

Саратовский национальный исследовательский
государственный университет
им. Н.Г. Чернышевского

ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ

Межвузовский научный сборник

Выпуск 29

Издательство Саратовского университета
2022

Вопросы прикладной физики: Межвуз. науч. сб.— Саратов: Изд-во Саратовского университета, 2022. — Вып. 29 — 70 с.: илл.

В сборнике представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований прикладных проблем в различных областях современной физики: математические методы в физике; статистическая физика и термодинамика; инструменты, аппаратура, компоненты и техника, общие для различных областей физики и астрономии; электромагнетизм, электронная и ионная оптика; оптика; конденсированные среды: структура, механические и тепловые свойства; геофизика гидросферы и атмосферы. Тематика разделов соответствует международной классификации по физике и астрономии (PACS 1996).

Для специалистов в области прикладной физики, а также для аспирантов и студентов-физиков старших курсов.

Редакционная коллегия:

А.С. Шаповалов –главный редактор
М.А. Старшов – научный редактор
С.В. Чурочкина – зам.главного редактора

Редакционный совет:

В.М. Аникин	Саратовский государственный университет
В.Б. Байбурин	Саратовский государственный технический университет
С.Б.Вениг	Саратовский государственный университет
О.Е. Глухова	Саратовский государственный университет
М.В. Давидович	Саратовский государственный университет
Н.И. Сеницын	СО ИРЭ РАН, Саратов
М.А. Старшов	Саратовский государственный университет
В.В. Тучин	Саратовский государственный университет
С.В. Чурочкина	Саратовский государственный университет
А.С. Шаповалов	Саратовский государственный университет

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ АНАЛОГИИ
В ТЕОРИИ ДЕТЕРМИНИРОВАННОГО ХАОСА

В. М. Аникин

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского

Аникин Валерий Михайлович, д.ф.-м.н., профессор,
заслуженный работник высшей школы РФ,
заведующий кафедрой общей, теоретической и компьютерной физики

Эволюция вероятностных свойств одномерных хаотических отображений под действием оператора Перрона-Фробениуса, ассоциированного с хаотическими отображениями, сопоставлена с термодинамическими понятиями об установлении равновесного состояния в изолированной термодинамической системе.

«...Информация, получаемая из термодинамики и равновесных и неравновесных систем, ограничивается несколькими общими утверждениями...

Тем не менее, информация, получаемая из термодинамики, чрезвычайно ценна именно вследствие ее общности».

И. Пригожин, Д. Кондепуди

**Равновесное состояние
в хаотических процессах**

Базовым понятием термодинамики – как «традиционной» (равновесной), так и современной (неравновесной) – является понятие равновесного состояния для изолированной системы. Прочитируем [1, с. 20, 21]:

«Из повседневного опыта известно, что если физическая система изолирована, то ее состояние, определяемое, такими макроскопическими переменными, как давление, температура и химический состав, *необратимо* эволюционирует к инвариантному во времени состоянию, в котором в системе не наблюдается никаких физических или химических изменений. Температура во всех частях системы, находящейся в таком состоянии, становится одинаковой. Такое состояние называется состоянием термодинамического равновесия.

Эволюция произвольного состояния к состоянию равновесия происходит в результате необратимых процессов. В состоянии равновесия эти процессы прекращаются. Таким образом, неравновесное состояние можно определить как такое, в котором необратимые процессы вынуждают систему эволюционировать к состоянию равновесия <...>. Итак, равновесные системы характеризуются равномерным распределением температуры, и для них существуют функции состояния – энергия и энтропия <...>. Однако это ничуть не ограничивает нашу возможность приписывать энтропию системе, которая не находится в термодинамическом равновесии, коль скоро температура локально вполне определена».

В термодинамических терминах установления равновесного состояния можно трактовать и эволюционные свойства детерминированных дискретных динамических систем (в форме разностных уравнений), демонстрирующих хаотическое поведение. Если траекторные особенности итерационного процесса на всех его стадиях можно предсказать исключительно в вероятностном ключе, то направление («стрелу времени»), в котором меняются при итерациях

вероятностные свойства (по ансамблю траекторий) сечений процесса можно назвать однозначно – это первая собственная функция ассоциированного с отображением оператора Перрона – Фробениуса, которая носит название *инвариантной плотности* [2]. Образно говоря, оператор Перрона–Фробениуса «перемальвает» текущие (отвечающие шагу итерации) вероятностные распределения в направлении к своей неподвижной точке – инвариантному распределению. Скорость этого «перемальвания» определяется значением собственных чисел оператора [2, 3]. Еще одной «термодинамической» характеристикой в теории детерминированного хаоса может служить энтропия Колмогорова–Синая, определяющая характер режима в динамической системе: ее положительность «сигнализирует» о наличии хаотического поведения. При нулевом значении энтропии может также наблюдаться хаотическое поведение для *обратимых* динамических систем, к числу которых принадлежит дробно-линейное отображение, рассмотренное в [2, с. 165].

**Прямое доказательство сходимости
к равновесному состоянию в хаотических
отображениях на основе многочленов Чебышёва**

Рассмотрим названные выше характеристики на конкретном примере – ортогональных на отрезке $[-1, 1]$ многочленов Чебышёва первого рода, которые при их использовании в качестве итеративных процедур обладают хаотическими свойствами [2]. Третий по порядку многочлен первого рода Чебышёва имеет вид:

$$T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad x \in (-1, 1). \quad (1)$$

Ему отвечает отображение

$$x_{n+1} = T_2(x_n) = 2x_n^2 - 1, \quad x_n \in (-1, 1), n = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Последующие многочлены Чебышёва определяются рекуррентным образом и могут служить в качестве новых хаотических отображениях интервала $(-1, 1)$ [2]:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x,$$

$$T_{m+1}(x) = 2xT_m(x) - T_{m-1}(x).$$

Хаотичность отображения обуславливает описание его траекторий в сугубо вероятностной форме. При этом определяющим моментом становится трактовка значений x_n , включая x_0 , именно как случайных величин, с каждой из которых соотносится вероятностное распределение. Тогда итерационное соотношение (отображение) трактуется как правило преобразования этих случайных величин. Возникает задача определения вида вероятностного распределения для преобразованной случайной величины. В общем виде эта задача в теории вероятности решена. Вид формулы для получения нового распределения упрощается, если в качестве исходного рассматривается равномерное распределение начального значения случайной величины в области ее определения [2].

