C}'_2=\text{O}'_8$)	1752	741.7	12.1	Q($\text{C}'_2=\text{O}'_8$)
74 (Thy)	3002	2095.7	642.2	q($\text{N}'_3\text{H}$)	3031	614.8	435.4	q($\text{N}'_3\text{H}$), q($\text{C}'\text{H}'_3$)
75 (Thy)	3032	16.0	206.4	q($\text{C}'\text{H}'_3$)	3036	1364.2	245.1	q($\text{N}'_3\text{H}$), q($\text{C}'\text{H}'_3$)
76 (Thy)	3084	11.0	79.2	q($\text{C}'\text{H}'_3$)	3085	10.5	76.7	q($\text{C}'\text{H}'_3$)
77 (Thy)	3106	16.7	77.1	q($\text{C}'\text{H}'_3$)	3107	15.4	74.7	q($\text{C}'\text{H}'_3$)
78 (Ade)	3173	2.6	79.3	q(C_2H)	3165	22.3	173.3	q(C_2H)
79 (Thy)	3192	6.7	142.3	q($\text{C}'_6\text{H}'$)	3193	5.9	137.5	q($\text{C}'_6\text{H}'$)
80 (Ade)	3241	0.1	143.2	q(C_8H)	3242	4.9	65.3	q(C_8H)
81 (Ade)	3406	1060.9	348.4	q(NH_2) sim	3452	839.3	339.1	q(NH_2) sim
82 (Thy)	3638	104.2	128.1	q($\text{N}'_1\text{H}$)	3639	104.5	123.7	q($\text{N}'_1\text{H}$)
83 (Ade)	3647	92.3	167.2	q(N_9H)	3651	96.7	157.0	q(N_9H)
84 (Ade)	3685	131.7	53.2	q(NH_2) asim	3678	140.2	93.6	q(NH_2) asim

Примечание. Pur, Im – колебания пуринового и имидазольного колец Ade; Pyr – колебания пиримидинового кольца Thy

Из 35 рассматриваемых колебаний (табл.) только для четырёх (56, 57 и 64, 65) наблюдается смещение колебаний Ade и Thy. Остальные колебания являются независимыми и отвечают колебаниям либо Ade, либо Thy.

Несмотря на разную архитектуру образования пар по Уотсону-Крику и Хугстину, отметим, что колебательные спектры обеих пар очень похожи. Наибольшие отличия ИК спектров пар I и II в области 1200-1800 см^{-1} (рис. 1) наблюдаются для колебаний 68 и 73 (рис.1). Интенсивность полос поглощения пар I и II, отвечающих колебанию 68, отличается в ~ 5 раз, а для колебаний 73 частотное смещение является максимальным и составляет 41 см^{-1} (для остальных частот среднее квадратичное отклонение составляет $\sim 5 \text{ см}^{-1}$).

Спектры КР пар I и II отличаются в спектральных интервалах 1320-1375 и 1500-1525 см^{-1} , где наблюдается смещение колебаний Ade и Thy (рис. 3).

Рассмотрим теперь спектральную область 3000-4000 см^{-1} , где проявляются валентные колебания связей NH, принимающих непосредственное участие в образовании водородных связей $\text{N}_{10}\text{H}\dots\text{O}'_{10}$, $\text{N}'_3\text{H}'\dots\text{N}_1$ и $\text{N}'_3\text{H}'\dots\text{N}_7$ (рис. 4).

Как и следовало ожидать, наибольшие частотные изменения ($\Delta\nu=29$ и 46 см^{-1}) наблюдаются для колебаний 74 и 81, отвечающих валентным колебаниям $q(\text{N}'_3\text{H}')$ и $q(\text{NH}_2)$ Thy и Ade, соответственно (табл. и рис. 4). Для этих же колебаний, а также колебания 75, форма которого является смешанной для Thy и содержит валентные колебания связи $\text{N}'_3\text{H}'$, наблюдается наибольшее отличие интенсивностей для комплементарных пар, образованных по Уотсону-Крику и Хугстину (рис. 4).

Заключение. Таким образом, на основе вычисленных энергий, параметров водородных мостиков и колебательных спектров комплементарных пар Ade-Thy, образованных по Уотсону-Крику и Хугстину в изолированном состоянии, показано, что наиболее стабильной структурой является комплементарная пара, образованная по Хугстину. В то же время небольшое отличие энергии стабилизации создаёт практически равные условия для одновременного образования обеих пар в газовой фазе. Частотные отличия, а также изменение интенсивности в области смешанных колебаний Ade Thy и валентных колебаний колебания связей NH позволяют однозначно определить тип комплементарной пары Ade-Thy.

Библиографический список

1. Watson J.D.H., Crick F.H.C. // Nature. 1953. V. 171. P. 964.
2. Hoogsteen K. // Acta Crystallographica. 1963. V.16. P. 907-916.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2009.

VIBRATIONAL SPECTRA OF ADENINE-THYMINE COMPLEMENTARY PAIRS ACCORDING TO WATSON-CRICK AND HOOGSTEEEN

¹Ten G. N., ²Shcherbakova N. E., ¹Berezin M.K., ³Baranov V.I.

¹Saratov State University

²Russian Research Anti-Plague Institute "Microbe", Saratov

³V.I. Vernadsky Institute of geochemistry and analytical chemistry of the Russian Academy of Sciences

Carried out was interpretation of the vibrational spectra of complementary pairs Ade-Thy, formed according to Watson-Crick and Hoogsteen. Energy features of both pairs and geometrical parameters of hydrogen bonds were determined. Spectral differences that allow to identify uniquely complementary pairs formed according to Watson-Crick or Hoogsteen by reference of IR and Raman spectra were shown.

УДК 539.193

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ФЕНИЛАЛАНИНА И ТИРОЗИНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, В.И. Баранов

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н.

Саратовский научно-исследовательский противочумной институт «Микроб»

Щербакова Наталья Евгеньевна, м.н.с.

Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН

Баранов Виктор Иванович, д.ф.-м.н., зав. лаб. молекулярного моделирования

Выполнена интерпретация колебательных спектров цвиттер-ионных форм ароматических аминокислот фенилаланина и тирозина в водном растворе. Влияние среды учитывалось методом эффективного учёта межмолекулярных взаимодействий. Проведён сравнительный анализ колебательных спектров, позволивший выявить характерные отличия ИК и КР спектров фенилаланина и тирозина.

Введение. Ароматические аминокислоты, к которым относятся триптофан (Trp), тирозин (Tyr) и фенилаланин (Phe), присутствуют практически во всех белках и являются природными флуорофорами [1]. Показано, что флуоресценция большинства белков определяется, главным образом, Trp

остатками. Структурное отличие Trp от Tyr и Phe состоит в наличии у него индольного кольца, который и определяет его спектральные свойства [2]. В свою очередь, Tyr и Phe отличаются друг от друга наличием гидроксильной группы как заместителя бензольного кольца.

Интерпретация вибронных спектров флуоресценции, результаты которой во многом зависят от интерпретации и точности расчёта нормальных колебаний молекулы в основном состоянии, позволяет не только определить структурные изменения, происходящие в ароматических аминокислотах в электронно-возбуждённых состояниях, но и выполнить прогноз химических превращений при электронном возбуждении [3].

Флуоресценция ароматических аминокислот очень сильно зависит от окружения – как аминокислот, так и растворителя. Учитывая, что естественной физиологической средой для белков является вода, а также тот факт, что в водном растворе (при pH=7) все аминокислоты имеют цвиттер-ионную форму, методом DFT в базисе 6-311++g(d,p) был выполнен расчёт колебательных спектров цвиттер-ионных форм

Туг и Phe. Для стабилизации цвиттер-ионов в воде была использована модель реактивного поля Polarized Continuum Model, SCRF-PCM (диэлектрическая проницаемость $\epsilon=78.39$) [4].

Цель данной работы – выполнить интерпретацию колебательных спектров цвиттер-ионных форм Туг и Phe в основном электронном состоянии и провести сравнительный анализ полученных теоретических спектров, как между собой, так и с экспериментальными спектрами Туг и Phe, зарегистрированными в водной среде [5].

Результаты и обсуждение. Молекулярные диаграммы рассматриваемых аминокислот приведены на рис. 1, а вычисленные значения частот нормальных колебаний в гармоническом приближении – в таблице.

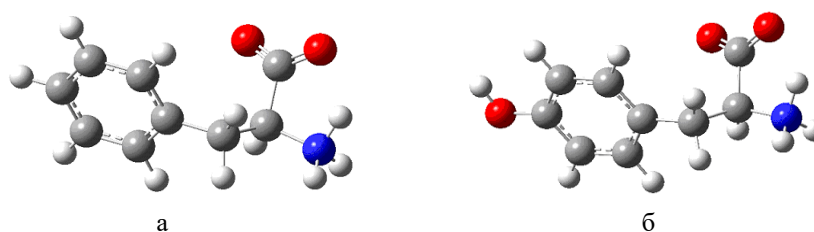


Рис. 1. Молекулярные диаграммы цвиттер-ионных форм Phe (а) и Туг (б)

Таблица. Экспериментальные ($\nu_{\text{эксп}}$, см^{-1}) [5] и вычисленные значения частот ($\nu_{\text{выч}}$, см^{-1}) и интенсивностей спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) и КР ($I_{\text{КР}}$, $\text{Å}^4/\text{а.е.м.}$) Phe и Туг

Phe						Туг				Отнесение*
№	$\nu_{\text{эксп}}$ Phe	$\nu_{\text{эксп}}$ Туг	$\nu_{\text{выч}}$	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	№	$\nu_{\text{выч}}$	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	
1			37	9.8	3.5	1	33	20.0	4.6	χ
2			43	16.2	8.8	2	44	14.3	8.0	χ
3			67	6.9	3.8	3	57	5.5	5.5	χ
4			104	10.9	3.0	4	84	10.6	3.2	χ
5			183	14.1	7.4	5	146	4.6	1.0	χ
						6	249	23.5	6.0	χ
6			247	14.7	1.9	7	271	26.4	1.7	$\tau(\text{N}^+\text{H}_3)$
7			297	19.7	4.6	8	291	1.7	3.5	χ
8			319	3.4	1.8					χ
						9	308	82.2	0.7	$\rho(\text{OH}), \chi$
						10	314	90.5	0.5	$\rho(\text{OH}), \chi$
9			323	66.2	2.0	11	328	65.4	1.5	χ
10			349	4.6	0.4	12	387	4.7	10.5	χ
11			414	0.005	0.03	13	421	7.0	0.1	χ
						14	426	11.7	0.4	$\gamma(\text{CCO})$
12			483	31.6	10.7	15	479	40.0	8.4	χ
13			513	49.9	1.2	16	525	54.6	1.1	χ
14			606	3.0	4.5	17	556	10.3	2.2	$\gamma(\text{CCC})$
15			634	0.1	9.7	18	653	1.6	11.2	$\gamma(\text{CCC})$ b
16			663	8.0	3.7	19	664	6.1	4.3	χ
17			712	69.4	0.2	20	723	3.3	4.2	$\rho(\text{CH}), \chi$ b
18			753	15.8	8.6	21	760	5.2	3.7	$\gamma(\text{CCC})$
19			766	41.8	4.8	22	785	29.1	4.2	$\gamma(\text{NCC})$

						23	821	11.1	10.5	$\rho(\text{CH})$	b
20		830	831	0.3	20.0	24	827	23.4	14.3	$\rho(\text{CH}), \chi$	b
21			833	105.6	15.3	25	845	140.7	9.3	$\rho(\text{CH}), \chi$	b
22		850	859	0.02	5.6	26	858	30.6	70.5	$\gamma(\text{CCC})$	
23			923	22.7	9.1	27	938	16.4	17.3	$\gamma(\text{CCC})$	
24			942	31.4	14.3	28	941	35.0	8.2	χ	
25			957	14.1	8.2	29	961	8.4	6.4	$\rho(\text{CH})$	b
26			991	0.05	0.1	30	976	0.1	0.1	$\rho(\text{CH})$	b
27			1005	10.2	11.4	31	1002	3.1	5.8	$\nu(\text{CN})$	
28			1008	0.7	0.6					$\rho(\text{CH})$	
29	1004		1016	0.3	99.7	32	1028	2.0	0.1	$\gamma(\text{CCC})$	b
30	1032		1048	11.1	37.5					$\delta(\text{CH})$	b
31			1085	16.7	2.7	33	1089	45.5	9.0	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	
32			1102	70.8	6.9	34	1116	46.4	2.3	$\delta(\text{CH})$	
33			1142	31.6	2.4	35	1144	44.2	2.2	$\delta(\text{CH})$	
34			1176	0.1	5.5					$\delta(\text{CH})$	b
						36	1181	295.1	25.8	$\nu(\text{CO})$	
35			1199	0.4	4.5	37	1193	0.5	5.8	$\delta(\text{CH})$	b
36	1182	1180	1209	2.4	20.2	38	1210	23.2	33.0	$\delta(\text{CH})$	
37	1208	1210	1226	1.0	61.8	39	1229	2.2	77.7	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	
		1260				40	1266	177.1	56.7	$\delta(\text{OH})$	
38			1312	37.2	5.3	41	1313	32.0	6.6	$\delta(\text{CH})$	
39			1330	193.1	31.8	42	1330	215.2	43.4	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	
40			1346	4.3	6.8	43	1349	27.2	8.3	$\delta(\text{CH})$	
41			1352	61.5	11.3	44	1359	38.2	6.8	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
42			1370	36.9	3.6	45	1365	31.3	7.4	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
43			1396	64.9	10.1	46	1394	65.5	11.8	$\delta(\text{CH}_2)$	
44			1429	519.1	13.1	47	1429	530.0	13.1	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	
45			1481	6.9	2.7	48	1465	21.5	0.9	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
46			1493	10.4	13.7	49	1491	10.0	15.4	$\delta(\text{CH})$	
47			1525	16.1	1.2	50	1539	169.3	2.5	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
48			1620	68.2	6.4	51	1626	126.9	8.1	$\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	
49	1586	1601	1621	45.9	30.6	52	1629	47.3	27.0	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
50	1606	1617	1640	5.1	99.1	53	1648	79.7	134.6	$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CH})$	b
51			1666	115.8	6.1	54	1665	331.0	7.9	$\nu(\text{COO}^-), \delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	
52			1667	681.6	14.3	55	1669	413.6	14.0	$\nu(\text{COO}^-), \delta(\text{N}^+\text{H}_3)$	
53			3021	40.0	363.3	56	3021	49.8	394.6	$\nu(\text{CH}_2)$	
54			3071	12.5	156.0	57	3068	13.1	159.7	$\nu(\text{CH}_2)$	
55			3109	386.2	140.0	58	3110	382.3	142.3	$\nu(\text{N}^+\text{H}_3)$	
56			3134	19.5	77.3	59	3132	23.3	74.1	$\nu(\text{CH})$	
57			3158	10.6	86.8	60	3159	22.3	113.9	$\nu(\text{CH})$	b
58			3161	5.4	188.0	61	3162	13.7	198.3	$\nu(\text{CH})$	b
59			3171	12.5	190.0	62	3175	17.0	296.7	$\nu(\text{CH})$	b
60			3179	49.3	51.1					$\nu(\text{CH})$	b
61			3190	19.3	681.0	63	3188	10.5	385.6	$\nu(\text{CH})$	b
62			3471	85.7	238.6	64	3470	89.4	248.1	$\nu(\text{N}^+\text{H}_3)$	
63			3529	109.3	83.4	65	3527	109.8	86.5	$\nu(\text{N}^+\text{H}_3)$	
						66	3809	141.1	242.1	$\nu(\text{OH})$	

Примечание * b - колебания бензольного кольца

В области $3000-4000\text{ см}^{-1}$ в ИК спектрах поглощения как Phe, так и Tug наблюдается по три сильных по интенсивности полосы поглощения, отвечающих валентным колебаниям связей N^+H , частоты которых лежат в области $3110, 3470$ и 3530 см^{-1} . В спектрах КР все линии валентных колебаний связей CH , N^+H и OH в рассматриваемой области имеют средне-сильную интенсивность. Отметим, что при сопоставлении экспериментальных и вычисленных частот необходимо учитывать, что частоты валентных колебаний связей OH и N^+H_3 понижаются в результате образования водородных связей с молекулами воды и ангармонизма колебаний на $\sim 300\text{ см}^{-1}$.

В области $1300-1700\text{ см}^{-1}$ в ИК спектре каждой аминокислоты проявляется по пять полос поглощения сильной интенсивности. Это колебания биполярной группы $\nu(\text{COO}^-)$, $\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$, два из которых проявляются в области $1665-1669\text{ см}^{-1}$, деформационные колебания $\delta(\text{N}^+\text{H}_3)$ с частотами в области 1620 и 1429 см^{-1} , а также колебание с частотой 1330 см^{-1} , форма которого является смешанной и отвечает изменениям длины связи CC и валентного угла CCN . Кроме того, в спектре Tug в ИК спектре проявляется полоса сильной интенсивности, отвечающая колебанию с частотой 1539 см^{-1} , форма которого определяется изменением длин связей бензольного кольца. В спектре КР проявляются три линии средне-сильной интенсивности, отвечающих колебаниям связи CC – это колебания, частоты которых имеют значения $1640, 1621, 1330\text{ см}^{-1}$ и $1648, 1629, 1330\text{ см}^{-1}$ для Phe и Tug соответственно.

В области $1000-1300\text{ см}^{-1}$ проявляются колебания, характеризующие структурные отличия Phe и Tug. Это валентные колебания связи CO ($\nu=1181\text{ см}^{-1}$) и деформационные колебания угла COH ($\nu=1266\text{ см}^{-1}$) для Tug, а также колебания для Phe ($\nu=1048$ и 1176 см^{-1}), форма которых является смешанной и содержит

как изменения длины связи CC , так и валентного угла CCN бензольного кольца. В этом же спектральном диапазоне проявляются валентные колебания связи CN ($\nu=1005$ и 1002 см^{-1} для Phe и Tug, соответственно).

В низкочастотной области колебания 1–5 Phe и 1–6 Tug отвечают смещениям бензольного кольца и фрагмента аланина друг относительно друга как целых молекулярных образований.

Частота неплоского колебания выхода связи OH из плоскости бензольного кольца Tug понижается на $\sim 500-700\text{ см}^{-1}$ по сравнению с частотами колебаний ρ (CH) Phe и проявляется в области $\sim 300\text{ см}^{-1}$.

Сравнение вычисленных спектров КР с экспериментальными спектрами Phe и Tug показывает их хорошее соответствие (рис. 2).

Характерные отличия спектров КР Phe и Tug состоят в следующем:

1) деформационным колебаниям валентных углов CCC и CCN бензольного кольца в области $\sim 1000-1050\text{ см}^{-1}$ отвечают линии сильной интенсивности для Phe и слабой для Tug;

2) колебаниям в области $\sim 830-850\text{ см}^{-1}$ отвечают линии средне-сильной интенсивности для Tug и слабой интенсивности для Phe;

3) в спектре Tug проявляется линия средней интенсивности, отвечающая колебанию связи CO с частотой 1266 см^{-1} .

Основные отличия ИК спектров Phe и Tug связаны с проявлением сильных по интенсивности полос поглощения в спектре Tug, отвечающих колебанию выхода связи OH из плоскости бензольного кольца ($\nu=308\text{ см}^{-1}$), колебанию связи CO ($\nu=1181\text{ см}^{-1}$), деформационному колебанию угла COH ($\nu=1266\text{ см}^{-1}$) и валентному колебанию связи OH ($\nu=3809\text{ см}^{-1}$) (рис. 3).