В теории детерминированного хаоса решается нетрадиционная для теории вероятностей задача, а именно: нахождение такого распределения, которое инвариантно относительно рассматриваемого преобразования случайной величины. В этом случае можно ставить вопрос о сходимости по метрике последовательности функций (промежуточных» вероятностных распределений) к инвариантному распределению в определенном функциональном пространстве [4].

Покажем непосредственно наличие сходимости к инвариантному распределению для отображения (2) в классе непрерывных функций. Точное траекторное решение для отображения (2) имеет вид [2]:

$$x_n = f_n(x_0, n) = \cos(2^n \arccos x_0) = T_{2^n}(x_0), \quad (3)$$

где $x_n = f_n(x_0, n)$ – n -я итерация отображения (2).

Поставим задачей найти результат трансформации исходной вероятностной плотности в форме равномерного распределения на интервале $(-1, 1)$, т.е. функции

$$\rho_0(x) = 1/2, \quad x \in (-1, 1), \quad (4)$$

на каждом шаге итераций посредством нелинейного преобразования (1). Знание точного решения $x_n = x_n(x_0, n)$ (3) при условии (4) позволяет определить плотность вероятности на n -м шаге итераций в виде:

$$\rho_n(x, n) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \delta(x - \cos(2^n \arccos x_0)) dx_0. \quad (5)$$

В результате последовательных замен переменной в процессе вычисления интеграла (5) получаем следующий результат:

$$\rho_n(x, n) = \frac{\pi/2^n}{\sin(\pi/2^n)} \cos\left(\frac{\arccos x}{2^n} - \frac{\pi}{2^n}\right) \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}. \quad (6)$$

Выражение (6) можно рассматривать как нестационарную плотность распределения на n -м шаге итераций хаотической динамической системы. Из (6) непосредственно следует выражение для инвариантной плотности отображения (2):

$$\rho^*(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(x, n) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}, \quad x \in (-1, 1). \quad (7)$$

Общее представление для оператора Перрона – Фробениуса (ОПФ) для нормированных (на единицу) функций имеет вид [2–5]:

$$P\rho(x) = \int \rho(t)\delta(x - T_2(t))dt. \quad (8)$$

Здесь P – символ оператора ОПФ, задающий правило преобразования вероятностных распределений при нелинейных преобразованиях соответствующих случайных величин. Найдем конкретное выражение для оператора ОПФ для отображения (2), используя определение (1):

$$P\rho(x) = \frac{1}{4\sqrt{(x+1)/2}} (\rho(-\sqrt{(x+1)/2}) + \rho(\sqrt{(x+1)/2})). \quad (9)$$

Проверим одновременно правильность двух расчетов – выражений (7) и (9), подействовав оператором (9) на инвариантную плотность (7). Ожидаемый результат – воспроизводимость (инвариантность) (7). В самом деле, действие ОПФ (9) на функцию (7) приводит к тождеству:

$$P\rho^*(x) = \frac{1}{4\pi\sqrt{(1+x)/2}} \left(\frac{2}{1-(x+1)/2} \right) = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} = \rho^*(x). \quad (10)$$

Энтропия Колмогорова–Синая

Термин энтропия впервые появился в термодинамике как функция состояния термодинамической системы. В хаотической динамике это понятие соотносится с термином «энтропия Колмогорова–Синая» (КС-энтропия). В одномерном случае КС-энтропия совпадает с показателем Ляпунова, определяющим скорость разбегания при итерациях первоначально начальных точек x_0 траекторий $x_n = x_n(x_0, n)$ (в другой трактовке – скорость забывания начальной информации).

При известном траекторном решении показатель Ляпунова (для каждой точки области определения отображения) вычисляется как [5]

$$\Lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{df_n(x_0)}{dx_0} \right|. \quad (11)$$

В нашем случае согласно (3)

$$\Lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \sin(2^n \arccos x_0) \frac{2^n}{\sqrt{1-x_0^2}} \right| = \ln 2. \quad (12)$$

Заключение

В заметке проиллюстрированы два момента, связанные с поведением хаотических динамических систем (детерминированных динамических систем, демонстрирующих хаотическое поведение), которые можно соотносить с термодинамическими понятиями. Речь шла об идентификаторе обратимости (необратимости) динамической системы и соответствующего характера поведения (в известном смысле – об идентификаторе направления развития процесса) системы (хаотическое – не хаотическое) и процессе установления равновесного вероятностного

распределения в системе. Хаотические системы с положительным показателем Ляпунова не являются обратимыми системами. Обратимость возникает лишь в случае, когда показатель Ляпунова имеет нулевое значение, маркируя границу между двумя поведенческими манерами (хаотической и нехаотической) одномерной динамической системы (хаотического отображения), при этом хаос может

сохраняться (при существовании инвариантной меры) и при нулевом показателе Ляпунова. В исчерпывающем виде процессы сходимости в нелинейной системе описываются в рамках математического аппарата, предоставляемого линейным оператором Перрона – Фробениуса; его первая собственная функция является инвариантной плотностью.

Библиографический список

1. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М. : Мир, 2002. 461 с.
2. Аникин В. М., Голубенцев А. Ф. Аналитические модели детерминированного хаоса. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 328 с.
3. Аникин В. М., Ремизов А. С., Аркадакский С. С. Собственные функции и собственные числа оператора Перрона – Фробениуса кусочно-линейных хаотических отображений // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2007. Т. 15, № 2. С. 62 – 75.
4. Lasota A., Mackey M. C. Chaos, Fractals, and Noise: Stochastic Aspects of Dynamics. 2nd Edition. New York: Springer-Verlag 1994. xiv + 472 pp. (Applied Mathematical Sciences, vol. 97).
5. Шустер Г. Детерминированный хаос. Введение. М. : Мир, 1988. 240 с.

THERMODYNAMIC ANALOGIES IN THE THEORY OF DETERMINISTIC CHAOS

V. M. Anikin

Saratov State University

The evolution of probabilistic properties of one-dimensional chaotic mappings under the action of the Perron-Frobenius operator associated with chaotic mappings is compared with thermodynamic concepts of establishing an equilibrium state in an isolated thermodynamic system.

УДК 538.9

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПЛЕНОК: ПОЛУКЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД

О.Е. Глухова, М.М. Слепченко

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского

Глухова Ольга Евгеньевна, д.ф.-м.н., заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики

Слепченко Михаил Михайлович, к.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики

В работе описываются процедура расчета коэффициента поглощения электромагнитных волн углеродных нанопленок на основе элементов тензора динамической проводимости в рамках теории Максвелла на примере гибридной 2D-структуры, образованной слоистым графеном и слоем из одностенных углеродных нанотрубок.

В настоящее время углеродные наноматериалы являются перспективными материалами для создания на их основе элементной базы современной электроники [1]. В частности, большое внимание уделяется изучению оптических свойств углеродных наноструктур, в том числе композитных материалов, с позиции их потенциального использования в устройствах нано- и оптоэлектроники [2,3]. Большое топологическое разнообразие современных углеродных наноструктур требует проведения предварительных расчетов их оптических характеристик. В данной работе описан полуклассический подход, традиционно применяемый при изучении оптических свойств 2D-наноструктур [4]. Суть этого подхода заключается в применении теории Максвелла для описания поведения электромагнитных волн на границе раздела [5] и формализма Кубо-Гринвуда [6] для расчета динамической (оптической) проводимости,

используемой для определения коэффициентов отражения, прохождения, поглощения. Опишем более подробно процедуру расчета коэффициента поглощения.

Получим выражения для коэффициентов прохождения, отражения, поглощения в рамках теории Максвелла для волн двух типов: Н-волны (волны ТЕ-типа) и Е-волны (волны ТМ-типа). Приведем более подробные выкладки для Н-волны единичной амплитуды, падающей на плоскую границу раздела сред, как показано на рис. 1. Падающая волна описывается следующими выражениями для компонент электрического и магнитного полей:

$$E_x = 1 \cdot e^{-jk_1 z}, \quad (1)$$

$$H_y = \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_1}} \cdot e^{-jk_1 z} = \frac{1}{Z_1} \cdot e^{-jk_1 z}, \quad (2)$$

где $Z_1 = \sqrt{\frac{\mu_1}{\varepsilon_1}}$ – волновое сопротивление первой среды, ε_1 и μ_1 – диэлектрическая и магнитная проницаемости первой среды, соответственно, $k_1 = \omega\sqrt{\varepsilon_1\mu_1}$ – коэффициент фазы волны в первой среде.

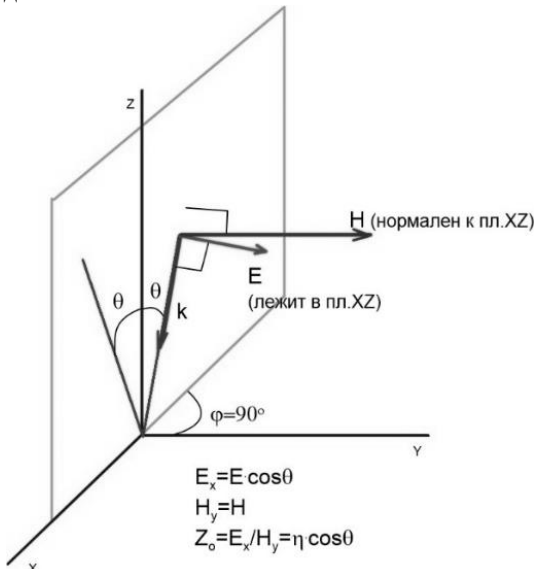


Рис. 1. Случай падения Н-волны на плоскую границу раздела сред.

При переходе через границу раздела волна частично отражается и частично проходит через границу раздела. Компоненты поля отраженной волны определяются выражениями вида

$$E_x^- = R \cdot e^{jk_1 z}, \quad (3)$$

$$H_y^- = -R \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_1}} \cdot e^{jk_1 z} = -\frac{R}{Z_1} \cdot e^{jk_1 z}, \quad (4)$$

где R – коэффициент отражения волны.

Компоненты поля прошедшей волны записываются следующим образом:

$$E_x^+ = T \cdot e^{-jk_2 z}, \quad (5)$$

$$H_y^+ = T \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_2}} \cdot e^{-jk_2 z} = \frac{T}{Z_2} \cdot e^{-jk_2 z}, \quad (6)$$

где T – коэффициент пропускания, $Z_2 = \sqrt{\frac{\mu_2}{\varepsilon_2}}$ – волновое сопротивление второй среды, ε_2 и μ_2 – диэлектрическая и магнитная проницаемости второй среды, соответственно.

Воспользуемся граничными условиями, сформулированными для тангенциальных составляющих электрического и магнитного полей (E_x и H_y). Совместим границу с плоскостью $z=0$. Тогда для компоненты E_x получаем уравнение:

$$1 \cdot e^{-jk_1 z} + R \cdot e^{jk_1 z} = T \cdot e^{-jk_2 z}. \quad (7)$$

Поскольку на границе $z=0$, то

$$1 + R = T, \quad (8)$$

где $E_x^+ = 1 + R$, а $E_x^- = T$.

Для компоненты H_y имеем

$$\frac{1}{Z_1} \cdot e^{-jk_1 z} - \frac{R}{Z_1} \cdot e^{jk_1 z} - \frac{T}{Z_2} \cdot e^{-jk_2 z} = J_x \quad (9)$$

где J_x – поверхностная плотность тока.

Из закона Ома в дифференциальной форме известно, что $J_x = \sigma_{xx} E_x$, где σ_{xx} – компонента x тензора поверхностной проводимости. Будем считать, что электромагнитная волна

распространяется в вакууме. Тогда $Z_1 = Z_2 = Z_0 = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}$, $k_1 = k_2 = k$. При $z=0$ уравнение (9) преобразуется в уравнение вида

$$\frac{1-R-T}{Z_0} = \sigma_{xx} E_x. \quad (10)$$

Принимая во внимание, что $E_x = E_x^+ = 1 + R$ имеем

$$\frac{1-R-T}{Z_0} = \sigma_{xx} (1 + R). \quad (11)$$

Решая уравнение (11) относительно коэффициента R , а затем относительно коэффициента T , получим

$$R = \frac{-Z_0 \sigma_{xx}}{(2 + Z_0 \sigma_{xx})}. \quad (12)$$

$$T = \frac{2}{(2 + Z_0 \sigma_{xx})}. \quad (13)$$

По определению волновое сопротивление для случая р-поляризации есть

$Z_0 = \frac{E_x}{H_y} = \eta \cos \theta$, где $\eta = 120\pi$ – волновое сопротивление вакуума.