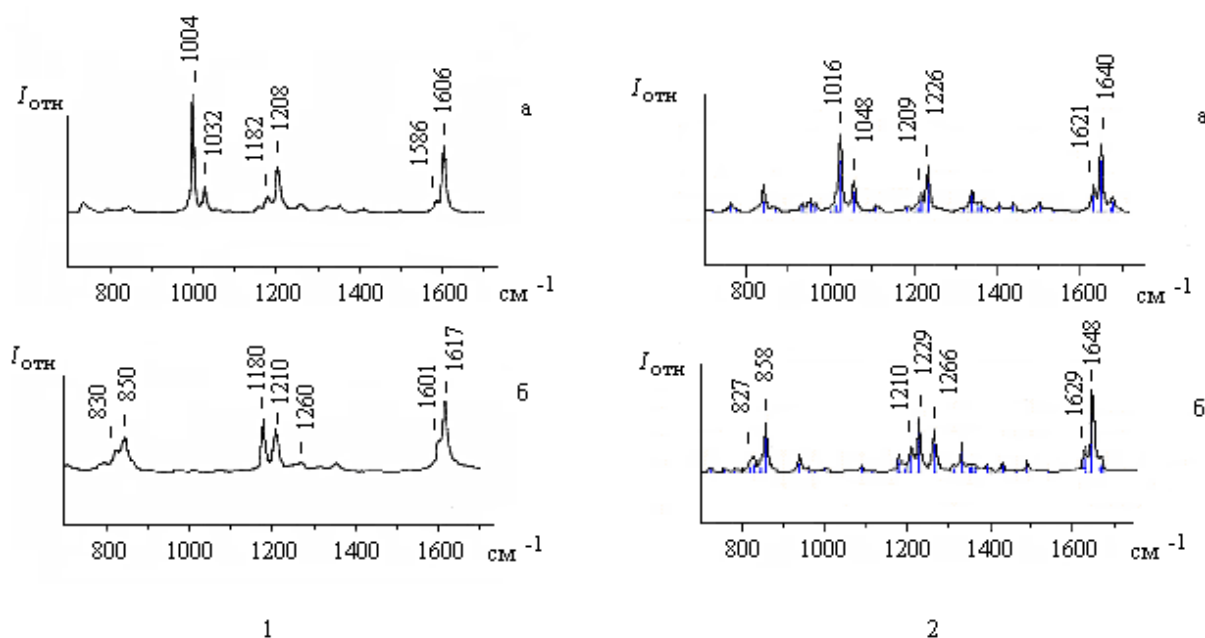


Рис. 2. Экспериментальные [5] (1) и вычисленные (2) спектры КР Phe (а) и Tug (б)

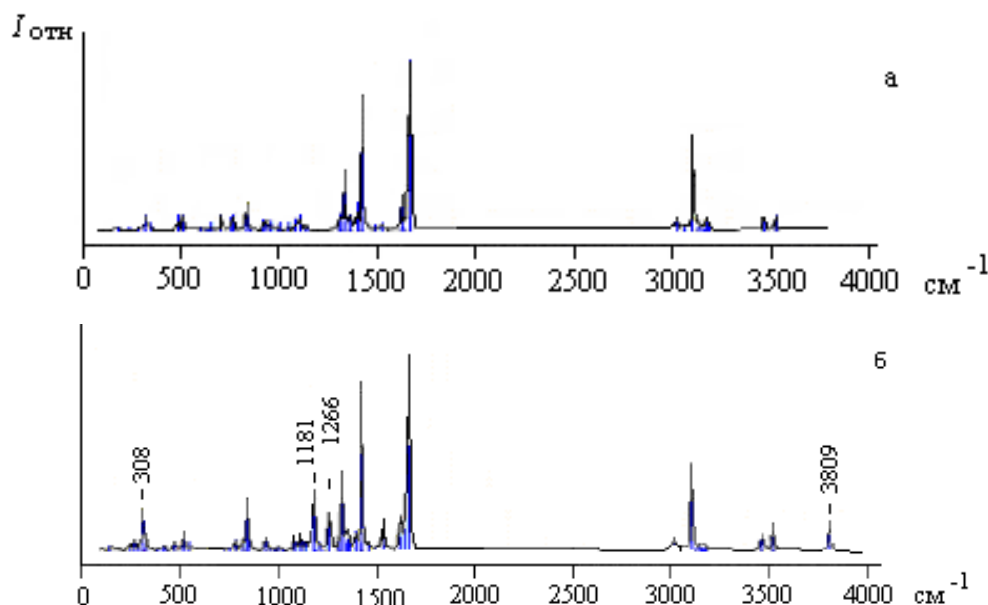


Рис. 3. Вычисленные ИК спектры Phe (а) и Tyr (б)

Выводы. В данной работе методом DFT был выполнен расчёт колебательных (ИК и КР) спектров двух ароматических аминокислот Phe и Tyr в водном растворе и проведена их интерпретация. Влияние среды учитывалось методом эффективного учёта межмолекулярных взаимодействий (модель SCRF).

Сравнение вычисленных и экспериментальных спектров КР Phe и Tyr показало, что основные отличия спектров проявляются в областях проявления

деформационных и валентных колебаний бензольного кольца ($\sim 1000\text{--}1050$ и $\sim 830\text{--}850$ cm^{-1}) и колебаний связи CO (1266 cm^{-1}).

В ИК спектрах Phe и Tyr основные отличия связаны с проявлением сильных по интенсивности полос поглощения в спектре Tyr, отвечающие неплоскому и валентному колебаниям связи CO и деформационному колебанию валентного угла COH.

Библиографический список

- Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986. 496 с.
- Тен Г.Н., Глухова О.Е., Слепченков М.М., Щербаклова Н.Е., Баранов В.И. // Оптика и спектроскопия. 2016. Т. 121. № 4. С.655-662.
- Грибов Л.А., Баранов В.И. Теория и методы расчёта молекулярных процессов. Спектры, химические превращения и молекулярная логика. М.: КомКнига, 2006. 480 с.
- Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2009.
- Takeuchi H. // The Japan Society for Analytical Chemistry. 2011. V. 27. P.1077-1086.

VIBRATIONAL SPECTRA OF PHENYLALANINE AND TYROSINE IN AQUEOUS SOLUTION

¹Ten G. N., ²Shcherbakova N. E., ³Baranov V.I.

¹ Saratov State University

²Russian Research Anti-Plague Institute "Microbe", Saratov

³V.I.Vernadsky Institute of geochemistry and analytical chemistry of the Russian Academy of Sciences

The vibrational spectra of the zwitterionic forms of the aromatic amino acids phenylalanine and tyrosine in an aqueous solution were interpreted. The effect of the medium was taken into account by the method of effective taking into account intermolecular interactions. A comparative analysis of the vibrational spectra was carried out, which made it possible to reveal the characteristic differences between the IR and Raman spectra of phenylalanine and tyrosine.

НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ТЕОРИИ КВАНТОВОГО ТРЕНИЯ

С.В. Чурочкина, И.Я. Демин

Саратовский государственный университет

Чурочкина Светлана Викторовна, к.ф.-м.н., доцент, кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

Демин Игорь Ярославович, студент 3 курса бакалавриата физического факультета СГУ

Идея о существовании квантового трения в течение последних десятилетий все более захватывает научный мир. В этой статье рассказывается об истоках проблемы квантового трения и приводятся альтернативные физические интерпретации данного эффекта. Положительный момент этих альтернативных выводов состоит в том, что дополнительно подтверждается интригующий эффект квантового трения, и не остается сомнений относительно его существования.

1. Сила трения Эйнштейна-Хопфа

Чуть более ста лет назад А. Эйнштейн и Л. Хопф [1] рассмотрели классическую заряженную частицу, имеющую заряд e и массу m , движущуюся в одномерном гармоническом потенциале, и находящуюся в тепловом равновесии с электромагнитным полем. Уравнение движения для этой частицы, включающее силу радиационного трения Абрагама-Лоренца и связь с напряженностью электрического поля E_x , дается выражением:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x - \sigma \frac{d^3x}{dt^3} = \frac{e}{m} E_x, \quad (1.1)$$

где $\sigma = e^2 / 6\pi\epsilon_0 mc^3$. Условие теплового равновесия между атомом и «тепловой баней» подразумевает неисчезающую силу трения F_{EH} Эйнштейна-Хопфа, если центр масс гармонического потенциала находится в движении по отношению к полю. В пределе нерелятивистского движения зависящая от скорости сила трения Эйнштейна-Хопфа равна

$$F_{\text{EH}} = -\frac{e^2}{5mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} 4\pi^2 v \left\{ \rho(\omega_0; T) - \frac{\omega_0}{3} \frac{\partial \rho(\omega_0; T)}{\partial \omega_0} \right\}, \quad (1.2)$$

результат, который был записан в [1], и в уравнении (4.1) из [2]. Здесь $\rho(\omega; T)$ представляет плотность энергии электромагнитного излучения

$$\rho(\omega; T) = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \eta(\omega; T). \quad (1.3)$$

Для проведения дальнейших вычислений воспользуемся тождеством

$$\rho(\omega; T) - \frac{\omega}{3} \frac{\partial \rho(\omega; T)}{\partial \omega} = -\frac{\omega^4}{3\pi^2 c^3} \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega}, \quad (1.4)$$

где $\eta(\omega; T) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$, $\beta = \frac{1}{kT}$, k – постоянная

Больцмана, $\eta(\omega; T)$ – число заполнения теплового фотона. Так что,

$$F_{\text{EH}} = \frac{e^2 \omega_0^4}{15mc^5 \pi \epsilon_0} v \frac{\partial \eta(\omega_0; T)}{\partial \omega_0}. \quad (1.5)$$

В статье [3] показано, как можно найти связь (1.5) с результатом, полученным в [2]. Поступим аналогичным образом.

Согласно [5,6], тензор поляризуемости изотропен для атомов и главный результат в [4] – это выражение для эффективной силы трения, выраженной как спектральный интеграл мнимой части динамической

дипольной поляризуемости частицы (см. выражение (12) в [4]):

$$F_{\text{EF}} = -\frac{\beta^2}{3\pi^5} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} v \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^5 \text{Im} \alpha(\omega)}{\text{sh}^2\left(\frac{1}{2}\beta \omega\right)} = \\ = \frac{1}{3\pi^2 c^5 \epsilon_0} v \int_0^\infty d\omega \omega^5 \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega} \text{Im} \alpha(\omega). \quad (1.6)$$

Здесь $\alpha(\omega)$ – динамическая поляризуемость. Отметим, что сила F_{EF} направлена противоположно скорости v частицы и, таким образом, выступает в

качестве силы трения; знак производной $\frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega}$

отрицателен. Было использовано тождество

$$\frac{\beta}{\text{sh}^2\left(\frac{1}{2}\beta \omega\right)} = -4 \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega}. \quad (1.7)$$

Чтобы сравнить результаты уравнений (1.5) и (1.6), воспользуемся тем фактом, что для случайно ориентированных классических осцилляторов формула (1.6) должна быть усреднена по проекции

волнового вектора k электромагнитной волны на ось z (вдоль которой двигается центр потенциала), и по проекциям векторов поляризации $\epsilon_{k\lambda}$ на ось x (направление гармонических колебаний), и по поляризациям фотона. Это дает дополнительный фактор:

$$\frac{1}{2} \int \frac{d\Omega_k}{4\pi} k_z^2 \sum_\lambda \epsilon_{k\lambda x}^2 = \frac{2}{15}. \quad (1.8)$$

Силы, посчитанные по формулам (1.5) и (1.6), можно сравнить путем решения классического уравнения движения для модели Эйнштейна-Хопфа с колеблющимся электрическим полем. Соответствующая классическая динамическая поляризуемость $\alpha_{\text{HO}}(\omega)$ имеет вид (НО означает гармонический осциллятор)

$$\alpha_{\text{HO}}(\omega) = \frac{e^2}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 - i\sigma\omega^3} \quad (1.9)$$

и пропорциональна функции Грина осциллятора, описываемого уравнением (1.1). В пределе малого радиационного затухания, то есть, когда $\sigma \ll 1/\omega_0$ неисчезающие значения $\alpha_{\text{HO}}(\omega)$ сконцентрированы в области $\omega \approx \omega_0$, и можно аппроксимировать мнимую часть $\alpha_{\text{HO}}(\omega)$ в этом случае, как

$$\text{Im } \alpha_{\text{HO}}(\omega) \approx \frac{\pi e^2}{2\omega_0 m} \delta(\omega - \omega_0). \quad (1.10)$$

Совпадение атомной поляризуемости с таковой для гармонического осциллятора достигается следующим образом:

$$\text{Im } \alpha(\omega) = \frac{2}{15} \cdot 3 \cdot \text{Im } \alpha_{\text{HO}}(\omega) = \frac{\pi e^2}{5\omega_0 m} \delta(\omega - \omega_0). \quad (1.11)$$

Коэффициент 2/15 следует из соотношения (1.8). Коэффициент 3 обусловлен тем фактом, что атомная поляризуемость изотропна (для основного состояния), и вследствие этого коэффициент 3 учитывает возможные возмущения во всех трех направлениях пространства. Идентификация F_{EF} , как F_{EH} , может быть теперь легко сделан

$$\begin{aligned} F_{\text{EF}} &= \frac{1}{3\pi^2 c^5 \varepsilon_0} v \int_0^\infty d\omega \omega^5 \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega} \text{Im } \alpha(\omega) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{3\pi^2 c^5 \varepsilon_0} v \int_0^\infty d\omega \omega^5 \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega} \frac{\pi e^2}{5\omega_0 m} \delta(\omega - \omega_0) \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{e^2 \omega_0^4}{15 m c^5 \pi \varepsilon_0} v \frac{\partial \eta(\omega_0; T)}{\partial \omega_0} = F_{\text{EH}} \end{aligned} \quad (1.12)$$

Это показывает, что сила трения Эйнштейна-Хопфа и эффективная сила затухания имеют одну и ту же физическую природу и описывают один и тот же физический эффект.

2. Эффект Доплера и трение со стороны излучения абсолютно черного тела

Чтобы вывести формулу для силы трения со стороны излучения абсолютно черного тела, действующую на атом, основанную на зависящем от направления эффекте Доплера, нам необходимо знать

✓ результат, который позволяет выразить сдвиг в частотах падающего излучения абсолютно черного тела в терминах зависящей от направления температуры;

✓ результат, который связывает интенсивность падающего света с мнимой (диссипативной) частью атомной поляризуемости.

Вторая из этих предпосылок дана в [7]. Действительно, комбинированные эффекты доплеровского сдвига и изменение в интенсивности, обусловленные Лоренцевским сжатием [7], видимые для движущегося наблюдателя, приводят к изменению наблюдаемой температуры T_0 для «тепловой бани», которая зависит от относительного

угла θ между волновым вектором k и скоростью v и дается выражением

$$T_0(\theta) = T \sqrt{\frac{c - v \cos \theta}{c + v \cos \theta}} = T - T \frac{v}{c} \cos \theta + O(v^2). \quad (2.1)$$

Этот результат основан на известных свойствах излучения абсолютно черного тела при преобразованиях Лоренца [7].

Первое условие может быть найдено в [8]. А именно, сила, действующая на частицу в поле плоского монохроматического излучения интенсивности $I(\omega)$, равна:

$$F = -\frac{\omega}{\varepsilon_0 c} \text{Im } \alpha(\omega) I(\omega). \quad (2.2)$$

В случае частицы, движущейся сквозь излучение абсолютно черного тела, зависящее от направления распределение интенсивности равно

$$I(\omega) = \rho(\omega; T_0(\theta)) / (4\pi). \quad (2.3)$$

Остальная часть вычислений довольно проста. Частица, движущаяся сквозь излучение абсолютно черного тела, испытывает ненулевую силу, параллельную его скорости. С учетом вышеизложенного, имеем

$$F \sim \int_0^\infty d\omega \left(-\frac{\omega}{\varepsilon_0 c} \text{Im } \alpha(\omega) \right) \int d\Omega \cos \theta \frac{\rho(\omega; T_0(\theta))}{4\pi} \quad (2.4)$$

Используя правило дифференцирования сложной функции, получаем

$$\begin{aligned} \rho(\omega; T_0(\theta)) &= \rho\left(\omega; T - T \frac{v}{c} \cos \theta\right) \approx \\ &\approx \rho(\omega; T) + \frac{\partial}{\partial T} \rho(\omega; T) \left(-T \frac{v}{c} \cos \theta \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Что касается знака силы, заметим, что для положительных частот возбуждения, мнимая часть атомной поляризуемости в уравнении (2.2) – положительна. Сила F , данная в уравнении (2.2), таким образом, отрицательна и замедляет атом. Производная $\frac{\partial}{\partial T} \rho(\omega; T)$ – положительна. Известно,

что эффективная температура излучения абсолютно черного тела должна возрастать в направлении полета атома, то есть при $\theta = 0$. Напротив, в формуле (2.1) θ измеряет угол относительно входящего излучения, а не угол относительно встречного направления. Таким образом, как показано ниже, внесем знак «минус» и получим зависящую от скорости часть уравнения (2.1)

$$\begin{aligned} F &= \int_0^\infty d\omega \left(-\frac{\omega}{\varepsilon_0 c} \text{Im } \alpha(\omega) \right) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \cos \theta \left(\frac{\partial}{\partial T} \rho(\omega; T) \right) \left(+T \frac{v}{c} \cos \theta \right) = \\ &= -\frac{v}{3\varepsilon_0 c^2} \int_0^\infty d\omega \omega T \frac{\partial \rho(\omega; T)}{\partial T} \text{Im } \alpha(\omega) = -\frac{v}{3\varepsilon_0 c^2} \int_0^\infty d\omega \omega \left(-\frac{\omega^4}{\pi^2 c^3} \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega} \right) \text{Im } \alpha(\omega) = \\ &= -\frac{1}{3\pi^2 c^5 \varepsilon_0} v \int_0^\infty d\omega \omega^5 \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega} \text{Im } \alpha(\omega), \end{aligned} \quad (2.6)$$

которая в точности равна формуле (1.6).

При вычислениях было использовано тождество

$$T \frac{\partial \rho(\omega; T)}{\partial T} = - \frac{\omega^4}{\pi^2 c^3} \frac{\partial \eta(\omega; T)}{\partial \omega}. \quad (2.7)$$

Таким образом, можно увидеть простую картину, в которой сила трения, введенная в (1.6), может быть, в конечном счете, связана с эффектом Доплера. Следовательно, можно думать, что случайное поле, увеличивает кинетическую энергию классической частицы, так как флуктуации непрерывно ударяют по ней. Однако, как только частица оказывается в движении, условие теплового равновесия ведет к уменьшению кинетической энергии, вплоть до

предела отдачи. Тепловые фотоны, налетающие на движущуюся частицу спереди, имеют «голубой» сдвиг, при этом фотоны, налетающие на нее сзади, имеют «красный» сдвиг (см. рисунок 1), и, следовательно, обладают меньшей энергией. Напротив, излучение симметрично по отношению к прямому и обратному направлениям в системе покоя атома. При тепловом равновесии между движущейся частицей и флуктуирующим полем, таким образом, имеют чистую диссипацию энергии, проявляющуюся, как сопротивление или трение со стороны излучения абсолютно черного тела.