Проводя аналогичные рассуждения для случая падения на границу раздела Е-волны единичной амплитуды (рис. 2), приходим к уравнению вида

$$\frac{1-R-T}{Z_0} = \sigma_{yy} (1 + R) \quad (14)$$

где волновое сопротивление для случая s-поляризации есть $Z_0 = -\frac{E_y}{H_x} = \frac{\eta}{\cos \theta}$.

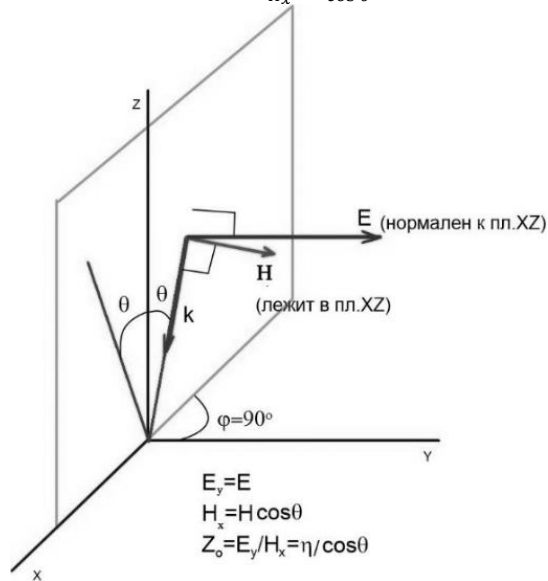


Рис. 2. Случай падения Е-волны на плоскую границу раздела сред.

Расчет коэффициента поглощения A осуществляется по следующей формуле:

$$A = 1 - |R|^2 - |T|^2. \quad (15)$$

Для расчета компонентов тензора динамической (оптической) проводимости использовалась формула Кубо – Гринвуда [6]:

$$\sigma_{\alpha,\beta}(\omega) = \frac{i 2e^2 \hbar^3}{m_e^2 V} \sum_m \sum_{m'} \frac{(f(\varepsilon_{m'}) - f(\varepsilon_m)) \langle m | \frac{\partial}{\partial \alpha} | m' \rangle \langle m' | \frac{\partial}{\partial \beta} | m \rangle}{(\varepsilon_m - \varepsilon_{m'}) \varepsilon_m - \varepsilon_{m'} - \hbar\omega + i\delta/2}, \quad (16)$$

где m и m' – не спин-поляризованные одночастичные состояния с собственными значениями ε_m и $\varepsilon_{m'}$, и соответствующими числами заполнения Ферми – Дирака $f(\varepsilon_{m'})$, $f(\varepsilon_m)$, e – заряд электрона, m_e – масса электрона, V – объем периодического ящика, \hbar – приведенная постоянная

Планка, δ – феноменологический параметр, характеризующий процессы рассеяния электронов.

С помощью описанного выше подхода проводился расчет коэффициента поглощения для гибридных пленок на базе графеновых слоев и ковалентно связанных с ними одностенных углеродных нанотрубок в диапазоне длин волн от 0 до 2 нм. Было рассмотрено четыре топологических

модели пленок с нанотрубками (12,0), (14,0), (16,0), (18,0) при расстоянии между соседними нанотрубками 13 гексагонов (ширина одного гексагона 0.25 нм). На рис. 3 показан пример суперячейки рассчитываемой структуры. На рис. 4 приведены полученные в результате расчета графики коэффициента поглощения пленок четырех топологических типов для Е-волн и Н-волн.

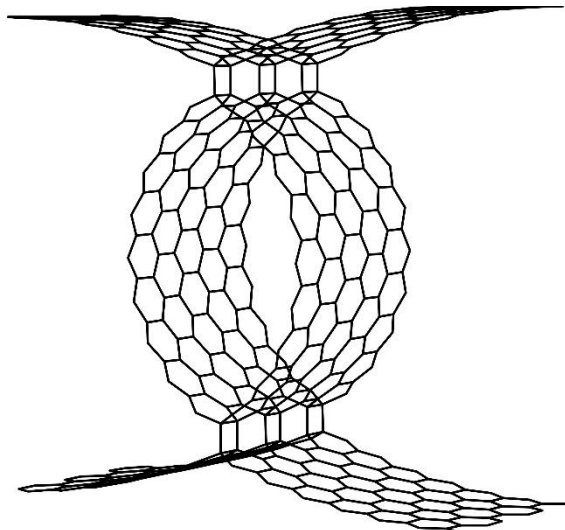


Рис. 3. Атомная структура супер-ячейки гибридной углеродной пленки графен/нанотрубки.

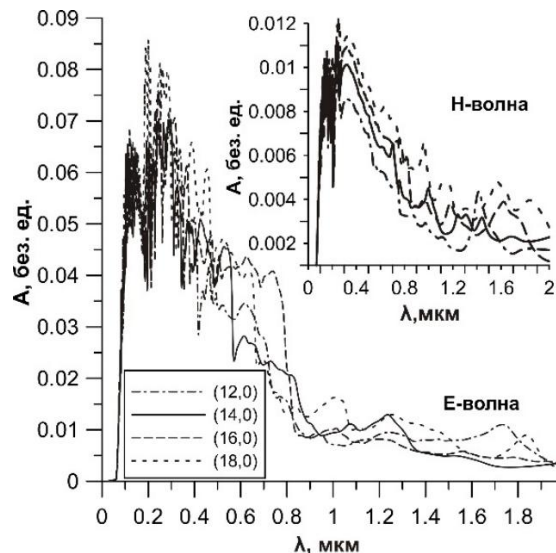


Рис. 4. Зависимость коэффициента поглощения гибридной пленки графен/нанотрубки от длины волны.

Анализ графиков на рис. 4 показывает наличие характерных пиков с высокой интенсивностью для всех рассмотренных топологических моделей композита в УФ-области на длинах волн от 150 до 350 нм (обусловленные графеном) и в оптическом диапазоне от 380 до 740 нм. Интенсивные пики в

ИК-области отсутствуют. Можно отметить, что максимальное поглощение гибридных пленок графен/нанотрубки в сотни раз превышает поглощение обычного графена, следовательно, данный тип пленок более перспективен для использования в оптических наноустройствах.

Библиографический список

1. Peng L.M., Zhang Z., Qiu C. Carbon nanotube digital electronics // *Nat. Electron.* 2019. Vol. 2. P. 499–505.
2. Ojrzynska M., Wroblewska A., Judek J., Malolepszy A., Duzynska A., Zdrojek M. Study of optical properties of graphene flakes and its derivatives in aqueous solutions // *Opt Express.* 2020. Vol. 28. P. 7274–7281.
3. Campo J., Cambré S., Botka B., Obrzut J., Wenseleers W., Fagan J.A. Optical Property Tuning of Single-Wall Carbon Nanotubes by Endohedral Encapsulation of a Wide Variety of Dielectric Molecules // *ACS Nano.* 2021. Vol. 15. P. 2301–2317.
4. Glukhova O.E., Nefedov I.S., Shalin A.S., Slepchenkov M.M. New 2D graphene hybrid composites as an effective base element of optical nanodevices // *Beilstein. J. Nanotechnol.* 2018. Vol. 9. P. 1321–1327.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учебное пособие для вузов: в 10 т. Том 8. Электродинамика сплошных сред; под. ред. Л.П. Питаевского. - 5-е изд., стер. - Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2016. - 656 с
6. Marder M.P. *Condensed Matter Physics.* 2nd ed. // Berlin, Germany: Wiley-VCH, 2010. – 952 p.

CALCULATION OF THE ABSORPTION COEFFICIENT OF CARBON NANOFILMS: A SEMI-CLASSICAL APPROACH

O.E. Glukhova, M.M. Slepchenkov

Saratov State University

The paper describes the procedure for calculating the absorption coefficient of electromagnetic waves of carbon nanofilms based on the elements of the tensor of dynamic conductivity in the framework of Maxwell's theory using the example of a hybrid 2D structure formed by layered graphene and a layer of single-walled carbon nanotubes.

МЕТОДИЧЕСКОЕ УПРОЩЕНИЕ РАСЧЁТА СПЕКТРА ДРОБОВОГО ШУМА
С УЧЁТОМ ПРОЛЁТНЫХ ЭФФЕКТОВ

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, А.С. Шаповалов мл

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Шаповалов Александр Степанович мл., бакалавр

Излагается методическое упрощение расчёта спектра дробового шума диода при конечном значении угла пролёта. Предлагаемое упрощение позволяет находить спектральную плотность шума без предварительного расчёта автокорреляционной функции случайного процесса

Освоение студентами навыков расчёта спектров случайных процессов является одной из важных задач подготовки специалистов естественнонаучного профиля. Проведение указанных расчётов стимулирует привлечение учащихся к научной деятельности, однако нередко они носят довольно сложный характер и вызывают определённые затруднения. В таких случаях большую роль играет выбор оптимальных методов и способов упрощения решения задачи, которые описаны в учебной и научной литературе [1-7]. В этой связи целесообразно обратить особое внимание на известные учебное пособие [1] и монографию [2] Голубенцева А.Ф., Денисова Ю.И. и Минкина Л.М., которые содержат множество практических рекомендаций по методам расчёта.

Данная работа адресуется, прежде всего, студентам младших курсов и ставит своей целью привлечь внимание учащихся к изучению и освоению различных приёмов упрощения расчёта спектров флуктуаций. Краткое описание одного из таких приёмов и составляет её содержание. В качестве примера применения рекомендуемого приёма выбрано вычисление спектра дробовых флуктуаций анодного тока плоского диода при конечном угле пролёта электронов [1,2,4,5].

При классическом подходе к расчёту спектра флуктуаций анодного тока диода предполагается, что последовательность импульсов тока, наводимых в анодной цепи, представляет собой пуассоновский поток событий, для которого справедлива теорема Кемпбелла [4,5]. Указанная теорема даёт интегральную связь математического ожидания, дисперсии и автокорреляционной функции тока со средним числом электронов, испускаемых за единицу времени λ , и функцией $\Phi(t)$ (здесь t – время) формы импульса [5], наводимого одиночным электроном. Для автокорреляционной функции тока $R_i(\tau)$ эта связь записывается так:

$$R_i(\tau) = \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t)\Phi(t+\tau)dt, \quad (1)$$

где τ – разность моментов времени.

Двухсторонняя спектральная плотность флуктуаций анодного тока определяется как преобразование Фурье для автокорреляционной функции тока

$$S_i(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R_i(\tau) e^{-j\omega\tau} d\tau, \quad (2)$$

где ω круговая частота.

Таким образом, для определения спектра необходимо вначале найти автокорреляционную функцию. Однако даже в случае плоского диода, когда функция формы импульса имеет простой вид, вычисление интеграла (1) представляет достаточно сложную и громоздкую процедуру. Кроме того, в ряде случаев постановка задачи не требует вычисления автокорреляционной функции. В таких случаях для расчёта спектра целесообразно использовать более простое соотношение, которое является следствием предыдущих. Действительно, если в выражение (2) подставить соотношение (1), то спектральная плотность флуктуаций анодного тока $S_i(\omega)$ окажется выраженной через спектральную плотность $G(\omega)$ детерминированной функции $\Phi(t)$, описывающей форму импульса одиночного электрона [1,2]:

$$S_i(\omega) = \frac{\lambda}{2\pi} |G(\omega)|^2, \quad (3)$$

где

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(t) e^{-j\omega t} dt, \quad (4)$$

$G(\omega)$ – спектральная плотность функции формы.