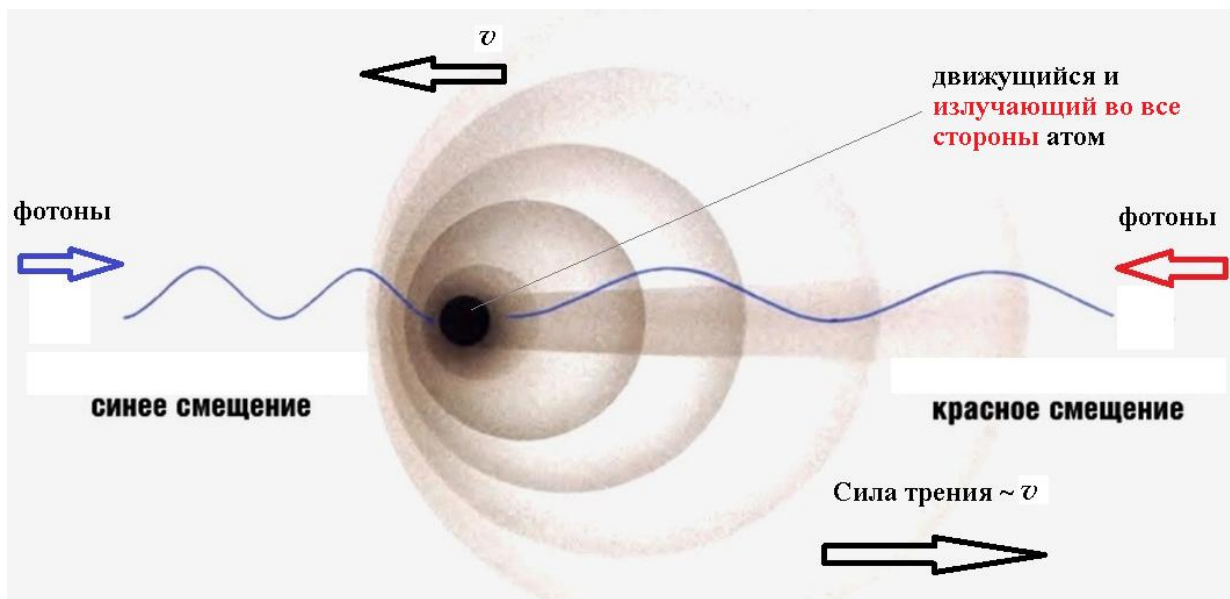


Рисунок 1.

3. Заключение

В данной статье были продемонстрированы два альтернативных вывода силы трения со стороны излучения абсолютно черного тела, действующую на движущийся атом, первоначально полученную в [4]. В частности, было показано, что результат Эйнштейна-Хопфа для теплового трения может быть интерпретирован в терминах силы теплового трения, действующей на атом, при условии, что тензор атомной поляризуемости заменяется тензором, соответствующим классическому объекту, подверженному воздействию силы затухания, которая пропорциональна производной по времени от ускорения (радиационное трение).

Также была представлена интуитивная картина, в которой сила трения со стороны излучения абсолютно черного тела определяется изменением температуры «тепловой бани», воздействие которой посредством тепловых фотонов, прилетающих с разных направлений, испытывает атом, движущийся через нее. Действительно, комбинированный эффект Лоренцевского сжатия и соответствующее изменение в интенсивности излучения абсолютно черного тела и доплеровского сдвига могут быть учтены в зависящем от направлении изменении температуры для тепловых фотонов. Разлагая изменение температуры в ряд до первого порядка по скорости, было показано непосредственное и прямое воспроизведение эффекта.

Библиографический список

1. Einstein, A. Statistische Untersuchung der Bewegung eines Resonators im einem Strahlungsfeld / A. Einstein, L. Hopf // Ann. Phys. (Leipzig). 1910. Vol. 33. P. 1105-1115.
2. Milonni, P. W. Quantum mechanics of the Einstein–Hopf model / P. W. Milonni // Am. J. Phys. 1981. Vol. 49, Issue 2. P. 177-184.
3. Lach, G. Einstein–Hopf drag, Doppler shift of thermal radiation and blackbody drag: Three perspectives on quantum friction / G. Lach, M. DeKieviet, U. D. Jentschura // Cent. Eur. J. Phys. 2012. Vol. 10, Issue 4. P. 763-767.
4. Mkrtchian, V. Universal Thermal Radiation Drag on Neutral Objects / V. Mkrtchian, V. A. Parsegian, R. Podgornik, W. M. Saslow // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91, No. 22. P. 220801(4).
5. Рытов, С. М. Введение в статистическую радиофизику : в 2 т. / С. М. Рытов, Ю. А. Кравцов, В. И. Татарский. М.: Наука, Гл. ред. физ-мат литературы, 1978.

6. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие : в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц ; под ред. Л. П. Питаевского. Т. 9. Статистическая физика, ч. 2 : Теория конденсированного состояния / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. 4-е изд., стер. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2004. 493 с.
 7. McKinley, J. M. Relativistic transformations of light power / J. M. McKinley // Am. J. Phys. 1979. Vol. 47, No. 7. P. 602-605.
 8. Grimm, R. Optical Dipole Traps for Neutral Atoms // R. Grimm, M. Weidemuller, Y. B. Ovchinnikov // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 2000. Vol. 42. P. 95-170.

SOME ASPECTS OF THE QUANTUM FRICTION THEORY

S. Churochkina, I. Demin
 Saratov State University

The idea of the existence of quantum friction progressively takes possession of the scientific community during the past decades. This article describes the origins of the problem of quantum friction problem and gives alternative physical interpretations of this effect. The benefit of these alternative conclusions is that the intriguing effect of quantum friction is additionally confirmed, and there are no doubts regarding to its existence.

УДК 530.145

**СОБСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ И ВЕРШИННАЯ ЧАСТИ
 В ЭЛЕМЕНТАХ КВАЗИПОТЕНЦИАЛА ВНЕ МАССОВОЙ ПОВЕРХНОСТИ**

Н.Е. Ньюнко, К.В Санков

Саратовский государственный университет
 Ньюнко Николай Евгеньевич, к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры компьютерной физики,
 Межрайонное ИФНС России №12 по Саратовской области
 Санков Константин Викторович, заместитель начальника отдела по ИТ технологиям

Построены и исследуются элементы квазипотенциала, содержащие вершинную и собственно-энергетическую части вне массовой поверхности.

В работе используется вариант квазипотенциального подхода [1, 2] с нулевыми относительными энергиями частиц [3, 4], а элементы амплитуды рассеяния строятся с помощью фейнмановских правил соответствия с учетом несвободных внешних 4-х импульсов **q** и **p** в in- и out-состояниях.

где **S** и **D** - пропагаторы свободного фермиона и фотона, причём последний в зависимости от коэффициента **α** (калибровки Фейнмана, Ландау и Йенни) даёт возможность проверки независимости получаемых результатов от выбора его вида. Таким образом, имеем для **Σ** два слагаемых – фейнмановскую (**F**, **α = 0**) и калибровочную (**KX**) части.

Фейнмановское интегрирование [6] по виртуальному импульсу даёт

$$2\pi\Sigma_F = \alpha\{(2m-p/2)\ln(L^2/m^2)-(2m-p/4)+$$

$$1 + \int_0^1 du \ln(m^2/\Lambda^2)(2m+p(u-1))$$

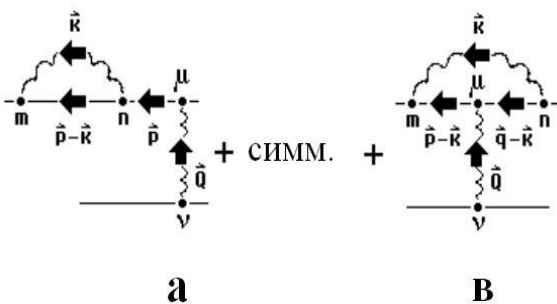
$$\Lambda^2 = u^2p^2 + u(m^2 - p^2) + \lambda^2(1-u)$$

$$4\pi\Sigma_{KX} = \alpha\Delta p \{ \int d^4k (k^2 - \lambda^2)^{-2} + \int_0^1 du (1-$$

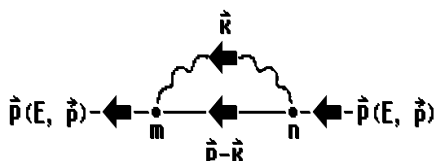
$$-u)[p(u-1)-m]/\Lambda^2 \} \Delta p$$

Здесь **L** – обрезание ультрафиолетовой (уф-) особенности, а **λ** – обрезание инфракрасной (ик-) области в случае, когда внешние четырёхимпульсы берутся в приближении свободных частиц в in- и out-состояниях.

Устранение уф-особенностей проводится вычитанием расходящихся частей. **Σ** раскладывается в точке **p=c** и первые два слагаемых, оказывающихся расходящимися, вычитаются. В задачах рассеяния в КЭД константу **c** выбирают равной массе частицы. В проблеме связанных состояний можно выбирать **c** равной энергии соответствующей частицы вне массовой поверхности (МП), уходя от расходимостей в ик-области.



Выбор диаграмм обусловлен также наличием в этих процессах особенностей как в ультрафиолетовой, так и в инфракрасной области.



Для собственно-энергетической диаграммы аналитическое выражение [5,6] имеет вид

$$i(2\pi)^4 \Sigma(p) = e^2 \int d^4k \gamma_m S(p-k) \gamma_n D^{mn}(k)$$

$$D^{mn}(k) = (k^2 - \lambda^2)^{-2} [(k^2 - \lambda^2) g^{mn} - @k^m k^n]$$

$$S^{-1}(p) = (p\gamma) - m,$$

$$\Sigma^R(p) = \Sigma(p) - \Sigma(p=c) - (p-c)(\partial\Sigma(p)/\partial p)|_{p=c}$$

$$2\pi(\Sigma^R)_F = \alpha \int_0^1 du \{ \ln(\Lambda_0^2/\Lambda^2) [m(u+1) + (p-m)(u-1)] + (p-m)(u^2-1)2m^2u/\Lambda_0^2 \}$$

$$4\pi(\Sigma^R)_{KX} = \alpha \Delta p \int_0^1 du (1-u) \{ [p(u-1) - m] \Delta p / \Lambda^2 - (u^2-2u)^2 \Lambda_0^2 \}$$

$$\Lambda_0^2 = u^2 m^2 + \lambda^2 (1-u)$$

Отметим, что в слагаемых с Λ_0 содержится ик-расходимость по λ . При регуляризации в точке $c=E$ она не возникает. Приведем результат перенормировки в этой точке для фейнмановской части

$$2\pi(\Sigma^R)_{F(c=E)} = \alpha \int_0^1 du \{ \ln(\Lambda_E^2/\Lambda^2) [2m + p(u-1)] + (p-E)[2m + E(u-1)] u(u-1) 2E/\Lambda^2 E \}$$

$$\Lambda_E^2 = u^2 E^2 + u(m^2 - E^2) + \lambda^2 (1-u)$$

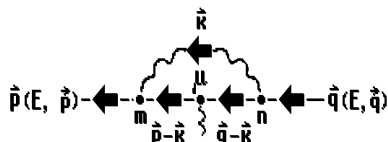
$$2\pi(\Sigma^R)_F = \alpha \{ [\ln(m^2/\omega^2) [(p\omega^2/2p^2) + p - 2m - p/2] (\omega^2/p^2) + (p-m)(1 + \ln(\lambda^2/m^2))] \}$$

$$\omega^2 = m^2 - p^2$$

При $@ = -2$ (калибровка Йенни) из полученных выражений следует [6] результат Томозавы

$$2\pi[\Sigma^R]_Y S(p_k) = \alpha \{ [3(p-m)p/p^2 [1 + \ln(\omega^2/m^2)(\omega^2/p^2)] \}$$

Аналитическое выражение для вершинной диаграммы имеет вид:



$$i(2\pi)^4 \Gamma_\mu = e^2 \int d^4 k \gamma_m S(p_k) \gamma_\mu S(q_k) \gamma_n D^{mn}(k)$$

$$i4\pi^3 (\Gamma_\mu)_F = \alpha \int d^4 k (k^2 - \lambda^2)^{-1} \gamma_m S(p_k) \gamma_\mu S(q_k) \gamma^m$$

$$i4\pi^3 (\Gamma_\mu)_{KX} = \alpha \int d^4 k (k^2 - \lambda^2)^{-2} (k\gamma) S(p_k) \gamma_\mu S(q_k) (k\gamma)$$

Библиографический список

1. Logunov A.A., Tavkhelidze A.N. // Nuovo Cim. 29, 390, 1963
2. Фаустов Р.Н. // Препринт ОИЯИ Р-1572 Дубна, 1964
3. Фаустов Р.Н. // ЭЧАЯ 3, вып.1, 238, 1972
4. Нюнько Н.Е., Тяхтяев Ю.Н., Фаустов Р.Н. // Препринт.ОИЯИ Р2-6996, Дубна, 1973.
5. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Введение в релятивистскую теорию квантованных полей. М.,НАУКА. 1972
6. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М., НАУКА, 1968

SELF- ENERGY AND TOP PARTS IN ELEMENTS OF QUASIPOTENTIAL OUTSIDE THE MASS SURFACE

¹N.E. Nyun'co, ²K.V. Sankov

¹Saratov state University

²Russia IFNS 12 of the Saratov region

Vertex and self-energy off-mass shell parts in elements of quasipotential are investigated.

$$2\pi(\Gamma_\mu)_F = \alpha \int_0^1 \int_0^1 u d u d v \{ (\ln(L^2/\Lambda_\Gamma^2) \gamma_\mu^{-3/2}) + MC/\Lambda_\Gamma^2 \}$$

$$\Lambda_\Gamma^2 = u^2(p-vQ)^2 + uv(2pQ-Q^2) + u(m^2-p^2) + \lambda^2(1-u)$$

$$MC = A(u)m^2 \gamma_\mu + B(u)m[Q\gamma_\mu - \gamma_\mu Q] + C(u,v)mQ_\mu - D(u,v)Q\gamma_\mu Q + \Delta MC$$

$$A(u) = u^2 - 2(1-u), C(u,v) = u(1+u)(1-2v), B(u) = (1-u)/2, D(u,v) = (1-uv)(1-u+uv)$$

$$\Delta MC = (u^2-1)[\Delta p \gamma_\mu + \gamma_\mu \Delta q] + [F(u,v)\Delta p \gamma_\mu Q - Q\gamma_\mu \Delta q G(u,v)] + (1-u)^2 \Delta p \gamma_\mu \Delta q, \Delta r = m - (r\gamma)$$

$$F(u,v) = (1-u)(1-u+uv), G(u,v) = (1-u)(1-uv)$$

Здесь $\ln(L^2)$ – выделенная особенность в уф-области. Часть ΔMC отлична от нуля лишь вне МП. Калибровочная часть представляет из себя сумму:

$$4i\pi^3 (\Gamma_\mu)_{KX} = \alpha \int d^4 k (k^2 - \lambda^2)^{-2} \{ \gamma_\mu + \Delta p S(p_k) \gamma_\mu + \gamma_\mu S(q_k) \Delta q + \Delta p S(p_k) \gamma_\mu S(q_k) \Delta q \} =$$

$$= \alpha \{ \int d^4 k (k^2 - \lambda^2)^{-2} \gamma_\mu + \Delta p I(p) \gamma_\mu + \gamma_\mu I(q) \Delta q + \Delta p I_\mu(p, q) \Delta q \}$$

$$I(p) = i\pi^2 \int_0^1 (1-u) du (1/\Lambda_p^2) [p(u-1) - m],$$

$$I_\mu(p, q) = i\pi^2 \int_0^1 \int_0^1 u(1-u) du dv (1/\Lambda_\Gamma^2)^2 [\gamma_\mu \Lambda_\Gamma^2 + (p(1-u) + Quv + m) \gamma_\mu [q(1-u) - Q(1-uv) + m]]$$

Регуляризованные выражения для частей вершины при перенормировке на МП:

$$2\pi[\Gamma_\mu^R]_F = \alpha \int_0^1 \int_0^1 u d u d v \{ \gamma_\mu \ln(\Lambda_0^2/\Lambda_\Gamma^2) + MC/\Lambda_\Gamma^2 - MC(Q=0, p=q=m)/\Lambda_0^2 \}$$

$$4\pi[\Gamma_\mu^R]_{KX} = \alpha \{ \Delta p I(p) \gamma_\mu + \gamma_\mu I(q) \Delta q + \Delta p I_\mu(p, q) \Delta q \}$$

Аналогичные выражения получаются и при перенормировке вне МП. В этом случае сингулярности в ик-области, связанные с λ , отсутствуют.

**ОДНОМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКИ О ПРЯМОУГОЛЬНОМ БАРЬЕРЕ**

Н.Е. Нюнько, К.В Санков

Саратовский государственный университет

Нюнько Николай Евгеньевич,

к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры компьютерной физики,
Межрайонное ИФНС России №12 по Саратовской области

Санков Константин Викторович,

Заместитель начальника отдела по ИТ технологиям.

В помощь студентам рассматривается методика решения стационарного уравнения Шредингера для задач с одномерным потенциальным барьером при энергии частицы, не превосходящей потенциал.

В настоящей работе, носящей исключительно методический характер, рассматривается одномерное стационарное уравнение Шредингера с постоянным положительным потенциалом прямоугольного типа.

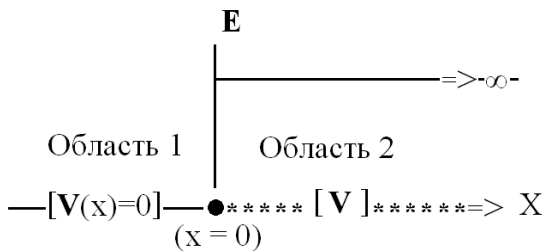
$$-(\hbar^2/2m)\psi''(x) + V\psi(x) = E\psi(x) =>$$

$$\psi''(x) \pm K^2\psi(x) = 0$$

$$K^2 = |V-E|, \quad 2mV/\hbar^2 = V, \quad 2mE/\hbar^2 = E = k^2$$

В дальнейшем из-за громоздкости формул используем для экспонент нестандартные обозначения $\exp(x) = \underline{E}(x)$ и $\exp(ix) = \underline{I}(x)$.

Простейшей является задача о полубесконечном прямоугольном потенциальном барьере [1, 2]



В области 1 и 2 общие решения стационарного УШ имеют вид

$$\psi_1(x) = A_1 \underline{I}(kx) + A_2 \underline{I}(-kx)$$

$$\psi_2(x) = B_1 \underline{E}(Kx) + B_2 \underline{E}(-Kx)$$

$$E < V, \quad K^2 = V - E, \quad k^2 = E.$$

Далее рассматриваем $E < V$, поскольку заменой K на $-iK$ в решении для области 2 при $E < V$ автоматически получим решение для $E > V$.

Первое слагаемое в $\psi_1(x)$ характеризует всю налетевшую на барьер частицу-волну, а A_1 – известная константа нормировки для частицы. Постоянная во втором слагаемом характеризует степень отражения от барьера и подлежит определению при решении задачи.

В области 2 для ограниченности решения при $x \Rightarrow +\infty$ необходимо чтобы $B_1 = 0$. Далее из общего решения надо получить частное, непрерывное вместе с первой производной для $x \in (-\infty, +\infty)$, сшивая $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и их производные в точке $x = 0$.

$$\psi_1(x) = A_1 \underline{I}(kx) + A_2 \underline{I}(-kx)$$

$$\psi_2(x) = B_2 \underline{E}(-Kx)$$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow ik(A_1 + A_2) = ikB_2$$

$$\psi'_1(0) = \psi'_2(0) \Rightarrow ik(A_1 - A_2) = -KB_2$$

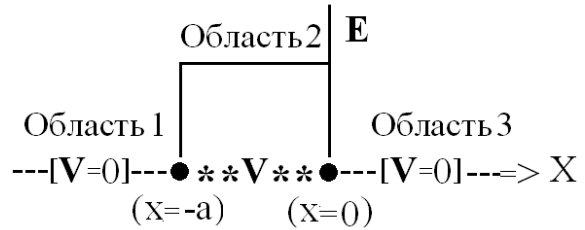
$$B_2 = 2A_1 k / (k + iK),$$

$$A_2 = A_1 (k - iK) / (k + iK)$$

$$\psi_1(x) = A_1 \{ \underline{I}(kx) + [(k - iK)/(k + iK)] \underline{I}(-kx) \}$$

$$\psi_2(x) = A_1 [2k / (k + iK)] \underline{E}(-Kx)$$

Теперь рассмотрим случай конечной протяжённости потенциала [1,2].



Отметим, что несмотря на существование многочисленной учебной литературы по квантовой механике, явный вид собственно решения в большинстве источников не приводится, в основном фиксируются коэффициенты отражения и пропускания.

Нестандартный выбор точки правой границы потенциала ($x = 0$) продиктован исключительно соображениями удобства и простоты вида решения, в чём может убедиться студент, получая непрерывное частное решение такой задачи при включении потенциала на $x = (0, a)$. Отметим, что выбор интервала $x = (-a, 0)$ не позволяет перевести решение нашего варианта задачи в предыдущий случай полубесконечного потенциала напрямую при стремлении правой границы потенциального барьера $k \rightarrow +\infty$. Зато после замены переменной x на $x - a$ предельный переход $a \Rightarrow +\infty$ возможен и приводит, естественно, к решению предыдущей задачи.

В областях 1, 2 и 3 соответственно имеем

$$\psi_1(x) = A_1 \underline{I}(kx) + A_2 \underline{I}(-kx)$$

$$\psi'_1(x) = ik[A_1 \underline{I}(kx) - A_2 \underline{I}(-kx)]$$

$$\psi_2(x) = B_1 \underline{E}(Kx) + B_2 \underline{E}(-Kx)$$

$$\psi'_2(x) = K[B_1 \underline{E}(Kx) - B_2 \underline{E}(-Kx)]$$

$$\psi_3(x) = C_1 \underline{I}(kx) + C_2 \underline{I}(-kx) = C \underline{I}(kx)$$

$$\psi'_3(x) = ikC \underline{I}(kx)$$

Постоянную C_2 принимаем равной нулю, поскольку отсутствует отражение частицы-волны в области 3 из $+\infty$. Сшивая $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ и их производные в точке $x = -a$, имеем

$$K\psi_1(-a) = K\psi_2(-a) \Rightarrow K[A_1 \underline{I}(-ka) + A_2 \underline{I}(ka)] = K[B_1 \underline{E}(-Ka) + B_2 \underline{E}(Ka)]$$

$$\psi'_1(-a) = \psi'_2(-a) \Rightarrow ik[A_1 \underline{I}(-ka) - A_2 \underline{I}(ka)] = K[B_1 \underline{E}(-Ka) - B_2 \underline{E}(Ka)]$$

откуда следует

$$A_1 k \underline{I}(-ka) + A_2 k \underline{I}(ka) = 2KB_1 \underline{E}(-Ka)$$

$$A_1 k \underline{I}(-ka) + A_2 k \underline{I}(ka) = 2KB_2 \underline{E}(Ka) \tag{1}$$

$$k_+ = [K + ik] \quad k_- = [K - ik]$$

Непрерывность соответствующих решений и их производных в точке $x = 0$ даёт

$$\psi_2(0) = \psi_3(0) \Rightarrow ik[B_1 + B_2] = ikC$$

$$\psi'_2(0) = \psi'_3(0) \Rightarrow K(B_1 - B_2) = ikC$$

откуда следует

$$ik[B_1+B_2] = K(B_1-B_2)$$

$$B_2k_+ = B_1k_-$$

$$B_2 = B_1(k_-/k_+) = BP(\pm)$$

$$C = B[1+P(\pm)] \tag{2}$$

Из соотношений (1) с учётом (2) получим

$$\{A_1k_+I(-ka) + A_2k_-I(ka)\}P(\pm) = 2KBVP(\pm)E(-Ka)$$

$$\{A_1k_+I(-ka) + A_2k_-I(ka)\}E(-2Ka) = 2KBVP(\pm)E(-Ka)$$

$$A_1k_+[1-E(-2Ka)]I(-2ka) = A_2[k_+E(-2Ka) - k_-P(\pm)] \Rightarrow$$

$$A_2 = A_1k_+[E(Ka) - E(-Ka)]I(-2ka) / [k_+E(-Ka) - k_-P(\pm)]$$

$$P(\pm)E(Ka) =$$

$$= A_1k_+k_-I(-2ka)[E(Ka) - E(-Ka)]R^{-1}$$

$$R = (k_+)^2E(-Ka) - (k_-)^2E(Ka) =$$

$$= (k+iK)^2E(ka) - (k-iK)^2E(-ka)$$

Используем (1), (2) и полученную связь постоянных A_1 и A_2 для выражения констант C и B через A_1 , что позволяет записать для решения

$$\psi_1(x) = A_1 \{I(kx) + I(-k(x+2a))(k^2+K^2)[E(Ka) - E(-Ka)]R^{-1}\}$$

$$\psi_2(x) = -A_1 2kI(-ka)\{(k-iK)E(Kx) - (k+iK)E(-Kx)\}R^{-1}$$

$$\psi_3(x) = A_1 4ikKI(k(x-a))R^{-1}$$

Выполняя замену $x+a \Rightarrow x$, получаем решение задачи для начала барьера в $x=0$ и соответственно, окончания потенциальной ступеньки в $x=a$. Такая замена позволит выполнить предельный переход $a \Rightarrow +\infty$, сводя полученные результаты к предыдущей задаче.

∞ , сводя полученные результаты к предыдущей задаче.

$$\psi_1(x) = A_1 \{I(kx) + I(-kx)(k^2+K^2)[E(Ka) - E(-Ka)]R^{-1}\}$$

$$\psi_2(x) = -A_1 2k\{(k-iK)E(K(x-a)) - (k+iK)E(-K(x-a))\}R^{-1}$$

$$\psi_3(x) = A_1 4ikKI(k(x-a))R^{-1}$$

Здесь мы переопределили нормировочную константу, включив в неё фазовый множитель $A_1 = A_1 I(-ka)$. При стремлении $a \Rightarrow +\infty$, определяющим является поведение неограниченно возрастающей $E+(a)$. Слагаемые, пропорциональные $E-(a)$, при этом зануляются, а множитель R^{-1} упрощается

$$R^{-1} = [(k+iK)^2E(ka) - (k-iK)^2E(-ka)]^{-1} \approx E(-ka)/(k+iK)^2$$

и для асимптотики решения имеем

$$\psi_1(x) \approx A_1 \{I(kx) + I(-kx)(k^2+K^2)E(ka)E(-ka)(k+iK)^{-2}\}$$

$\} =$

$$= A_1 \{I(kx) + [(k-iK)/(k+iK)]I(-kx)\}$$

$$\psi_2(x) \approx A_1 2k(k-iK)/(k+iK)/(k-iK)E(-Kx)E(Ka)E(-Ka)(k+iK)^{-2} =$$

$$= A_1 [2k/(k+iK)]E(-Kx)$$

$$\psi_3(x) \approx A_1 4ikKI(k(x-a))E(-Ka)/(k+iK)^2 =$$

$$= (\text{Const относительно } a) * E(-ka) \Rightarrow 0 \text{ при } a \Rightarrow +\infty$$

что в точности соответствует решению предыдущей задачи.

Библиографический список

1. Л. Шифф. Квантовая механика. Изд-во ИЛ, М., 1959
2. Э.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т.1, Изд-во Мир, М., 1974.

ONE-DIMENSIONAL QUANTUM-MECHANICAL PROBLEM IN THE CASE OF CONSTANT RECTANGULAR BUILDING

¹N.E. Nyun'co, ²K.V. Sankov

¹Saratov state University

²Saratov region IFNS RUSSIA №12

Examines the methodic of solving one-dimensional problems of quantum mechanics in the case of a constant rectangular potential with the energy of the particle is smaller potential value.

ИНДИКАТОР НАРУШЕНИЯ ЗАКОНА АРХИМЕДА – КЛЮЧ К ИЗУЧЕНИЮ
ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМ

Клугман И. Ю.

Клугман Илья Юльевич, к.т.н.

В дисперсных системах часто происходит взаимодействие между дисперсными включениями и жидкой средой. Как показал Б. В. Дерягин, этот процесс должен сопровождаться нарушением закона Архимеда. Для упрощения изучения процессов взаимодействия дисперсных включений с жидкой средой нами был предложен параметр, отражающий не только нарушение закона Архимеда, но и дающий численную оценку этого нарушения. На примере водного электролита при бесконечном разбавлении показано, как с помощью этого параметра, названного индикатором нарушения закона Архимеда K_{Aac} , можно определить изменения, происходящие с ионом в процессе гидратации, и разработать модель электролита, позволяющую определить его эквивалентную электропроводность и его коэффициент диффузии.

Введение

Б. В. Дерягин [1] показал, что, если при погружении тела в раствор происходит нарушение закона Архимеда, необходимо внести поправку на адсорбцию растворенных молекул. Учет этой поправки дает возможность прямого определения адсорбции взвешиванием. Уменьшение объема погружаемых тел приводит к росту относительного значения этой поправки. Идея Б. В. Дерягина по использованию поправки к закону Архимеда для учета взаимодействия дисперсных частиц с жидкой средой представляется весьма важной для уточнения процессов, происходящих не только в дисперсных системах, но и в электролитах, где происходит взаимодействие ионов с жидкой средой при гидратации. Для этого в первую очередь необходимо определить величину поправки к закону Архимеда, которая в сочетании с законами взаимодействия иона с молекулами раствора позволит оценить изменения, происходящие с ионом.

Ниже рассматривается водный электролит с одновалентными ионами при бесконечном разбавлении, где отсутствует взаимное влияние между ионами и имеет место только взаимодействие иона с водной средой. Это позволяет проследить влияние гидратации на параметры ионов.

1. Индикатор нарушения закона Архимеда

Для использования идеи Б. В. Дерягина необходим параметр, с помощью которого можно определить степень нарушения закона Архимеда. У электролитов имеется вспомогательный параметр – кажущийся молярный объем Φ , с помощью которого определяют их парциальный объем \bar{V}_2 . Величину Φ определяют по формуле:

$$\Phi = \frac{1000}{cd_0} (d_0 - d_e) + \frac{M_2}{d_0}, \quad (1)$$

где d_0 и d_e – плотности воды и электролита в г/см³, M_2 – молярная масса соли в г. c – концентрация электролита в моль/л.

К сожалению, физическая сущность параметра Φ никого не заинтересовала, а из формулы (1) она не видна. Если через V_w обозначить объем воды в одном литре электролита, то согласно (1) с учетом того, что $d_e = V_w d_0 + cM_2$, получим:

$$\Phi = \frac{[(1000 - V_w)d_0 - M_2c] + M_2c}{cd_0} = \frac{1000 - V_w}{c}. \quad (2)$$

При приготовлении электролита с концентрацией c моль/л насыпается c молей соли и добавляется вода, чтобы объем раствора был равен одному литру. Поэтому при отсутствии взаимодействия между

ионами и водой параметр Φ в см³/моль должен быть равен объему ионов:

$$V_{ac} = \frac{4\pi}{3} N_A (r_a^3 + r_c^3) = 2.523(r_a^3 + r_c^3), \quad (3)$$

где r_a и r_c – радиусы анионов и катионов в Å, N_A – число Авогадро.

Однако, если происходит взаимодействие между ионом и водой, то настолько же изменится параметр Φ , насколько изменится объем электролита. Поэтому разность между Φ и V_{ac} равна объему K_{Aac} в см³, нарушившему закон Архимеда, вследствие изменений, происходящих со всеми анионами и катионами в одном литре электролита:

$$K_{Aac} = \Phi - V_{ac}. \quad (4)$$

Если параметр $K_{Aac} = 0$, то подъемная сила, действующая на ион согласно закону Архимеда, зависит только от объема иона и его плотности. Однако если $K_{Aac} \neq 0$, это показывает, что произошло взаимодействие между ионом и окружающей его водой и следует внести поправку, учитывающую изменения параметров иона. Поэтому K_{Aac} назван индикатором нарушения закона Архимеда. Численное значение его равно объему, нарушившему закон Архимеда, а знак показывает, увеличился или уменьшился объем электролита за счет взаимодействия ионов с водой. При исследовании воздействия только одного вида ионов индикатор нарушения закона Архимеда в общем виде обозначим K_{Ai} . В случае необходимости можно уточнить обозначения: для анионов K_{Aa} , а для катионов K_{Ac} .

Б. В. Дерягин рассматривает процесс адсорбции, происходящий между дисперсными частицами и водой. В этом случае дисперсная частица притягивает к себе несколько молекул воды, образуя новую более сложную частицу. Молекула воды, притянутая к дисперсной частице силами адсорбции, более плотно размещается на поверхности этой частицы и, следовательно, занимает меньший объем, чем в воде. В этом случае $K_{Aac} < 0$, а его значение соответствует числу см³, на которое уменьшается каждый литр раствора.

Далее, рассмотрим более сложный случай, когда дисперсной частицей является гидратированный ион, у которого за счет первичной гидратации образуется гидратная оболочка, уменьшающая объем электролита, и вокруг которого, вследствие вторичной гидратации, образуется буферная зона, увеличивающая объем электролита. Значение K_{Aac} в этом случае будет определяться разностью объемов,

вызванных уменьшением и увеличением объема электролита, и может быть как положительным, так и отрицательным. Важно отметить, что значение K_{Aac} позволяет отделить влияние первичной гидратации от вторичной и входит прямо или косвенно в расчет параметров модели электролита.

В дальнейшем, будем рассматривать только более простой случай чистого взаимодействия иона с водой, при отсутствии влияния соседних ионов - случай бесконечно разбавленного электролита, обозначая его индикатор через K_{Aac0} . Из Таблицы 1, где приведены значения K_{Aac0} для 16 электролитов, видно, что эти значения у некоторых электролитов положительны, а у других отрицательны. Этот факт заинтересовал ряд авторов, которые, учитывая, что $\Phi_o = \overline{V}_{2o}$, полагали это особенностью парциального объема и пытались найти аналитическую зависимость между парциальным объемом и радиусами ионов $\overline{V}_{2o} = f(r_i)$. Авторы этих работ [2], [3], [4], [5] и [6] считали, что парциальный объем равен разности двух членов $\overline{V}_{2o} = V_{INo} - \Delta V_{S0}$, где V_{INo} отражает объем самого иона в растворе, а ΔV_{S0} - уменьшение объема воды за счет электрострикции. Они получали совершенно разные зависимости $\overline{V}_{2o} = f(r_i)$, поскольку эти зависимости не отражали реального физического процесса, ибо электрострикция не может происходить в водной среде.

2. Физический процесс, нарушающий закон Архимеда в электролите

Для правильного использования индикатора нарушения закона Архимеда K_{Aac0} необходимо знать, какой физический процесс привел к этому нарушению. В рассматриваемом случае это процесс гидратации, которую принято разделять на первичную и вторичную.

Первичная гидратация охватывает изменения, происходящие с ионом в результате его ионно-дипольного взаимодействия с молекулами воды. За счет первичной гидратации h молекул воды присоединяются к иону, образуя гидратированный ион радиусом r_{ih} , перемещающийся как единое тело. Величину h обычно называют числом гидратации.

Вторичная гидратация отражает процессы, происходящие между гидратированным ионом и водной средой. При вторичной гидратации между ионом и водной средой образуется буферная зона объемом ΔV_{i+} , перемещающаяся вместе с ионом за счет его энергии. Буферная зона приводит к локальному уменьшению вязкости η_l , пропорциональному ее толщине b_{i2} .

Следовательно, в результате процесса гидратации вместо иона радиусом r_i образуется гидратированный ион с радиусом r_{ih} , окруженный буферной зоной, создающей локальное уменьшение вязкости $\eta_l = K_\eta b_{i2}$. Определим связь между индикатором нарушения закона Архимеда и параметрами гидратации отдельных ионов.

Индикатор нарушения закона Архимеда K_{Aac0} у одних электролитов имеет отрицательное значение, а у других положительное, хотя они подвергаются одному и тому же процессу гидратации. В действительности, у каждого электролита происходит

уменьшение объема за счет первичной гидратации K_{Aac0-} , и увеличение объема за счет вторичной гидратации K_{Aac0+} . Изменение объема электролита $K_{Aac0} = K_{Aac0+} - K_{Aac0-}$ и знак его зависит от того, какой из двух процессов превалирует.

Объем самой молекулы воды равен $v_w = 11.25 \text{ \AA}^3$ [7]. Однако объем, занимаемый ею в воде v_{25} при $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, равен:

$$v_{25} = \frac{M_w}{d_{w25} N_A} = 30.00 \text{ \AA}^3,$$

где M_w - молярная масса молекулы воды.

Следовательно, молекула в воде занимает объем, почти в три раза больший, чем ее собственный объем. Поэтому, можно утверждать, что уменьшение объема электролита, вызванное гидратацией K_{Aac0-} , происходит за счет того, что молекула воды при переходе в гидратную оболочку может более плотно «упаковываться», т. е. занимать меньший объем, чем $30,00 \text{ \AA}^3$. Для учета уменьшения объёма электролита можно использовать понятие коэффициента упаковки, равного отношению объема молекулы воды v_w к объему v_p , который она занимает в рассматриваемой упаковке: $K_{pw} = v_w/v_p$. Если коэффициент упаковки молекулы воды обозначить через K_{ph} , то объем молекулы воды в гидратной оболочке будет $v_h = 11.25/K_{ph}$.

Уменьшение объема электролита за счет присоединения h_i молекул воды к одному иону равно в \AA^3 :

$$\Delta v_{i-} = (30.00 - 11.25/K_{ph})h_i,$$

а к одному молю ионов в $\text{ см}^3/\text{моль}$

$$\Delta V_{i-} = N_A \Delta v_{i-} = (18.07 - 6.77/K_{ph})h_i.$$

Следовательно, увеличение объёма электролита за счет одного моля ионов в $\text{ см}^3/\text{моль}$:

$$\Delta V_{i+} = K_{Aio} + \Delta V_{i-}.$$

Радиус гидратированного иона в \AA :

$$r_{ih} = \sqrt[3]{r_i^3 + \frac{3}{4\pi} \frac{11.25h_i}{K_{ph}}} = \sqrt[3]{r_i^3 + 2.686h_i/K_{ph}},$$

а толщина буферного слоя в \AA

$$b_{i2} = \sqrt[3]{r_{ih}^3 + \frac{3}{4\pi} \Delta V_{i+} - r_{ih}^3} = \sqrt[3]{r_{ih}^3 + 0.238\Delta V_{i+} - r_{ih}^3}.$$

Приведённые формулы показывают, что величина K_{Aio} не только сигнализирует о нарушении закона Архимеда, но помогает определить изменения, произошедшие с ионом и в около-ионном пространстве. Для использования приведенных выше формул необходимо знать число гидратации h_i и коэффициент упаковки молекул воды в гидратной оболочке K_{ph} .