Как правило, расчёт спектральной плотности $S_i(\omega)$ вторым способом, то есть на основе выражений (3) и (4), оказывается более коротким и простым, чем при использовании соотношения (2). Для иллюстрации этого факта воспользуемся выражениями (3) и (4) для вычисления спектральной плотности флуктуаций анодного тока плоского диода при конечном значении угла пролёта электронов и отсутствии пространственного заряда [1,2]. В этом случае элементарный расчёт даёт следующее выражение для функции формы

$$\Phi(t) = \begin{cases} \frac{2e}{\tau_a^2} t & \text{при } 0 \leq t \leq \tau_a, \\ 0 & \text{при } t < 0, \quad t > \tau_a \end{cases} \quad (5)$$

Спектральная плотность этой функции вычисляется не сложно и равна

$$G(\omega) = \frac{2e}{\tau_a^2} \left[\frac{1}{\omega^2} (e^{-j\omega\tau_a} - 1) + j \frac{\tau_a}{\omega} e^{-j\omega\tau_a} \right]. \quad (6) \quad \beta(\omega) = \frac{4}{(\omega\tau_a)^4} \left[(\omega\tau_a)^2 + 2(1 - \cos\omega\tau_a - \omega\tau_a \sin\omega\tau_a) \right]$$

Подстановка выражения (6) в равенство (3) приводит к окончательному результату для спектральной плотности флуктуаций анодного тока

$$S_i(\omega) = \frac{2eI_0}{\pi(\omega\tau_a)^4} \left[(\omega\tau_a)^2 + 2(1 - \cos\omega\tau_a - \omega\tau_a \sin\omega\tau_a) \right], \quad (7)$$

где $I_0 = e\lambda$ – постоянная составляющая тока (математическое ожидание).

Изложенный способ расчёта спектра использовался авторами работ [1,2]. Аналогичный вывод, полученный первым способом, когда предварительно рассчитывается автокорреляционная функция тока, представлен в работе [4]. Сравнение расчётов показывает, что при первом способе затрачивается значительно больше времени, чем при втором.

Заметим, что для анализа частотной зависимости конечного результата (7) его удобно представить так:

$$S_i(\omega) = \frac{eI_0}{2\pi} \beta(\omega), \quad (8)$$

где

Нетрудно показать, что в пределе при $\omega\tau_a \rightarrow 0$ частотно-зависимый множитель $\beta(\omega)$ равен 1, и выражения (7),(8) дают хорошо известную формулу Шоттки [1-3,6], записанную через двухстороннюю спектральную плотность,

$$S_i(\omega) = \frac{eI_0}{2\pi},$$

В заключение отметим, что статистические расчёты спектров флуктуаций довольно сложны даже при оптимальном выборе методики и требуют повышенного внимания при их проведении [1,2]. Кроме того следует иметь в виду, что в работах различных авторов часто используются различные определения спектральной плотности, отличающиеся постоянными множителями. Это необходимо учитывать при сопоставлении полученных результатов с данными других авторов. Описанный приём упрощения расчётов спектров может успешно использоваться в различных областях физики [8-14].

Авторы выражают глубокую благодарность Буганковой Наталии Сергеевне за помощь в работе над статьёй и ценные замечания при её обсуждении.

Библиографический список

1. Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И., Минкин Л.М. Введение в статистическую электронику.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1990.– 126 с.
2. Голубенцев А.Ф., Минкин Л.М. Шумы и флуктуации в электронных потоках. - Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1982.– 124 с.
3. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983.– 90 с.
4. Давенпорт В.Б. и Рут В.Л. Введение в теорию случайных сигналов и шумов. – М.: Издательство иностранной литературы, 1960. –468 с.
5. Букингем М. Шумы в электронных приборах и системах. М.: Издательство «Мир», 1986.– 399 с.
6. Шумы в электронных приборах. Под редакцией Смудлина Л.Д. и Хауса Г.А. М.-Л.: Издательство «Энергия», 1964.– 494 с.
7. Шаповалов А.С., Шаповалова И.А. О методике применения теорем Кемпбелла для моделирования физических процессов. // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2009. – В. 16. – С. 14-15.
8. А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл. Линейная модель неоднородного потенциального барьера и расчётные выражения для уровня аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С.24-28.
9. А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл. Эффект подавления аномального дробового шума линейной модели неоднородного потенциального барьера // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С. 28-34.
10. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Универсальная статистическая модель неоднородного потенциального барьера в режиме генерации аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 11-14.
11. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Шаповалов А.С. мл. Методические аспекты общей теории аномального дробового шума и её практического применения // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ.– 2020. – В. 27. – С. 6-9.
12. 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 СГУ.– 2016. – Вып. 20. – С. 41-46.
13. Шаповалов А.С., Инкин М.Г. Спектр дробового шума на неоднородном потенциальном барьере Релеевского типа // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 41-44.
14. Игнатъев А.А., Куликов М.Н., Стальмахов В.С., Шаповалов А.С. Шумовые свойства ламп обратной волны со скрещенными полями. – Саратов.: Изд-во СГУ.– 1983. – 96 с

METHODICAL SIMPLIFICATION OF THE SHOT NOISE SPECTRUM CALCULATION TAKING INTO ACCOUNT TRANSIT EFFECTS

A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, A.S. Shapovalov Jr
Saratov National Research State University

A methodical simplification of the calculation of the shot noise spectrum of a diode at a finite value of the transit angle is presented. The proposed simplification makes it possible to find the spectral noise density without preliminary calculation of the autocorrelation function of a random process.

УДК 621.373.522

МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ТЕОРИИ
ФЛУКТУАЦИЙ СИГНАЛА МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, А.С. Шаповалов мл

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Шаповалов Александр Степанович мл, бакалавр

На примере расчёта коэффициентов коллективной трансформации взаимных амплитудно-фазовых спектров обсуждаются общие методические аспекты теории флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ. Определяются уравнения связи коэффициентов трансформации и их зависимость от стратегии настройки, особенностей электродинамической системы и числа диодов генератора. Отличительной чертой расчёта является учёт корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников.

Процессы трансформации шумов в многодиодном генераторе СВЧ (сумматоре мощности диодных модулей) и структура спектра выходного сигнала представляют значительный теоретический интерес [1-13]. Важными характеристиками процессов трансформации собственных шумов диодных модулей в шумы выходного сигнала являются коэффициенты коллективной трансформации флуктуаций [2,3]. Система этих коэффициентов и уравнений их связи составляют основу теории флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ, которая была опубликована в виде ряда статей и внедрена в учебный процесс в рамках соответствующего специального курса. Однако практика её использования в учебном процессе показывает, что сложные математические выкладки теории нередко вызывают у студентов определённые затруднения, в том числе затруднения в понимании и объяснении физического смысла получаемых результатов и выводов. В связи с этим возникает необходимость в дополнении материалов указанных статей соответствующими методическими указаниями.