При присоединении молекулы воды к иону затрачивается определенная энергия. Поэтому можно утверждать, что число гидратации h_i зависит от энергии самого иона U_i , равной согласно Борну [8]:

$$U_i = \frac{z^2 e^2}{2 r_i} \left(1 - \frac{1}{\epsilon_w}\right),$$

где z - зарядное число, e - заряд электрона, ϵ_w - диэлектрическая проницаемость воды.

Энергия иона определяется энергией созданного им электрического поля. Следовательно, энергия, затраченная ионом на формирование гидратной оболочки, т. е. на первичную зону гидратации, равна энергии поля, заключённого между радиусами r_i и r_{ih} :

$$U_i = \frac{z^2 e^2}{2} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{ih}} \right) \left(1 - \frac{1}{\epsilon_\infty} \right).$$

Молекулы воды в гидратной оболочке удерживаются в определенном положении силами, превосходящими силу внешнего электрического поля, поэтому в гидратной оболочке отсутствует ориентационная поляризация и, следовательно, $\epsilon_w = \epsilon_\infty$. Остальная энергия иона может расходоваться на вторичную гидратацию.

Молекулы воды при переходе в гидратную оболочку добавляют к полю иона свое электрическое поле. Каждая молекула воды из гидратной оболочки увеличивает энергию поля в промежутке между r_i и r_{ih} на величину U_h . Это увеличение энергии, в свою очередь, увеличивает число гидратации h_i . Поэтому энергия, затраченная на формирование гидратной оболочки, равна

$$U_{ih} = U_i + U_h h_i = \frac{z^2 e^2}{2} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{ih}} + \frac{2U_h h_i}{z^2 e^2} \right) \left(1 - \frac{1}{\epsilon_\infty} \right).$$

Энергия молекулы воды в вакууме, при отсутствии внешнего поля, определяется ее дипольным моментом μ и ее радиусом r_w : $U_{h0} = \mu^2 / 18r_w^3$. Поскольку $\mu = 1.84 \cdot 10^{-12}$ СГС, а $r_w = 1.34 \text{ \AA}$, то $U_{h0} = 0.07 \cdot 10^{-12}$ эрг или $2U_h / z^2 e^2 = 0.6 \%$. Однако, когда дипольная молекула попадает в электрическое поле, ее энергия возрастает по мере ее приближения к иону. Но молекула воды всегда смещена относительно иона и поэтому ее энергия всегда меньше величины, которую она имела бы, если бы центры поля иона и молекулы могли совпасть. При этом $U_{hmax} < ze\mu / 16r_w^2$, что соответствует $U_{hmax} < 0,286 \cdot 10^{-12}$ эрг или $2U_h / z^2 e^2 < 2.4 \%$.

В рассматриваемом случае молекула воды находится рядом с ионом. Определить значение U_h для этого случая сложно, но можно воспользоваться приближенной формулой:

$$U_h = \frac{ze\mu}{16r_w(r_i + r_w)}.$$

Учитывая, что эта формула приближенная, радиусы ионов не так сильно отличаются друг от друга и основная энергия формирования гидратной оболочки затрачивается ионом, полагаем, что для всех ионов, у которых гидратная оболочка укладывается, в один ряд можно использовать одно и тоже значение $2U_h / z^2 e^2 = 1.4 \%$. Это сильно упрощает расчёты и не должно вносить большой погрешности:

$$U_{ih} = \frac{z^2 e^2}{2} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r_{ih}} + 0.014h_i \right) \left(1 - \frac{1}{\epsilon_\infty} \right).$$

Число гидратации h_i должно быть пропорционально энергии U_{ih} . Величину h_i можно определить решением уравнения

$$h_i = H_i \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{\sqrt[3]{r_i^3 + 2.686h_i/K_{ph}}} + 0.014h_i \right),$$

где H_i -постоянный коэффициент для каждого типа иона.

Следует так же учесть, что диполь в молекуле воды расположен несимметрично. Положительный заряд атома водорода H^+ расположен ближе к поверхности молекулы, чем отрицательный заряд атома кислорода O^- . Поэтому при одинаковых радиусах ионов к аниону будет притягиваться больше молекул воды, чем к катиону. Этот факт можно

учесть разными значениями коэффициента H_i , т.е. неравенством $H_a > H_c$. Расчеты показали, что если для катионов $H_c = 10,57$, а для анионов $H_a = 13,85$, это компенсируют указанную несимметричность. Для определения числа гидратации катионов следует решить уравнение:

$$h_c = 10.57 \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{\sqrt[3]{r_i^3 + 2.686h_c/K_{ph}}} + 0.014h_c \right).$$

В уравнении для анионов следует учесть, что энергия молекул воды в гидратных оболочках катионов и анионов одна и та же:

$$h_a =$$

$$13.85 \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{\sqrt[3]{r_i^3 + 2.686h_a/K_{ph}}} + 0.014h_a \cdot 10.57/13.85 \right).$$

Все остальные, приведенные выше формулы параметров гидратации относятся в равной степени к анионам и катионам.

Из приведенных данных можно заключить, что индикатор нарушения закона Архимеда K_{Aio} не только сигнализирует о нарушении этого закона, но и участвует в определении изменений параметров электролита в результате такого нарушения.

3. Модель электролита

Вследствие гидратации происходят значительные изменения как с самим ионом (за счет первичной гидратации), так и со средой в непосредственной близости от иона (за счет вторичной гидратации). Модель электролита должна учитывать эти изменения. Параметром модели, отражающим первичную гидратацию, может быть радиус гидратированного иона r_{ih} , а параметром, отражающим вторичную гидратацию, - толщина буферного слоя b_{i2} , благодаря которой появляется локальное снижение вязкости $\mu_l = K_\mu b_{i2}$, где K_μ - постоянный коэффициент для всех ионов.

В Таблице 2 приведены значения параметров модели r_{ih0} и b_{i20} для одновалентных ионов при бесконечном разбавлении. Расчет проводился при $K_{ph} = 0,526$. Величина K_{ph} определялась из условия, что молекулы воды размещаются в одном слое, даже для иона натрия, что соответствует приведенным формулам. Покажем, что с помощью этих двух параметров можно определять эквивалентную электропроводность и коэффициент диффузии.

В учебниках по электрохимии приводится теоретическая формула Стокса для определения эквивалентной электропроводности

$$\lambda_{io} = \frac{10^7 |z| F^2}{6\pi\mu_w r_i},$$

где F - число Фарадея, μ_w - вязкость воды, r_i - радиус иона.

При $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$, $\mu_w = 0.894$ сП, если r_i выражается в \AA , тогда λ_{io} равно:

$$\lambda_{io} = \frac{97.10}{r_i} \text{ ом}^{-1} \text{ моль}^{-1} \text{ см}^2.$$

Однако, эта формула непригодна для определения λ_{io} . Действительно, согласно этой формуле $\lambda_{io,cal}(Na) = 96,5$, в то время как $\lambda_{io,ex}(Na) = 50,1$, а $\lambda_{io,cal}(J) = 42,5$, хотя $\lambda_{io,ex}(J) = 76,9$. Из приведенных примеров видно, что не только погрешность расчета

достигает почти 200 %, но и влияние радиуса иона на λ_{io} противоположно экспериментальному.

Параметры модели позволяют объяснить это противоречие: действительно под действием внешнего электрического поля перемещается не одинокий ион, а гидратированный ион радиусом r_{ih} , а в результате вторичной гидратации возникает локальное уменьшение вязкости $\mu_l = K_\mu b_{i2}$. С учетом сказанного при $K_\mu = 1.298$ формула Стокса для иона будет:

$$\lambda_{io} = \frac{97,10}{r_{ih}K_\mu b_{i2}} = \frac{70,65}{r_{ih}b_{i2}},$$

а для электролита:

$$\lambda_{aco} = \frac{70,65}{r_{ah}b_{az}} + \frac{70,65}{r_{ch}b_{cz}}.$$

В Таблице 3 расчетные значения эквивалентной электропроводности одновалентных ионов λ_{iocal} сравниваются с экспериментальными λ_{ioex} . Из данных Таблицы 3 следует, что точность расчета, можно характеризовать среднеквадратичной погрешностью $\sigma = 1,3 \%$ и максимальной $\varepsilon_{max} = 4.0 \%$, что можно считать хорошим результатом. Если посчитать эквивалентную электропроводность всех 16 электролитов этих ионов, то точность расчетов будет несколько выше: $\sigma = 1,3 \%$, а $\varepsilon_{max} = 2.3 \%$.

Те же параметры модели позволяют определить и коэффициент диффузии при бесконечном разбавлении D_{io} . Нернст [9] определил связь между эквивалентной электропроводностью ионов λ_{io} и значением их коэффициента диффузии D_{io} в $\text{см}^2/\text{с}$:

$$D_{io} = \frac{RT}{F^2} \lambda_{io} = 1.863 \cdot 10^{-7} \lambda_{io},$$

где R - универсальная газовая постоянная, T - абсолютная температура.

Подставляя значения постоянных R и F при $t = 25 \text{ }^\circ\text{C}$ с учетом значения λ_{io} , получим:

$$D_{io} = 1.863 \cdot 10^{-5} / r_{ih} b_{i2}.$$

Погрешности расчета D_{io} должны быть такими же, как погрешности λ_{io} , приведенные в Таблице 3. За счет того, что при диффузии анионы и катионы двигаются в одну и ту же сторону с одинаковой скоростью, значение коэффициента диффузии электролита D_{aco} согласно [9] будет:

$$D_{aco} = \frac{RT}{F^2} \frac{|z_a|+|z_c|}{|z_a||z_c|} \frac{\lambda_{ao}+\lambda_{co}}{\lambda_{ao}\lambda_{co}} = \frac{2D_{ao}D_{co}}{D_{ao}+D_{co}}.$$

Результаты сравнения экспериментальных значений D_{acoex} с расчетными D_{acocal} приведены в Таблице 4, из которой следует, что точность расчета D_{aco} можно оценить : $\sigma = 1,8 \%$, а $\varepsilon_{max} = 2.6 \%$.

Из выше сказанного следует, что использование индикатора погрешности закона Архимеда K_{Aaco} позволило не только определить, как изменился сам ион и около-ионное пространство, но и выделить два параметра, характеризующие эти изменения. По ним

можно определять эквивалентную электропроводность λ и коэффициент диффузии D при бесконечном разбавлении.

Заключение

Закон Архимеда нарушается при наличии взаимодействия между дисперсными частицами и жидкой средой. Поэтому мы предположили, что в первую очередь необходимо найти параметр, но и только сигнализирующий наличие нарушения, не указывающий величину требуемой поправки. В качестве рассматриваемой среды выбран водный электролит с одновалентными ионами при бесконечном разбавлении. Такой выбор среды исследования объясняется не только тем, что в этом случае рассматривается влияние одиночных ионов на водную среду, а так же и тем, что, как нам известно, нарушение закона Архимеда вызвано процессом гидратации. Предложен универсальный параметр, названный индикатором нарушения закона Архимеда K_{Aaco} . Величина этого индикатора равна числу см^3 , нарушающей закон Архимеда в каждом литре раствора. В принципе известны изменения, происходящие с ионом в около-ионном пространстве. Показано, что первичная гидратация характеризуется радиусом гидратированного иона r_{ih} , а вторичная - толщиной буферной зоны b_{i2} , окружающей ион и приводящей к снижению локальной вязкости $\mu_l = K_\mu b_{i2}$. С помощью эти двух параметров можно рассчитать эквивалентную электропроводность и коэффициент диффузии как самих одновалентных ионов λ_{io} и D_{io} , так и те же характеристики электролитов из этих ионов λ_{aco} и D_{aco} . Полученные расчетные значения характеристик соответствуют известным экспериментальным. Следует отметить, что впервые предлагается формула, базирующаяся на теоретической формуле Стокса, позволяющая определять λ_{io} и λ_{aco} , тогда как даже общепризнанная теория Дебая-Гюккеля вынуждена использовать для расчета λ_{ac} в качестве исходного экспериментальное значение λ_{ioex} .

В статье приводятся только значения индикатора нарушения закона Архимеда при бесконечном разбавлении K_{Aaco} , но по приведенным в статье формулам легко определить, как изменяются K_{Aac} и параметры модели при различных концентрациях.

Таблица 1 Значение индикатора нарушения закона Архимеда K_{Aaco} в $\text{см}^3/\text{моль}$ для одновалентных солей при бесконечном разбавлении и значения радиусов ионов r_i в Å , участвующих в расчетах.

Катионы		Na^+	K^+	Rb^+	Cs^+
r_i		0.95	1.37	1.52	1.67
Анионы	r_a	Индикатор K_{Aaco}			
F^-	1.33	-10.22	-4.31	-1.70	2.93

Cl^-	1.81	-0.09	5.82	8.43	12.88
Br^-	1.96	2.67	8.58	11.19	15.64
J^-	2.16	7.61	13.55	16.33	20.58

Таблица 2 Величина параметров модели электролитов: радиуса гидратированного иона r_{ih} и толщины буферной зоны b_{i2} , в Å.

Ион	Na^+	K^+	Rb^+	Cs^+	F^-	Cl^-	Br^-	J^-
r_{ih}	3.69	3.03	2.84	2.66	3.44	2.81	2.64	2.43
b_{i2}	0.382	0.321	0.315	0.341	0.360	0.343	0.343	0.366

Таблица 3 Сравнение расчетных значений эквивалентной электропроводности ионов λ_{iocal} с экспериментальными λ_{ioex} и определение погрешности расчета ε в %. Величина эквивалентной электропроводности в $ом^{-1}моль^{-1}см^2$.

Ион	Na^+	K^+	Rb^+	Cs^+	F^-	Cl^-	Br^-	J^-
λ_{iocal}	50.15	72.77	78.84	77.86	57.04	73.35	77.96	79.39
λ_{ioex}	50.1	73.5	77.8	77.2	55.4	76.4	78.1	76.9
ε	0.1	-1.0	1.5	1.6	3.0	-4.0	-0.2	0.2

Таблица 4 Сравнение экспериментальных значений коэффициента диффузии одновалентных электролитов D_{acoex} с расчетными D_{acocal} и определение погрешности расчета ε в %. Величина коэффициента диффузии в $см^2/с \cdot 10^5$.

Соль	NaF	$NaCl$	$NaBr$	NaJ	KF	KCl	KBr	KJ
D_{acoex}	1.401	1.611	1.625	1.615	1.682	1.995	2.016	2.001
D_{acocal}	1.421	1.646	1.653	1.648	1.646	1.944	2.004	2.021
ε	1.4	2.2	1.7	2.0	-2.1	-2.5	-0.60	1.00
Соль	RbF	$RbCl$	$RbBr$	RbJ	CsF	$CsCl$	$CsBr$	CsJ
D_{acoex}	1.723	2.052	2.075	2.059	1.717	2.044	2.067	2.051
D_{acocal}	1.763	2.024	2.088	2.107	1.753	2.011	2.078	2.093
ε	2.3	-1.4	0.9	2.3	2.1	-1.6	0.5	2.1

Библиографический список

1. Дерягин Б. В. // Коллоид. Жур. 1994, №56, стр. 45-46.
2. Hepler L. G. J. // Phys. Chem. 1957, №61, p.1426-1429.
3. Mukerjee H. // Phys. Chem. 1961, №65, p. 740-744
4. Padova J. //J. Chem. Phys. 1963, №39, p.1552-1557.
5. Noyes R. M. //J. Amer. Chem. Soc. 1964, №86, p. 971-979.
6. Glueckauf E. //Trans. Faraday Soc. 1965, №61, p. 914-921 .
7. Bernal J. D., Fowler R. H. // J. Chem. Phys. 1933, №1, p.515-548.
8. Born M. //Z. Phys. 1920, №1, p.45-48.
9. Nernst W. // Z. Phys. Chem. 1888, №2, p.613-637.

THE INDICATOR OF AMENDMENT OF ARCHIMEDES' PRINCIPLE AS THE KEY TO THE RESEARCH OF DISPERSE SYSTEMS

Yu. Klugman

In disperse systems, as it was shown by B.V. Derygin, the process of interaction of disperse particles with fluid medium is accompanied by the amendment of Archimedes' principle. In order to simplify the study of the interaction of disperse particles with fluid medium we propose the parameter showing not only the amendment of Archimedes' principle, but giving also the quantitative evaluation of this amendment.

О МАГНЕТИЗМЕ ВРАЩАЮЩИХСЯ ТЕЛ

М.В. Давидович

Саратовский государственный университет

Давидович Михаил Владимирович, д.ф.-м.н., профессор кафедры радиотехники и электродинамики

Рассмотрен механизм разделения зарядов во вращающемся теле за счет силы Лоренца и связанные с ним магнитный момент и магнитное поле.

Введение

Если заряженное тело вращается вокруг какой-либо своей оси, оно приобретает магнитный момент (ММ) и магнитное поле (МП). Они существуют как в неподвижной лабораторной системе отсчета (ЛСО), так и в неинерциальной вращающейся системе отсчета (ВСО). Однако магнетизм в той или иной мере присущ и незаряженным вращающимся телам. Для этого заряды должны быть разделены, а тело в целом представлять собой электрический диполь или совокупность электрических мультиполей. Это приводит к появлению в теле внутреннего электрического поля и связанной с ним электродвижущей силы (ЭДС). МП тела зависит от его структуры и природы его вещества. Наиболее хорошо разделяются свободные (подвижные) заряды в плазме а также в расплавленном и жидком веществе, содержащем ионы. Однако возможен механизм разделения зарядов (поляризации вещества), когда тело или его часть состоят из полярных или даже неполярных молекул. Внутреннее электрическое поле поляризует вещество, создавая магнитное поле, которое в свою очередь поддерживает это внутреннее поле (ЭДС). В работе рассмотрен один из механизмов разделения зарядов во вращающемся теле, вызванный силой Лоренца и аналогичный эффекту Холла и возникновению ЭДС Холла.

Экспериментально доказано возникновение магнитного момента (ММ) и поля у вращающегося резервуара с расплавленным металлом (эксперименты выполнялись в Институте Физики АН Латвии в Саласпилсе в 1999 г. и в ФРГ, Карлсруэ в 1999 г.). Это может быть объяснено на основе эффекта Барнетта [1–3]. Гиромангнитные эффекты Барнетта и Эйнштейна-де-Хааза связаны с наличием у атома магнитного момента и в основном проявляются у ферромагнетиков [1]. Пусть плотность вещества ρ_m постоянна, а J_z – момент инерции равный (в ЛСО) $J_z = 4\pi\rho_m R^5/5 = (3/5)mR^2$. Из термодинамического соотношения между свободной энергией вращающегося при постоянной температуре и объеме тела и его моментом количества движения L_z следует связь последнего с магнитным моментом тела $M_z = L_z g e / (2m_e) = J_z \omega g e / (2m_e)$ [1]. Здесь L_z – момент количества движения, g – фактор Ланде. Связанное с M_z магнитное поле имеет вид $H_0 = (\mu_0 g)^{-1} (2m/e)\omega$. В работе Барнетта [2] для него получено $H = B_z / \mu_0 = (\mu_0 g)^{-1} (2m_e/e)\omega [1 + \cos(\theta)\omega / (2\Omega)]$. МП пропорционально ω и гиромангнитному отношению. Имеется также весьма малый член, пропорциональный отношению круговой частоты к атомным частотам Ω . Между тем все вращающиеся небесные тела имеют в той или иной степени магнитное поле. Сильное магнитное поле есть у Солнца, состоящего в основном из водорода и гелия, т.е. не обладающего ферромагнетизмом. Хотя

ядро Земли и состоит в основном из железа, в нагретом виде ферромагнетизм не проявляется. Если тело заряжено, то его магнитный момент и поле определяются весьма просто: вращающийся заряд Q создает круговой ток $I = \omega Q / (2\pi)$, которому соответствует магнитный момент $M = \pi r^2 I$. Такой магнитный момент пропорционален ω . Здесь r – расстояние до оси вращения, а заряд считаем точечным. Если имеем плотность заряда ρ , то ей соответствует плотность тока $j = \omega r \rho$, для которой находим магнитный момент интегрированием по объему тела. Он опять пропорционален ω . Если предположить, как будет показано далее, что разделение зарядов пропорционально ω , результирующий ММ будет пропорционален ω^2 . Однако если тело незаряженное, необходим механизм разделения зарядов, приводящий к электрическому дипольному и высшим мультипольным моментам тела. Для простоты удобно использовать только дипольный момент. Обычно существование магнитных полей связывают с магнито-гидродинамическим динамо (МГД). В настоящее время это доминирующая теория существования магнитных полей астрофизических тел [4–7]. Обычно рассматривают МГД спирального типа (типа динамо Пономаренко). Тем не менее, такие теории встречают трудности. Поэтому рассматривались альтернативные теории, обзор которых можно найти в [8]. Имеется ряд ранних работ, в которых предложены теории, основанные на генерации магнитного поля за счет вращения [9]. В данной работе рассмотрены механизмы, связанные с силой Лоренца. Вращающаяся система отсчета (ВСО) является неинерционной, поля в которой рассмотрены в монографии [10]. В нашем случае малой частоты вращения мы рассматриваем поля во ВСО и инерциальной ЛСО приблизительно совпадают, если не учитывать азимутальные компоненты. Их мы не рассматриваем, считая поля азимутально симметричными. Строгая ковариантная теория весьма сложна. Наиболее интересными с точки зрения приложений являются тела в виде шара, цилиндра и диска. В данной работе рассмотрен структурированный шар, содержащий сферические слои.

1. Электрические и магнитные поля вращающегося шара

Вращение тел с постоянной угловой скоростью (частотой) $d\varphi/dt = \varphi = \omega$ приводит к возникновению магнитного поля. Если вращается заряженное относительно инерциальной ЛСО, связанной с неподвижной для тела неинерциальной ВСО так, что их оси z совпадают, то в ИСО возникает плотность тока $\mathbf{J} = \rho \mathbf{r} = \varphi_0 \omega r \rho$ и плотность магнитного момента

$$d\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{J} dV = \mathbf{r}_0 \times \varphi_0 \omega r^2 \sin(\theta) dV = \mathbf{z}_0 \omega r^2 \sin(\theta) dV$$

. Здесь $\rho = \rho(r, \theta, \varphi)$ – плотность заряда, а нулевым

ДИСКУССИЯ

индексом обозначены орт-векторы. Можно рассматривать как заряженные тела с полным объемным зарядом

$$Q' = \int_V \rho(r, \theta, \varphi) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi, \quad (1)$$

так и незаряженные тела с $Q=0$. Кроме объемного заряда у тела, вообще говоря, может быть поверхностный заряд Q'' с плотностью σ . Далее для простоты будем рассматривать простейшие сферически симметричные модели: $\rho = \rho(r)$. Для определения механических свойств тела следует ввести плотность тела ρ_m , его массу

$$m = \int_V \rho_m(r, \theta, \varphi) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi, \quad (2)$$

момент инерции относительно оси z

$$J_z = \int_V \rho_m(r, \theta, \varphi) r^4 \sin^3(\theta) dr d\theta d\varphi \quad (3)$$

механический момент

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \int_V \rho_m(r, \theta, \varphi) (\mathbf{r} \times \dot{\mathbf{r}}) r^2 \sin^3(\theta) dr d\theta d\varphi = \\ &= \mathbf{z}_0 \omega \int_V \rho_m(r, \theta, \varphi) r^4 \sin^3(\theta) dr d\theta d\varphi = \mathbf{z}_0 \omega J_z \quad (4) \end{aligned}$$

Для незаряженного сферически симметричного тела со сферически симметричной плотностью заряда интегрирование по углам выполняется элементарно и дает полный телесный угол 4π . Поэтому для тела радиуса R все интегралы сводятся к одномерному интегралу по радиусу в пределах $0 < r < R$. Для заряженного шара с постоянной плотностью заряда и плотностью вещества $m = \rho_m V = \rho_m 4\pi R^3/3$, $J_z = (2/5)mR^2$, а для электростатического потенциала в ЛСО имеем [11]

$$\Phi(r) = \frac{\rho r}{6\varepsilon_0 \varepsilon} (R^2 - r^2) + \frac{Q'}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon R}. \quad (5)$$

Считаем $\omega R \ll c$, поэтому решения уравнений Пуассона и непрерывности будем проводить в ВСО, а поля рассматривать в ЛСО, пренебрегая преобразованиями уравнений, потенциалов, диэлектрических и магнитных проницаемостей. При малых скоростях на поверхности по отношению к скорости света это приводит к малым погрешностям. Потенциал (5) определен внутри шара, при этом считается, что вещество шара имеет диэлектрическую проницаемость (ДП) ε . В (5) входит заряд Q' , определяемый как интеграл (1). Если шар находится в среде с ДП ε , то потенциал вне шара равен $\Phi(r) = Q'/(4\pi \varepsilon_0 \varepsilon r)$. Однако если шар находится в вакууме, то на его поверхности возникает связанная плотность заряда $\sigma = Q''/(4\pi R^2)$. Полный заряд шара $Q = Q' + Q''$ определяет непрерывный потенциал вне его: $\Phi(r) = Q/(4\pi \varepsilon_0 r)$. Внутри шара имеем электрическое поле $E_r(r) = \rho r / (3\varepsilon_0 \varepsilon)$. Поскольку должно быть $\varepsilon E_r(R-0) = E_r(R+0)$, то $Q' = Q/\varepsilon$, $Q'' = Q(1-1/\varepsilon)$, а внешнее поле шара имеет вид $E_r(r) = Q/(4\pi \varepsilon_0 r^2)$. Таким образом, при

большой ДП практически весь заряд шара сосредоточен на его поверхности.

Рассмотрим указанную задачу при разных простых законах изменения $\rho(r) = \rho_0 (r/R)^n$, заданных в ВСО. Здесь $\rho_0 = \rho(R)$. Электрическое поле удовлетворяет уравнению непрерывности $\nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = \rho(r)/\varepsilon_0$, которое в сферически симметричном случае имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \varepsilon(r) E_r(r)) = \rho(r)/\varepsilon_0. \quad (6)$$

Вместо (6) можно решать эквивалентное уравнение для потенциала $\nabla \cdot \varepsilon \nabla \Phi(r) = -\rho/\varepsilon_0$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \varepsilon(r) \frac{\partial}{\partial r} \Phi(r) \right) = -\rho(r)/\varepsilon_0. \quad (7)$$

В общем случае $\varepsilon(r)$ – некая функция радиуса.

Если она константа, то имеем решения

$$\begin{aligned} E_r(r) &= E_r(R) (r/R)^{n+1}, \\ \Phi(r) &= \Phi(R) (r/R)^{n+2}, \end{aligned} \quad (8)$$

при этом

$$\begin{aligned} E_r(R) &= \rho_0 / [(n+1)\varepsilon_0 \varepsilon], \\ \Phi(R) &= -\rho_0 / [(n+2)(n+1)\varepsilon_0 \varepsilon]. \end{aligned} \quad (9)$$

Эти решения справедливы при $n \neq -1$, $n \neq -2$ и $n \neq -3$. В первых двух случаях в знаменателях (9) возникают нули, и формулы (8), (9) следует рассматривать при конкретных таких значениях n . Если $n = -1$, то формулы (8) формально работают, но при этом $E_r(r) = C_1$, $\Phi(r) = -C_1 r + C_2$, $C_1 = \rho_0 / [2\varepsilon_0 \varepsilon]$. При задании величины потенциала на поверхности $\Phi(R) = -C_1 R + C_2$ имеем $\Phi(r) = \Phi(R) + C_1 (R - r)$. Если $n = -2$, то первая формула (8) также работает: $E_r(r) = E_r(R) (R/r)$, при этом вторая приобретает вид $\Phi(r) = \Phi(R) + R E_r(R) \ln(r/R)$. В этом случае $E_r(R) = \rho_0 / (\varepsilon_0 \varepsilon R)$. Поскольку функция $\Phi(r) = C_0 / r$ и константа удовлетворяют однородному уравнению (7), любое решение неоднородного уравнения определено с точностью до такой функции и константы. Постоянную C_0 следует подбирать так, чтобы удовлетворить граничному условию, например, при $r = R$. Этой функции соответствует электрическое поле $E_r(r) = -C_0 / r^2$, которое также следует добавлять, если только из граничных условий не следует $C_0 = 0$. Второе решение уравнения Лапласа в виде константы также можно использовать при наложении граничных условий. Если $n = -3$, то формулы (8) соответствуют решениям однородных уравнений с решениями уравнения Пуассона

$$E_r(r) = E_r(R)(R/r)^2 + \rho_0 \ln(r/R)/(\varepsilon_0 \varepsilon r^2), \quad (10)$$

$$\Phi(r) = \Phi(R)(R/r) + \rho_0 / (\varepsilon_0 \varepsilon R) [\ln(r/R) + 1] - \rho_0 / (\varepsilon_0 \varepsilon R) / R. \quad (11)$$

Здесь $\Phi(R) = E_r(R)R$. В принципе, формулы (8), (9) можно применять для нецелых n . Если тело граничит с вакуумом, то из-за скачка $E_r(R)$ на его границе возникает поверхностная плотность связанного заряда, $\sigma = \varepsilon_0(\varepsilon - 1)E_r(R)$ и соответствующий ей заряд $Q'' = 4\pi R^2 \sigma$. Наличие большого поверхностного заряда при большом радиусе R дает максимальный вклад в магнитный момент тела:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}'' &= \mathbf{z}_0 \omega R \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \sin^2(\theta) d\theta d\varphi = \\ &= \mathbf{z}_0 4\pi \omega R^4 \sigma = \mathbf{z}_0 \omega Q'' R^2 / 4. \end{aligned} \quad (12)$$

Вклад в магнитный момент от объемного заряда равен

$$\begin{aligned} \mathbf{M}' &= \mathbf{z}_0 \omega \rho_0 \int_0^R \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} (r/R)^n r^4 \sin^2(\theta) dr d\theta d\varphi = \\ &= \mathbf{z}_0 \frac{\pi \omega \rho_0 R^5}{n+5} = \mathbf{z}_0 \omega Q' R^2 \frac{n+3}{4(n+5)} \end{aligned} \quad (13)$$

поскольку $Q' = 4\pi R^3 \rho_0 / (n+3)$. Эти формулы неприменимы при $n = -3$ и $n = -5$. При $n = -3$ имеем неопределенность в определении заряда: $Q' = 4\pi R^3 \rho_0 \ln(r/C')$. Точнее говоря, интеграл расходится, и заряд бесконечный, если его плотность не ограничена в нуле. Поэтому следует брать $n > -3$. Однако если есть область радиуса R_0 , в которой заряд отсутствует, то $Q' = 4\pi R^3 \rho_0 \ln(R/R_0)$. При $R/R_0 \gg 1$ объемный заряд и момент может быть большим. В этом случае момент $M'_z = 4\pi \omega \rho_0 (R^5 - R_0^5) / (n+5)$ также большой. В случае $n = -5$ имеем $M'_z = 4\pi \omega \rho_0 R^5 \ln(R/R_0)$.

2. Электрические и магнитные поля слоистого вращающегося шара

Для увеличения магнитного момента можно рассматривать неоднородное тело, внутри которого нет области с объемным зарядом. Пусть в теле имеется шаровая хорошо проводящая область $r < R_0$ (ядро). Ее потенциал постоянен, внутри объемного заряда нет, а на поверхности есть поверхностный заряд с положительной плотностью $\sigma_0 = 3Q_0 / 4\pi R_0^3$. Здесь Q_0 – заряд ядра, который для удобства считаем положительным. Пусть внешняя оболочка шара при $r = R$ также является хорошо проводящей, а область $R_0 < r < R$ занята диэлектриком и заряжена по закону

$\rho(r) = \rho_0 (r/R)^n$. В случае $\rho_0 = 0$ тело представляет собой сферический конденсатор с емкостью $C = 4\pi \varepsilon_0 \varepsilon R_0 R / (R - R_0)$. Поле при $r < R_0$ и при $r > R$ отсутствует, а внутри при $R_0 < r < R$ определяется потенциалом

$$\Phi(r) = \frac{\Phi(R_0)}{r} \frac{R_0 R}{R - R_0} - \frac{R_0 \Phi(R_0)}{R - R_0}. \quad (14)$$

При таком его определении он отсчитывается от внешней сферы: $\Phi(R) = 0$, при этом $\Phi(R_0) > 0$. Напряженность поля имеет вид $E_r(r) = \Phi(R_0) R_0 R / [r^2 (R - R_0)]$. Потенциал (14) удовлетворяет уравнению Лапласа. Для поверхностных плотностей заряда пишем $\sigma_+ = -\varepsilon_0 \varepsilon \Phi(R_0) R_0 / [R(R - R_0)]$, $\sigma_- = \varepsilon_0 \varepsilon \Phi(R_0) R / [R_0(R - R_0)]$. Полные заряды на поверхностях равны по модулю и противоположны: $Q_- = Q_0 = -Q_+ = 4\pi \varepsilon_0 \varepsilon \Phi(R_0) R_0 R / [R - R_0]$. (15)

Такое тело не обладает полным зарядом и внешним полем, но имеет магнитный момент $M''_z = -\omega Q_0 (R^2 - R_0^2)$, обусловленный только противоположными поверхностными зарядами. Его можно рассматривать как вращающийся сферически симметричный диполь. В случае наличия объемного заряда потенциал должен удовлетворять уравнению Пуассона, имеющему решения типа (8), (9). К этим решениям можно добавить решение уравнения Лапласа вида $\Phi''(r) = C_1/r + C_2$. Константы интегрирования следует выбирать из граничных условий на сферических поверхностях, записывая потенциал в виде $\Phi(r) = \Phi'(r) + \Phi''(r)$, где первый член определяется второй формулой (8). При этом следует учесть изменение формул в случаях $n = -1, -2, -3$. В случае объемного заряда необходимо учитывать его магнитный дипольный момент.

Рассмотрим пример слоистого шара, в котором может быть несколько хорошо проводящих областей, ограниченных поверхностями $r = R_l$, и областей с плохой проводимостью, которые можно описать постоянными диэлектрическими проницаемостями ε_k . Потенциалы сферических слоев считаем постоянными. Общее решение задачи легко находится на основе формул (8), (9) внутри диэлектрических слоев с добавлением функций $\Phi''_k(r) = C_{1k}/r + C_{2k}$ и наложением граничных условий на поверхности сфер. При этом определяем объемные и поверхностные заряды, а также их магнитные моменты. Простейшая такая модель – наличие дополнительно к ядру хорошо проводящего слоя $R_1 < r < R$. В этом случае поверхностные заряды находятся на границах $r = R_0$ и $r = R_1$.

3. Электрические и магнитные поля неоднородного вращающегося шара

Неоднородным считаем шар, ДП которого зависит от координат, т.е. является неоднородной их функцией. При этом шар также может быть неоднородно заряжен. Предполагая азимутальную симметричность, т.е. считая $\varepsilon = \varepsilon(r, \theta)$,

$\rho = \rho(r, \theta)$, мы должны решить уравнение непрерывности, которое в ВСО приобретает вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \varepsilon(r, \theta) E_r(r, \theta)) + \frac{1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin(\theta) \varepsilon(r, \theta) E_\theta(r, \theta)) = \rho(r, \theta) / \varepsilon_0. \quad (16)$$

Простейший случай сферической симметрии сводится к уравнению (6). Неоднородность приводит к возникновению объемного связанного заряда $\rho_c = -\nabla \cdot \mathbf{P} = -\varepsilon_0 \nabla \cdot ((\varepsilon - 1)\mathbf{E}) = \varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} - \rho$. С другой стороны, записывая

$$\varepsilon_0 \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = \rho = \varepsilon_0 \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{E} + \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \nabla \varepsilon, \text{ имеем}$$

$$\tilde{\rho} = \rho + \rho_c = (\rho - \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \nabla \varepsilon) / \varepsilon. \quad (17)$$

В случае отсутствия свободного заряда связанный определяется как $\rho_c = -\varepsilon_0 \varepsilon^{-1} \mathbf{E} \cdot \nabla \varepsilon$. Он исчезает в случае однородного диэлектрика, когда $\nabla \varepsilon = 0$, а также когда вектор \mathbf{E} ортогонален градиенту ДП. При этом на границах раздела возможна поверхностная плотность заряда, определяемая скачком нормальной компоненты электрического поля. Все эти плотности заряда создают магнитный момент, и их необходимо учитывать.

Вращение тела изменяет ДП, причем тензор ДП в ВСО и ИСО имеет различные представления [10]. Мы пренебрегаем этими эффектами. Но вращение тела приводит к его поляризации, т.е. к образованию связанного объемного заряда. Если тело в целом не заряжено, его полный заряд при этом равен нулю, но существует связанный объемный заряд в непроводящих областях и поверхностные заряды на хорошо проводящих поверхностях, разделяющих эти области. Такое тело также обладает магнитным моментом, учет которого не совсем прост. Если имеется несколько поверхностей, на которых определены плотность поверхностного заряда σ_k , то можно ввести обобщенную плотность объемного заряда

$$\tilde{\rho}(r) = \rho(r) + \rho_c(r) + \sum_{k=0}^K \sigma_k \delta(r - R_k), \quad (18)$$

где первые два слагаемых даются формулой (17). Тогда имеем магнитный момент

$$\mathbf{M} = \mathbf{z}_0 \omega \int \int \int_0^R \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \tilde{\rho}(r, \theta) r^4 \sin^2(\theta) dr d\theta d\varphi. \quad (19)$$

Эта формула учитывает и меридиональную зависимость плотности заряда.