Данная работа, по существу, является методическим обсуждением постановки задачи и содержания статьи [2], а также дополнительных сведений о коэффициентах трансформации флуктуаций и уравнениях их связи. Основная цель работы заключается в том, чтобы на конкретном примере показать, как именно можно сформировать методические указания по статьям указанного направления при минимальных затратах времени.

В качестве примера выбран расчёт величины и уравнений связи коэффициентов коллективной трансформации тех составляющих взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций, которые возникают вследствие корреляции квадратурных компонент шума собственных источников (диодов)

[2]. Естественно, для понимания логики рекомендуемых указаний в работе используются элементы расчёта из статьи [2].

С целью конкретизации и обоснования актуальности поставленной задачи обратимся к выражению для взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций генерируемого сигнала.

Структура рассчитанного в [1,2] вклада квадратурных компонент высокочастотного шума диодов в полный взаимный спектр амплитудно-фазовых флуктуаций, которые в общем случае обуславливаются и высокочастотными и низкочастотными собственными шумами диодов [12], имеет вид

$$S_{\alpha\phi hf}(\Omega) = S_{\alpha\phi hf}^{ind}(\Omega) + \operatorname{Re} S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega) + j \operatorname{Im} S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega) \quad (1)$$

Здесь $j = \sqrt{-1}$; $S_{\alpha\phi hf}(\Omega)$ - составляющая полного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций, обусловленная квадратурными компонентами высокочастотного шума диодов; $S_{\alpha\phi hf}^{ind}(\Omega)$ - составляющая полного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций, обусловленная квадратурными компонентами высокочастотного шума диодов, но не зависящая от корреляции квадратурных компонент (в дальнейшем для краткости будем называть её просто независимой составляющей спектра); $S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega)$ - составляющая полного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций, обусловленная квадратурными компонентами высокочастотного шума диодов и зависящая от корреляции квадратурных компонент (в дальнейшем для краткости будем называть её просто корреляционной составляющей спектра); Ω - круговая частота флуктуаций. Индексы у символов спектральной плотности означают: α - флуктуации амплитуды, ϕ - флуктуации фазы, hf -

высокочастотный характер источника шума, *ind* – независимая составляющая спектра, *cor* – корреляционная составляющая.

Вследствие того, что корреляционная составляющая взаимного спектра имеет комплексный характер, составляющая полного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций $S_{\alpha\phi hf}(\Omega)$, обусловленная квадратурными компонентами высокочастотного шума диодов, также будет комплексной. Естественно, что действительная часть корреляционной составляющей спектра вносит вклад в действительную часть полного спектра, а мнимая часть корреляционной составляющей спектра вносит вклад в мнимую часть полного спектра.

Из выражения (1) следует, что для описания процессов трансформации флуктуаций необходимо ввести три коэффициента, характеризующих трансформацию спектров $S_{\alpha\phi hf}^{ind}(\Omega)$, $\text{Re } S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega)$ и $\text{Im } S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega)$. Аналогичная ситуация возникает и при исследовании трансформации взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций. В этом случае также возникает необходимость введения в рассмотрение трёх коэффициентов трансформации, так как структура полного взаимного спектр амплитудно-частотных флуктуаций описывается уравнением, подобном уравнению (1).

В общем случае отдельные коэффициенты трансформации связаны между собой определёнными уравнениями связи. Так, например, строгий математический расчёт показывает [2], что коэффициенты трансформации взаимных спектров $S_{\alpha\phi hf}^{ind}(\Omega)$ и $\text{Re } S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega)$ связаны соотношением, выражающим равенство этих коэффициентов. Объяснение этой закономерности носит элементарный характер. Действительно, рассматриваемая эквивалентная схема многодиодного генератора [5,6] преобразует и действительную часть взаимного спектра, и отдельные слагаемые действительной части, по одному и тому же закону.

Поскольку система коэффициентов трансформации [3] входит в основу теории флуктуаций сигнала многодиодного генератора уточнение и дополнение этой системы новыми коэффициентами с целью достижения её полноты представляет актуальную проблему.

Как уже указывалось, конкретная задача, поставленная перед данной статьёй и работой [2], заключается в исследовании влияния на спектр выходного сигнала именно корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников и определении соответствующих коэффициентов коллективной трансформации именно корреляционных составляющих спектра $S_{\alpha\phi hf}^{cor}(\Omega)$. Поэтому в дальнейшем независимая составляющая спектра $S_{\alpha\phi hf}^{ind}(\Omega)$ нас интересовать

не будет. Она была рассчитана в работе [10] и была использована для определения коэффициента коллективной трансформации амплитудно-фазовых флуктуаций при отсутствии корреляции квадратурных компонент высокочастотного шума внутренних источников. Основным интерес представляют только корреляционные составляющие спектра.

Как известно [1,2], вид корреляционной составляющей спектра зависит от стратегии настройки генератора в процессе увеличения числа диодов. При первом способе настройки генератора изменяется связь суммирующего резонатора с нагрузкой (подстройка нагрузки) [5,6,11]. При втором способе настройки изменяется связь каждого диодного модуля с суммирующим резонатором (подстройка диодных модулей) [5,6,11].

Найдём и проанализируем коэффициенты коллективной трансформации амплитудно-фазовых флуктуаций при первом способе настройки генератора.

Если диоды идентичны, их собственные шумы не коррелированы, а трансформаторы связи идеальные, то при первом способе настройки генератора действительная и мнимая части корреляционных составляющих взаимного спектра записываются так [1]:

$$\text{Re } S_{\alpha\phi hf N}^{cor}(\Omega) = -\frac{N^2(q_\phi + 1)S_{uk1}(\Omega)}{(q_\phi + N)^3 I_1^2(X_1')^2} \frac{p_1}{\Omega(a^2 p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (2)$$

$$\text{Im } S_{\alpha\phi hf N}^{cor}(\Omega) = -\frac{NS_{uk1}(\Omega)}{(q_\phi + N)^2 I_1^2(X_1')^2} \frac{1}{(a^2 p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (3)$$

где $a = \frac{N(q_\phi + 1)}{q_\phi + N}$.