4. Разделение зарядов во вращающемся шаре

Если вращающийся шар заряжен до некоторого заряда Q , то вращение заряда создает кольцевой ток и

соответствующее магнитное поле. Однако если шар не заряжен, то магнитное поле может создать только набор диполей. В целом диполь $\mathbf{p} = q\mathbf{d}$ не заряжен, но вращение диполя, ориентированного по \mathbf{r} , создает ММ

$$\mathbf{M}_p = \mathbf{z}_0 q \omega d \sin^2(\theta) \left[(r + d/2)^2 - (r - d/2)^2 \right] / 2 \approx \mathbf{z}_0 q \omega r d \sin^2(\theta). \quad (20)$$

Здесь диполь ориентирован по радиусу, центр диполя расположен на расстоянии r , а положительный заряд q направлен во внешнюю область. Суммарный момент определяется совокупностью моментов диполей. Соответственно диполи должны быть ориентированы вдоль радиуса, или указанное направление ориентации должно быть преимущественным. Диполи у полярных атомов и молекул существуют вне поля, а в неполярных атомов и молекул могут возникать под действием поля. Если тело имеет свободные заряды, например, состоит из нейтральной в целом плазмы, то разделение зарядов также приводит к образованию дипольных моментов. В приведенном примере противоположно заряженных сфер им соответствуют элементарные диполи, ориентированные по всем направлениям так, что вектор суммарного момента равен нулю. Если молекулы или атомы вещества вращающегося тела имеют дипольные моменты, то для их ориентации необходимо воздействие поля. Таким полем может быть как электрическое поле, так и магнитное поле. Пусть дипольный момент тела направлен по оси вращения z . Такое тело есть магнит с северным (положительным полюсом) при $\theta = 0$, и южным (отрицательным) полюсом при $\theta = \pi$. На поверхности тела силовые линии магнитного поля направлены к южному полюсу, т.е. в отрицательном (убывающем) направлении координаты θ . Силовые линии замкнутые, поэтому вдоль оси тела направление силовых линий обратное: от южного полюса к северному. Обычно рассматривают точечный магнитный диполь с магнитным полем

$$H_r = \frac{M_z}{2\pi r^3} \cos(\theta), \quad H_\theta = \frac{M_z}{4\pi r^3} \sin(\theta). \quad (21)$$

Поскольку магнитный заряд g согласно конвенции вебера следует вводить как поток индукции \mathbf{B} через окружающую его поверхность, или из соотношения $\rho_g = \nabla \cdot \mathbf{B}$, где ρ_g его плотность, то введенный магнитный дипольный момент можно представить как $M_z = g d / (\mu_0 \mu)$. Обозначив $p_g = g d$, получим формулы (21) в виде, аналогичном электрическому дипольному моменту $p = q d$. В конвенции ампер-метра магнитный заряд вводится как $g' = g / \mu_0$, поэтому в немагнитной среде в (21) можно положить $M_z = g' d$. В обеих концепциях дипольный момент \mathbf{p}_g направлен от южного магнитного полюса к северному, т.е. так, что его направление соответствует правилу правого буравчика для соответствующего ему кольцевого

тока. Реально магнитное поле тела определяется интегралом [12]

$\mathbf{H} = \mathbf{V}/(\mu_0\mu) = \nabla \times \mathbf{A}$ имеет сложный вид и

$$\mathbf{A}(r, \theta) = \Phi_0 A_\varphi = \Phi_0 \frac{\mu_0 \omega}{2\pi} \int_0^R \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\mu(r', \theta') \rho(r', \theta') r'^3 \sin^2(\theta') \cos(\varphi - \varphi')}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\beta)}} dr' d\theta' d\varphi' \quad (22)$$

где введен косинус $\cos(\beta) = \cos(\theta)\cos(\theta') + \sin(\theta)\sin(\theta')\cos(\varphi - \varphi')$ угла между радиус-векторами точек истока и наблюдения. Вектор-потенциал (22) не зависит от φ , в чем убеждаемся, сделав замену $\alpha = \varphi' - \varphi$. Дифференцируя по углу φ (который возникает в

верхнем и нижнем пределе), получаем ноль. Интегрирование по α сводится к эллиптическим интегралам. Действительно, имеем табличный интеграл [13]

$$\int_0^\pi \frac{\cos(\alpha)}{\sqrt{1 - 2a \cos(\alpha) + a^2}} d\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + a^2}} \int_0^\pi \frac{\cos(\alpha)}{\sqrt{1 - 2a \cos(\alpha)/(1 + a^2)}} d\alpha = \frac{2}{a} [\mathbf{K}(a) - \mathbf{E}(a)]$$

Обозначим $b^2 = r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta)\cos(\theta')$, $c = rr' \sin(\theta) \sin(\theta')/b$. Отсюда $a = (1 - \sqrt{1 - 4c^2})/(2c)$. Очевидно, $|c| \leq 1/2$ и $a \leq 1$. Тогда интеграл по азимуту имеет вид

$$\int_0^\pi \frac{\cos(\alpha)}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\beta)}} d\alpha = \frac{2\sqrt{1 + a^2}}{ab} [\mathbf{K}(a) - \mathbf{E}(a)].$$

Однако дальнейшее аналитическое взятие интегралов даже в случае постоянных $\mu(r', \theta')$ и $\tilde{\rho}(r', \theta)$ затруднительно. В случае сферической симметрии упрощение наступает, когда плотность заряда представлена в виде набора дельта-функций

$$\tilde{\rho}(r) = \sum_{k=0}^K \sigma_k \delta(r - R_k), \quad \text{что означает наличие}$$

нескольких заряженных сфер с плотностями поверхностного заряда σ_k и отсутствие объемных зарядов между ними. Тогда (22) преобразуется к виду

$$A_\varphi = \frac{\mu_0 \omega}{2\pi} \sum_{k=0}^K \sigma_k \mu(R_k) R_k^3 \int_0^\pi \int_0^\pi \frac{\sin^2(\theta') \cos(\alpha)}{\sqrt{r^2 + R_k^2 - 2rR_k \cos(\beta)}} d\theta' d\alpha. \quad (23)$$

Интеграл по азимуту берется, но интеграл по меридиональному углу взять затруднительно, но вклад в вектор-потенциал от меридиональных областей сфер, далеких от экватора $\theta' = \pi/2$, мал. Записывая $\sin^2(\theta') = 1/2 - \cos(2\theta')/2$, можно пренебречь интегралом, включающим второе знакопеременное слагаемое. Если заменить поверхностные плотности заряда на линейные плотности вдоль экваторов $\xi_k = 2R_k \sigma_k$, то получим

$$A_\varphi = \frac{\mu_0 \omega}{8\pi} \sum_{k=0}^K \xi_k \mu_k R_k^2 \int_0^\pi \frac{\cos(\alpha)}{\sqrt{r^2 + R_k^2 - 2rR_k \sin(\theta) \cos(\alpha)}} d\alpha \quad (24)$$

Здесь обозначено $\mu_k = \mu(R_k)$. Это представление вектор-потенциала уже может быть сведено к эллиптическим интегралам. На заряды действует магнитная индукция

$$B_r = \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} (r \sin(\theta) A_\varphi),$$

$$B_\theta = \frac{-1}{r \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial r} (r \sin(\theta) A_\varphi). \quad (25)$$

На вращающийся вместе с телом заряд, и заряд, движущийся вдоль азимута, действует компонента

B_θ , при этом сила направлена вдоль радиуса. На такой заряд также действует компонента B_r , а сила направлена вдоль меридиана. На заряд, движущийся вдоль радиуса тела, действует эта же компонента B_θ , при этом сила направлена по азимуту. На заряд, движущийся вдоль меридиана, действует компонента B_r , при этом сила направлена вдоль азимута. Действующие на заряд силы приводят к его сложному движению, которое создает азимутальную несимметрию распределения заряда компоненте B_θ , которая еще более усложняет движение.

Мы рассмотрели статические модели заряженного шара. При этом шар может быть в целом нейтрален, а какие-то его области заряжены противоположно. Однако если вещество шара имеет хоть какую-то проводимость, через некоторое время шар разрядится. Тем более если между заряженными поверхностями находится плазма. Поэтому необходимо ввести конечную проводимость, описывающую вещество шара. Такая конечная проводимость приведет к тому, что между областями шара возникнут сопротивления и потекут токи разрядки. Для поддержания заряженного состояния необходимы некие ЭДС. Естественно, для их работы нужна энергия. Будем пренебрегать компонентой B_φ и считать, что движение зарядов в шаре достаточно медленное по сравнению с касательной к азимутальной координате скоростью $v_\varphi = \omega r \sin \theta$. Это, по крайней мере, так для не слишком малых радиусов и не слишком полярных областей. Учет компоненты B_φ достаточно сложен: поле теряет симметрию, а его представления в ВСО и ЛСО существенно отличаются. На заряд q , движущийся относительно тела со скоростями v_r, v_θ в точке \mathbf{r} действует сила Лоренца

$$\mathbf{F}_L = q[\mathbf{E}(\mathbf{r}) + (\mathbf{r}_0 v_r + \boldsymbol{\theta}_0 v_\theta + \Phi_0(\omega r \sin(\theta) + v_\varphi)) \times (\mathbf{r}_0 B_r(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\theta}_0 B_\theta(\mathbf{r}))]. \quad (25)$$

Ее симметричные компоненты имеют вид:
 $F_{Lr} = q[E_r(\mathbf{r}) - (\omega r \sin(\theta) + v_\varphi) B_\theta(\mathbf{r})],$
 $F_{L\theta} = q[E_\theta(\mathbf{r}) + (\omega r \sin(\theta) + v_\varphi) B_r(\mathbf{r})],$
 $F_{L\varphi} = q[E_\varphi(\mathbf{r}) + v_r B_\theta(\mathbf{r}) - v_\theta B_r(\mathbf{r})].$

Здесь мы оставили компоненту $E_\varphi(\mathbf{r})$, которая соответствует азимутально несимметричному распределению заряда. Такое распределение заряда может создавать в ЛСО осциллирующее азимутальное магнитное поле, которое отсутствует во ВСО. Вдали

ДИСКУССИЯ

от полюсов и не слишком близко к центру $v_\varphi \ll \omega r \sin \theta$, и в этих областях v_φ можно опустить. Свободный заряд в ВСО движется согласно уравнению движения

$$m_q \mathbf{r} = \mathbf{F} = \mathbf{F}_L + \mathbf{F}', \quad (26)$$

где в силу \mathbf{F}' входят все прочие силы, кроме силы Лоренца: Кориолиса, трения, давления, молекулярные силы типа сил Ван-дер-Ваальса и т.п. Решение самосогласованных систем уравнений типа (26), уравнений переноса тепла и вещества, уравнения Пуассона в принципе позволяет вычислять динамику плотности заряда $\tilde{\rho}(r, \theta)$ и магнитного поля (22). В случае большого тела такое моделирование, например, методом крупных частиц, может представлять непосильную задачу даже для современных суперкомпьютеров. Другой подход может быть основан на решении кинетического уравнения Больцмана. Сила Лоренца разделяет движущиеся заряды, при этом возникает холловское поле \mathbf{E}_H и ЭДС Холла. В случае неподвижного в ВСО заряда из условия равновесия определяем $\mathbf{E}_H = \mathbf{r}_0 \omega r \sin(\theta) B_\theta(\mathbf{r})$. При положительном вращении на поверхности тела компонента B_θ направлена по меридиану (от северного полюса к южному), поэтому поверхность тела заряжается отрицательно: на отрицательные заряды магнитная сила движет к поверхности, а положительные – вглубь от нее. Вклад отрицательного заряда поверхности дает отрицательный вклад в полный магнитный момент, что приводит к уменьшению B_θ . Однако согласно (22) в глубине тела замкнутые силовые линии \mathbf{B} идут в обратном направлении: от южного полюса к северному. Такие полюса – чисто фиктивные области, где имеет место сгущение силовых линий. Поэтому в глубинных слоях тела разделение зарядов противоположное: отрицательные заряды движутся к ядру, а положительные – от него. Если тело имеет несколько противоположно заряженных сфер, динамика еще более усложняется. Поля между противоположно заряженными сферами складываются. Если внешняя сфера заряжена положительно, а внутренняя заряжена отрицательно, указанное сильное поле еще более разделяет заряды и заряжает сферы. Если внешняя сфера заряжена отрицательно, а внутренняя – положительно, направление поля между ними меняется, но разделение зарядов также происходит и увеличивает заряды сфер. На поверхности тела поле хорошо описывается полем диполя (21), т.е. убывает как r^{-3} . Но внутри тела согласно (22) поле может быть более сильным, поскольку определяется интегралом (22) с сингулярным ядром.

Рассмотрим электрический диполь в некоторой точке тела. На диполь действует момент сил: электрической и магнитной. Равновесие имеет место при холловском поле. В случае неоднородного поля диполь может втягиваться в область сильного электрического поля, что изменяет поляризацию и ДП

тела. Если молекулы или атомы тела неполярные, магнитная сила Лоренца разделяет заряды в них, создавая дипольный момент, создает холловское поле, изменяет поляризацию, следовательно, и ДП. Заметим, что проявление такой ДП возможно только во внешнем электрическом поле, в которое помещено вращающееся тело. Для полярных молекул с дипольным моментом \mathbf{p}_0 энергия в поле определяется как $W = -\mathbf{p}_0 \mathbf{E}_H = -\omega r \sin(\theta) B_\theta(\mathbf{r}) \cos(\alpha)$, где α – угол с направлением радиуса. При малых угловых скоростях для нагретого тела считаем $W \ll k_B T$. Поскольку холловское поле внутреннее, в случае разреженной среды с плотностью n таких частиц возникает дополнительная электрическая поляризация $\mathbf{P} = \mathbf{r}_0 n p_0^2 \mathbf{E}_H / (3kT)$. Для плотных сред необходимо использовать формулу Онсагера. Для неполярных атомов или молекул холловское поле создает дипольный момент, который также следует учитывать как изменение эффективной ДП во вращающемся теле, например, при решении уравнения Пуассона типа (7). При этом даже при исходной однородной ДП в неподвижном теле ДП вращающегося тела становится неоднородной, продуцируя связанный объемный заряд. Его также следует учитывать при вычислении магнитного момента.

Учитывая только гальваномагнитные явления, связанные с вращением, т.е. пренебрегая движениями зарядов вдоль тела, считая поля азимутально симметричными, в дипольном приближении можно определить холловское поле как равновесное

$$\mathbf{E}_H = \mathbf{r}_0 M_z \mu_0 \mu(r, \theta) \omega \sin^2(\theta) / (4\pi r^2). \quad (27)$$

Такая зависимость внутреннего поля соответствует отсутствию объемных зарядов. Если предположить, что тело имеет проводящее ядро и внешнюю проводящую поверхность, то получаем, что ядро должно быть заряжено положительно, а поверхность отрицательно. Магнитный момент такого тела должен был бы быть отрицательным (по отношению к механическому моменту), что противоречит предположению о знаке поля. Следовательно, у тела должна быть, по крайней мере, еще одна хорошо проводящая область (поверхность) с положительным зарядом. Правда, здесь следует сделать несколько замечаний. Поле диполя (21) хорошо описывает определяемое вращением неоднородного распределения зарядов поле (25) тела вдали от него. Внутри тела характер поля совершенно другой. Примером может служить рамка с током. Силовые линии замкнутые, поэтому внутри тела их направление меняется: они идут с юга на север. Это приводит к тому, что малое ядро должно заряжаться отрицательно. Если имеются две близко расположенные и противоположно заряженные сферы (или два таких тонких сферических слоя), то между ними их поля складываются, магнитное поле может быть существенно больше, чем определяемое формулами (21). Соответственно изменяется холловское поле и усиливается разделение зарядов. Рассмотрим модель тела с отрицательно заряженным

ядром, положительно заряженной сферой радиуса R_1 с зарядом Q_1 и отрицательно заряженной поверхностью с зарядом Q_2 . Пусть заряд Q_1 равен по величине и противоположен по знакам зарядам ядра $-Q_0$ и поверхности $-Q_2$. Имеем $M_z'' = \omega[-Q_0R_0^2 + (Q_0 + Q_2)R_1^2 - Q_2R^2]$. Для того чтобы магнитный момент стал положительным, необходимо выполнение условия $R_1^2 > (R_0^2Q_0 + R^2Q_2)/(Q_0 + Q_2)$. Если $Q_0 = Q_2$ и $R_0 < R/3$, это фактически означает $R_1 > R/\sqrt{2}$. Если же $Q_0 \gg Q_2$, то $R_1 > R/3$. Если имеет место несколько $(K+1)$ заряженных хорошо проводящих тонких слоев (сфер) с радиусами R_k и зарядами $(-1)^k Q_k$, то для ММ пишем

$$M_z'' = \omega \sum_{k=0}^K (-1)^{k+1} Q_k R_k^2, \quad \sum_{k=0}^K (-1)^k Q_k = 0. \quad (28)$$

где предположено, что ядро заряжено отрицательно. Знак M_z'' должен быть противоположен знаку $(-1)^K$. Это знак заряда поверхности, которую также считаем хорошо проводящей.

Рассмотренные простые модели показывают, что слоистое строение тела и создающее холловское поле сила Лоренца приводят к разделению зарядов, которое усиливается за счет его же внутреннего поля. При этом суммарный магнитный момент, определенный как вклад всех разделенных зарядов, может иметь как положительный, так и отрицательный знак. Знак ММ в основном зависит от распределения зарядов в центральной области тела между ядром и его поверхностью. Рассмотренные статические модели естественно не учитывают эффекты разряда и заряда слоев. Выражение (27) показывает, что ЭДС максимальна в экваториальной плоскости и резко спадает к нулю у полюсов. Фактически были рассмотрены модели идеально проводящих сфер, находящихся под одним и тем же потенциалом. Если рассматривать плохо проводящие слои, то их разряд должен осуществляться в районе полюсов, а заряд в области экватора. Токи разряда текут вдоль линий МП, тогда как токи заряда поперек, что должно приводить к сложным винтовым траекториям. Такие замкнутые токи в теле могут создавать дополнительное слабое по отношению к рассмотренному меридионально несимметричное и азимутально несимметричное МП. Кроме того, вместо тонких идеально проводящих слоев (заряженных поверхностей), следует рассматривать знакопеременное распределение плотности заряда, приводящее к некомпенсированному ММ тела. В общем случае модель должна быть динамической. Движение зарядов при их разделении в сложных полях идет по винтовым траекториям аналогично движению в магнетроне, но заряды разных знаков смещаются с поверхности данного радиуса в

противоположные стороны, образуя противоположно заряженные поверхности. Кроме этого имеет место азимутальный дрейф таких закрученных траекторий, приводящий к дополнительному МП. Для статической модели необходимо решать самосогласованные уравнения Пуассона с учетом разделения зарядов и дополнительной поляризации в МП и вычисления этого поля от неоднородного распределения плотности заряда. Поскольку в поле (27) входит частота, то такое распределение плотности заряда также пропорционально частоте ω . Разделенные заряды также пропорциональны частоте. Частота линейно входит и в определение ММ через плотность заряда. Поэтому в окончательном выражении магнитный момент пропорционален квадрату частоты.

5. Заключение. О магнитном поле Земли

Магнитный момент Земли на ее поверхности и внешней области с хорошей точностью является дипольным и равен $M_z = 7.812 \cdot 10^{22} \text{ Ам}^2$ (на 1995 г.) при напряженности поля на магнитном экваторе 36 А/м, составляя с осью вращения угол примерно 11.5 градусов. За последние годы он уменьшается по величине на 1/4000 в год, а магнитные полюса дрейфуют. Северный магнитный полюс несколько столетий дрейфовал в районе островов канадского архипелага, а сейчас ускорил дрейф почти до 200 км в год и движется к полуострову Таймыр. Центр магнитного диполя смещен от центра Земли на 430 км, что говорит о несимметричности МП Земли (МПЗ). Оно состоит из нескольких слагаемых. Одно из них – поле ионосферы и магнитосферы. Ионосфера относительно земли заряжается положительно за счет молний. Это часть поля имеет значение порядка одного процента от общего МП, что подтверждается изменением МП при магнитных бурях. В качестве одного из генераторов этого поля может выступать солнечный ветер. Заряженные частицы захватываются МПЗ и закручиваются, создавая (изменяя) МП. Смещение полюсов при магнитных бурях может достигать сотен километров. Имеют место суточные прецессии полюсов и иные периодические и квазипериодические движения, что говорит о меридионально-азимутальной несимметричности поля. Несовпадение магнитной оси и оси вращения приводит к возникновению азимутальной, следовательно, суточной вариации холловского поля и МП. Обнаружены инверсии силовых линий МПЗ, картина которых весьма сложная и запутанная, что говорит о мультипольном характере МП, особенно усложняющийся внутри. Также несомненен механизм геомагнитного или магнитогидродинамического динамо (МГД), обусловленный всплытием струй расплавленного железа из глубоких сильно разогретых слоев жидкой области ядра с последующим их остыванием и осаждением. МП за 4 миллиарда лет инвертировалось несколько сот раз, что говорит о сложной нелинейной динамике с учетом шумовых факторов. Стохастическая переполсовка в [14] рассмотрена как результат бифуркаций между двумя устойчивыми состояниями, что похоже на стохастический резонанс.

Библиографический список

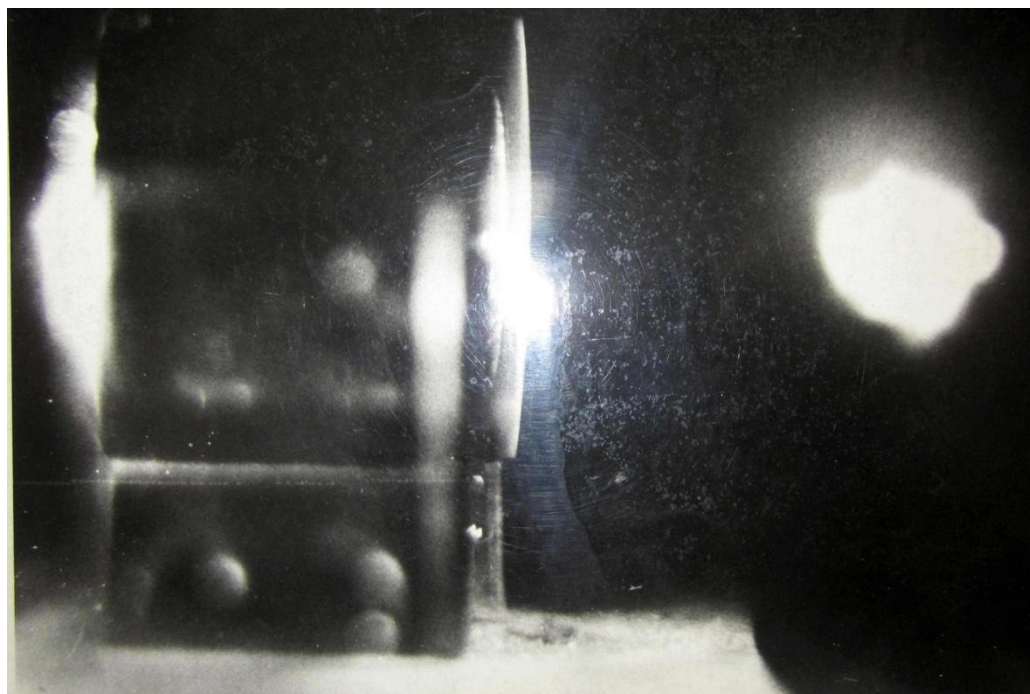
1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред.– М.: Наука, 1982.– 620 с.
2. Barnett S.J. Magnetization by Rotation. Phys. Rev. 1915. V. 6. P. 239–270.
3. Barnett S.J. Gyromagnetic and Electron-Inertia Effects. Rev. Mod. Phys. 1935. V. 7. P. 129–166.
4. Яновский Б.М. Земной магнетизм. Л.: Издво Ленингр. унта, 1978. 592 с.
5. Брагинский С.И. Геомагнитное динамо. Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. 1978. Т. 9. С. 74–90.
6. Соколов Д.Д. Проблемы магнитного динамо // УФН. 2015. Т. 185. С. 643–648,
7. Зельдович Я.Б., Рузмайкин А.А. Гидромагнитное динамо как источник планетарного, солнечного и галактического магнетизма // УФН. 1987. Т. 152. С. 263–284.
8. Долгинов А.З. О происхождении магнитных полей Земли и небесных тел // УФН. 1987. Т. 152. С. 231–262,
9. Блэккет П.М.С. Магнитное поле вращающихся массивных тел // УФН. 1947. Т. 33. С. 52–76.
10. Петров Б.М. Прикладная электродинамика вращающихся тел. М.: Горячая линия -Телеком, 2009. 288 с.
11. Ахиезер А.И., Ахиезер И.А. Электромагнетизм и электромагнитные волны. М: Высшая школа, 1985. 504 с.
12. Гольдштейн Л.Д., Зернов Н.В. Электромагнитные поля и волны. М.: Сов. Радио. 1971. 664 с.
13. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Том 1. Элементарные функции. М.: Наука, 1981. 798 с.
14. Pétrélis F., Fauve S., Dormy E., Valet J.P. Simple Mechanism for Reversals of Earth's Magnetic Field // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. P. 144503 (4).

ON THE MAGNETISM OF ROTATING BODIES

M.V. Davidovich

Saratov state University

The mechanism of charge separation in a rotating body due to the Lorentz force and its associated magnetic moment and magnetic field are considered.



Пробой воздуха лазером. Фото 1967 г. Из коллекции М.А.Старшова

ПАМЯТКА АВТОРАМ

К публикации принимаются статьи по всем разделам физики

В редакцию представляются

- бумажный носитель (бумага белая А4) - 1 экз.;
- электронная копия;
- разрешительный документ на открытое опубликование.

Правила оформления (не оформленные статьи, не принимаются к рассмотрению):

Структура статьи.

Заголовок; аннотация на русском (английском) языке; содержание статьи, включая таблицы, рисунки, на русском (английском) языке; библиографический список; название статьи, фамилия автора(ов), название организации(й), аннотация – все на английском (русском) языке.

Текст представляется в формате MS Word v.6.0 – 7.0; интервал – одинарный; шрифт – Times New Roman Cуг., 14 пт; размер полей: верхнего 2 см, нижнего 2 см, левого 2,5 см, правого 1,5 см; абзацы - отступом в 0,5 см.

Заголовок.

Первая строка – индекс УДК (для статей на русском языке), выровненный по *правому* краю текста;

вторая строка – заголовок **полужирными** строчными буквами без переносов, размещенный по центру текста;

с третьей строки – перечень авторов (имя, отчество, фамилия полностью) с указанием уч. степени, должности, места работы, адреса эл. почты, дом. и раб. телефонов.

Обозначения и формулы

Латинские обозначения (P , I , W и т.д.) выполняются *курсивом*, названия функций (\sin , \cos , и т.д.), греческие буквы - обычным (прямым) шрифтом (β , λ , α); обозначения векторов полужирным шрифтом (без верхнего обозначения, W , a); номера кривых в рисунках даются *курсивом* (I , 2); русский текст и цифры в верхнем и нижнем индексах - прямым шрифтом ($W_{\text{вых}}$, L^2).

Формулы и греческие символы набираются только в редакторе формул Equation 2.0, 3.0.

Ширина строки формулы – до 8 см, в особых случаях – 16 см.

Ссылки

Ссылки на формулы и таблицы даются в круглых скобках (*.*); формулы, на которые имеются ссылки в тексте, нумеруются в порядке их появления в тексте цифрой, заключенной в круглые скобки (*.*), по правому краю границы текста, выносятся отдельной строкой и располагаются по центру текста.

В тексте допустимо расположение только однострочных формул, не имеющих нумераций.

Ссылки на источники даются в квадратных скобках [*].

Рисунки

Каждый рисунок содержится в отдельном файле формата bmp, jpg, wmf, psx (сохраненные в монохромном режиме). Размеры рисунков: простые ненасыщенные - ширина 8 см., сложные до 16 см. Рисунки даются только черно-белыми, поэтому разноцветные графики не рекомендуются.

В оформлении рисунков применяются: латинские обозначения (P , I , W и т.д.) – *курсивом*; названия функций (\sin , \cos , и т.д.), греческие буквы (α , β , γ ..) – прямым шрифтом, номера кривых – *курсивом*; обозначения векторов **полужирным** шрифтом (без верхнего обозначения).

Фотографии

Фотографии – черно-белые, в отдельных файлах bmp, jpg, wmf, psx (сохраненные в монохромном или 16-цветном режиме). Размеры рисунков, фотографий: простые – шириной 8 см., сложные до 16 см.

Таблицы

Размеры таблиц – ширина 8 см., большие - до 16 см. Правила оформления обозначений те же, как и для формул.

Библиография

В библиографическом списке нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте. Пример правильного оформления показан в образце на следующей странице.

Условия опубликования в сборнике:

- публикации платные;
- стоимость договорная
- оплата производится в течение недели со дня получения уведомления редколлегии о принятии статьи к опубликованию;
- редколлегия подтверждает факт оплаты в течение недели со дня получения перевода;
- материалы статьи направлять в адрес редколлегии: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83, Саратовский государственный университет, физический факультет, редколлегия сборника "Вопросы прикладной физики";
- или по электронной почте научному редактору Старшову М.А.: mastarshov@mail.ru

ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МОДЕЛИ В БИОФИЗИКЕ

И.А.Иванов, А.И.Петров

Саратовский государственный университет

Иванов Иван Алексеевич, канд. физ.-мат. н, доцент, e@mail, р.т. (8452) 11-12-13,

Петров Антон Иванович, аспирант, e@mail, р.т. (8452) 15-17-13,

Показано, что в некоторых явлениях случайные отклонения от закономерностей настолько малы, что их можно не учитывать. Рассмотрены явления, в которых случайность играет основную роль.

Рассмотрим вероятностную модель биомолекулярной реакции:



Вероятность того, что за время Δt не образуется ни одной молекулы типа C , равна $1-N_1N_2\lambda\Delta t$ [1]. На рис.1 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки. Кривая 1 – зависимость от времени, кривая 2 – вблизи точки равновесия.

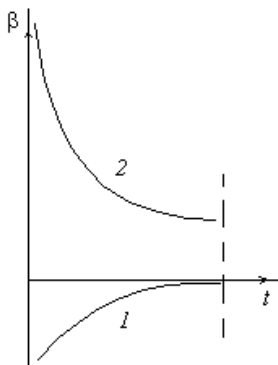


Рис.1

На рис.2 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки при образовании молекулы типа D .

Библиографический список

1. Рубин А.Б. Биофизика. М., 1987.
2. Иванов И.А. // Материалы междунар. науч.-техн. конф. "Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-98". Саратов, 1998. Т.1. С.234-235.
3. Бочаров Е.П. // Изв. Вузов. Радиофизика. 1987. Т.30, №1. С.96-103.
4. Rack A.I. // Bell System Tech. J. 1938. V.17, №3. P.123-124.
5. Van Duzer T. // IEEE Trans. 1963. V.ED-10, №6. P.370-378.
6. Петров П.И. // Вопросы электронной техники. Саратов, 1971. Вып.2. С.12-15.
7. Михайлов А.И., Лернер Д.М. // Письма в ЖТФ. 1998. Т.24, вып.21. С.16-22.

PROBABILISTIC MODELS IN BIOPHYSICS

I.A. Ivanov, A.I. Petrov

Saratov State University

Shown that in some phenomena casual detours from regularities far enough small that their possible not to take into account. Considered phenomena, in which accident plays a main role.

СПИСОК АВТОРОВ СТАТЕЙ СБОРНИКА

Андрианов Виталий Геннадьевич,	заведующий учебной лабораторией электрорадиотехники	Саратовский государственный исследовательский университет им. Н.Г.Чернышевского (далее–СГУ)
Аникин Валерий Михайлович	д.ф.-м.н., профессор, декан физического факультета	СГУ
Баранов Виктор Иванович,	д.ф.-м.н.	Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва
Березин Максим Кириллович	аспирант	СГУ
Глухова Ольга Евгеньевна	д.ф.-м.н., заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики,	СГУ
Давидович Михаил Владимирович	д.ф.-м.н., профессор кафедры радиотехники и электродинамики	СГУ
Дёмин Игорь Ярославович	студент физического факультета	СГУ
Инкин Максим Глебович	студент физического факультета	СГУ
Клугман Илья Юльевич	к.т.н.	
Машников Валерий Васильевич	к.ф.-м.н., доцент	СГУ
Минкин Леонид Моисеевич	профессор	Portland State University, USA
Мироненко Ксения Витальевна	студентка физического факультета	СГУ
Нюнько Николай Евгеньевич	к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры компьютерной физики	СГУ
Санков Константин Викторович	ИФНС России №12 по Саратовской области	ИФНС России №12 по Саратовской области
Слепченков Михаил Михайлович	к.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики,	СГУ
Старшов Михаил Александрович	зав. учебно-исследовательской лабораторией	СГУ
Тен Галина Николаевна	Д.ф.-м.н., профессор	СГУ
Чурочкина Светлана Викторовна	к.ф.-м.н., доцент	СГУ
Шаповалов Александр Степанович	д.ф.-м.н., профессор	СГУ
Шаповалов Степан Александрович	начальник группы ОВК	КРЭТ, АО «АП Восход», г. Москва
Шаповалова Ирина Александровна	учитель английского языка высшей категории	МОУ «Гимназия № 31» Кировского района г. Саратова
Шунаев Владислав Викторович,	к.ф.-м.н., ассистент кафедры радиотехники и электродинамики,	СГУ
Щербакова Наталья Евгеньевна	м.н.с.	Научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов

СОДЕРЖАНИЕ

ЮБИЛЕЙ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ В САРАТОВЕ

<i>В.М. Аникин</i>	У истоков физической науки и высшего физического образования в Саратове	3	
<i>В.М. Аникин</i>	Первая кафедра на базе академического института	5	
<i>М.А. Старшов</i>	Эксперимент за пятьдесят лет	12	
ОБРАЗОВАНИЕ			
<i>В.В. Машиников, Л.М. Минкин, А.С. Шаповалов</i>	О роли примеров в изучении физики	14	
<i>А.С. Шаповалов, М.Г. Инкин, С.А. Шаповалов</i>	Простая статистическая модель неоднородного эмиттера, генерирующего аномальный дробовой шум	17	
<i>О.Е. Глухова, В.Г. Андрианов, М.М. Слепченко, В.В. Шунаев</i>	О методике преподавания теории электрических цепей для студентов нефизического профиля подготовки	21	
<i>О.Е. Глухова, В.В. Шунаев, М.М. Слепченко</i>	О методике расчета энергетических параметров наноструктур	23	
<i>И.А. Шаповалова</i>	Коммуникативный метод обучения английскому языку и роль преподавателя в процессе обучения	25	
ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМ			
<i>А.С. Шаповалов, В.В. Машиников, Л.М. Минкин</i>	Флуктуации фазы сигнала многодиодного генератора СВЧ	27	
<i>А.С. Шаповалов, Л.М. Минкин</i>	Взаимный спектр флуктуаций амплитуды и фазы сигнала многодиодного генератора СВЧ	30	
<i>М.Г. Инкин, К.В. Мироненко, А.С. Шаповалов</i>	Влияние дискретизации треугольного распределения параметра интенсивности эмиссии на энергетические характеристики аномального дробового шума неоднородного эмиттера	33	
<i>М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов, С.А. Шаповалов</i>	Частотные характеристики аномального дробового шума неоднородного эмиттера с дискретным треугольным распределением параметра интенсивности эмиссии	36	
ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ			
<i>Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, В.И. Баранов</i>	Интерпретация ИК спектров алифатических α -аминокислот в водном растворе	40	
<i>Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, М.К. Березин, В.И. Баранов</i>	Колебательные спектры комплементарных пар аденин-тимин по Уотсону-Крику и Хугстину	47	
<i>Г.Н. Тен, Н.Е. Щербакова, В.И. Баранов</i>	Колебательные спектры фенилаланина и тирозина в водном растворе	50	
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА			
<i>С.В. Чурочкина, И.Я. Демин</i>	Некоторые аспекты теории квантового трения	55	
<i>Н.Е. Нюнько, К.В. Санков</i>	Собственно-энергетическая и вершинная части в элементах квазипотенциала вне массовой поверхности	58	
<i>Н.Е. Нюнько, К.В. Санков</i>	Одномерные задачи квантовой механики о прямоугольном барьере	60	
ДИСКУССИЯ			
<i>И.Ю. Клугман</i>	Индикатор нарушения закона Архимеда – ключ к изучению дисперсных систем	62	
<i>М.В. Давидович</i>	О магнетизме вращающихся тел	67	
ОТ РЕДКОЛЛЕГИИ СБОРНИКА*			
	Памятка для авторов и образец оформления статьи	75	
	Список авторов	77	
ОГЛАВЛЕНИЕ			78
CONTENTS			79

CONTENTS

A CENTURY OF PHYSICAL EDUCATION IN SARATOV		
V. M. Anikin	On the Beginning of Physical Science and Higher Physical Education in Saratov	3
V. M. Anikin	First Department on the Basis of the Academic Institute	5
M.A.Starshov	Experiment for Fifty Years	12
EDUCATION		
V.V. Mashnikov, L.M. Minkin,	About the Role of the Examples in the Studying of Physics	14
A.S. Shapovalov		
A. S. Shapovalov, M. G. Inkin,	The Simple Statistical Model of the Inhomogeneous Emitter Generating Anomalous Shot Noise	17
S.A. Shapovalov		
O.E. Glukhova, V.G. Andrianov,	About the Methodology of Teaching the Electric Circuit Theory for Students of Nonphysical Profile of Training	21
M.M. Slepchenkov, V.V. Shunaev		
O.E. Glukhova, V.V. Shunaev,	On the Method of Calculating the Energy Parameters of Nanostructures	23
M.M. Slepchenkov		
I.A.Shapovalova	Communicative Method of Teaching English and Teacher's Role in the Process of Teaching	25
ELECTROMAGNETISM		
A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, L.M. Minkin	Phase Fluctuations of Signal of the Multidiode Microwave Oscillator	27
A.S. Shapovalov, L.M. Minkin	Mutual Spectrum of Amplitude and Phase Fluctuations of Signal of Multidiode Microwave Generator	30
M. G. Inkin,, K.V. Mironenko,	The Influence of The Sampling of Triangular Distribution of Emission Intensity Parameter to Energy Characteristics of Anomalous Shot Noise of The	33
A. S. Shapovalov	Inhomogeneous Emitter	
M. G. Inkin,	The Frequency Characteristics of Anomalous Shot Noise of the Inhomogeneous	36
A. S. Shapovalov, S.A. Shapovalov	Emitter with Discrete Triangular Distribution of Emission Intensity Parameter	
OPTICS AND SPECTROSCOPY^a		
Ten G. N., Shcherbakova N. E., Baranov V.I.	Interpretation of IR Spectra of α -Aliphatic Amino Acids in Aqueous Solution	40
Ten G. N., Shcherbakova N. E., Berezin M.K., Baranov V.I.	Vibrational Spectra of Adenine-Thymine Complementary Pairs According to Watson-Crick and Hoogsteen	47
Ten G. N., Shcherbakova N. E., Berezin M.K., Baranov V.I.	Vibrational Spectra of Phenylalanine and Tyrosine in Aqueous Solution	50
THEORETICAL PHYSICS		
S. Churochkina, I. Demin	Some Aspects of the Quantum Friction Theory	55
N.E. Nyun'co, K.V. Sankov	Self- Energy and Top Parts in Elements of Quasipotential Outside the Mass Surface	58
N.E. Nyun'co, K.V. Sankov	One-Dimensional Quantum-Mechanical Problem In the Case of Constant Rectangular Building	60
DISCUSSION		
Yu. Klugman	The Indicator of Amendment of Archimedes' Principle As the Key to The Research of Disperse Systems	62
M.V. Davidovich	On the Magnetism of Rotating Bodies	67
NOTES FOR THE AUTHORS		75
LIST OF THE AUTHORS		77
CONTENTS IN RUSSIAN		78
CONTENTS IN ENGLISH		79