Выражения (2) и (3) приведены в параметрах работ [1,2]. Для удобства использования данной работы повторим их определение и физический смысл [1]: N – число диодов; a – коэффициент трансформации прочности предельного цикла и неизохронности генератора при переходе от однодиодной системы к многодиодной; индексы 1 и N у символов означают, что они относятся соответственно к однодиодному или N -диодному генератору; $q_\phi = X_p'/X_1'$ – параметр фиксирующей способности контура, равный отношению фиксирующей способности суммирующего резонатора X_p' к пересчитанной в контур суммирующего резонатора (внесенной) фиксирующей способности диодного модуля X_1' в однодиодном генераторе [5,6]; штрих над символами обозначает производную по частоте; $S_{uk1}(\Omega)$ – пересчитанная в контур суммирующего резонатора мнимая часть $S_u(\omega - \Omega) - S_u(\omega + \Omega)$ взаимной спектральной плотности квадратурных компонент напряжения собственных шумов диода; ω – несущая частота; $S_u(\omega)$ – спектральная плотность напряжения собственных шумов диода; I_1 – амплитуда СВЧ тока в контуре суммирующего резонатора однодиодного генератора; p_1 – прочность предельного цикла однодиодного генератора [10]; формулы связи p_1 с импедансными характеристиками диодов приведены в [10].

При $N=1$ выражения (2),(3) описывают корреляционные составляющие взаимных амплитудно-фазовых спектров сигнала однодиодного генератора

$$\operatorname{Re} S_{\alpha\phi f 1}^{cor}(\Omega) = -\frac{S_{uk1}(\Omega)}{(q_{\phi} + 1)^2 I_1^2(X_1')^2} \frac{p_1}{\Omega(p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (4)$$

$$\operatorname{Im} S_{\alpha\phi f 1}^{cor}(\Omega) = -\frac{S_{uk1}(\Omega)}{(q_{\phi} + 1)^2 I_1^2(X_1')^2} \frac{1}{(p_1^2 + \Omega^2)}. \quad (5)$$

Соотношения (4),(5) представляют самостоятельный интерес, так как могут быть востребованы не только для решения поставленной задачи, но и для исследования шумовых свойств однодиодных генераторов соответствующей конструкции.

Определим коэффициенты коллективной трансформации действительной $G_{r\alpha\phi f}^{cor}$ и мнимой $G_{i\alpha\phi f}^{cor}$ частей корреляционной составляющей амплитудно-фазового спектра флуктуаций следующим образом [2]:

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = \frac{\operatorname{Re} S_{\alpha\phi f N}^{cor}(\Omega)}{\operatorname{Re} S_{\alpha\phi f 1}^{cor}(\Omega)}, \quad (6)$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = \frac{\operatorname{Im} S_{\alpha\phi f N}^{cor}(\Omega)}{\operatorname{Im} S_{\alpha\phi f 1}^{cor}(\Omega)}. \quad (7)$$

Подстановка соотношений (2) - (5) в равенства (6) и (7) приводит к следующим выражениям для коэффициентов коллективной трансформации при первом способе настройки генератора:

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{a^2 p_1^2 + \Omega^2}, \quad (8)$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{a^2 p_1^2 + \Omega^2} \quad (9)$$

и уравнению связи

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = a G_{i\alpha\phi f}^{cor}. \quad (10)$$

Для сравнения приведём коэффициент коллективной трансформации независимой составляющей взаимного спектра, рассчитанный в [10],

$$G_{\alpha\phi f}^{ind} = \frac{S_{\alpha\phi f N}^{ind}}{S_{\alpha\phi f 1}^{ind}} = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{a^2 p_1^2 + \Omega^2}. \quad (11)$$

Сравнение приведённых коэффициентов коллективной трансформации $G_{r\alpha\phi f}^{cor}$, $G_{i\alpha\phi f}^{cor}$, $G_{\alpha\phi f}^{ind}$ позволяет сделать два важных вывода.

Во-первых, у всех трёх коэффициентов трансформации множители, зависящие от частоты, одинаковы.

Во вторых, указанные коэффициенты подчиняются трём дополнительным уравнениям связи следующего вида [3]:

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = G_{\alpha\phi f}^{ind}, \quad (12)$$

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = G_{i\alpha\phi f}^{cor}, \quad (13)$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = G_{r\alpha\phi f}^{cor}, \quad (14)$$

где $G_{r\alpha\phi f}^{cor}$ и $G_{i\alpha\phi f}^{cor}$ - коэффициенты коллективной трансформации соответственно действительной и мнимой частей корреляционной составляющей взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций [1-3].

Происхождение уравнения связи (12) уже обсуждалось выше. Студентам, изучающим теорию флуктуаций многодиодного генератора, можно рекомендовать объяснить причины появления уравнений связи (13) и (14) самостоятельно.

Проведём краткий анализ влияния особенностей электродинамической системы генератора (величины q_{ϕ}) на коэффициенты коллективной трансформации корреляционных составляющих взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций.

Если параметр q_{ϕ} фиксирующей способности колебательного контура генератора мал и $q_{\phi} \ll 1$, то коэффициент трансформации прочности предельного цикла $a \approx 1$ и выражения (8),(9) для коэффициентов трансформации корреляционных составляющих спектра принимают одинаковый вид

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = \frac{1}{N}, \quad (15)$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = \frac{1}{N}, \quad (16)$$

а уравнение связи совпадает с выражением (14).

На всех частотах флуктуаций уровень корреляционных составляющих взаимной спектральной плотности флуктуаций сигнала многодиодного генератора в N раз ниже, чем в однодиодной системе.

Если параметр q_{ϕ} фиксирующей способности контура достаточно велик и $q_{\phi} \gg 1$, то коэффициент трансформации прочности предельного цикла $a \approx N$, и выражения (8),(9) для коэффициентов коллективной трансформации корреляционных составляющих спектра принимают вид

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = N^2 \frac{p_1^2 + \Omega^2}{N^2 p_1^2 + \Omega^2}, \quad (17)$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = N \frac{p_1^2 + \Omega^2}{N^2 p_1^2 + \Omega^2}, \quad (18)$$

а уравнение связи выглядит так:

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = N G_{i\alpha\phi f}^{cor}. \quad (19)$$

В этом случае зависимость коэффициентов от числа диодов остаётся сложной. На низких частотах флуктуаций, когда $\Omega \ll N p_1$, выражения (17) и (18) принимают вид

$$G_{r\alpha\phi f}^{cor} = 1,$$

$$G_{i\alpha\phi f}^{cor} = \frac{1}{N}.$$

На высоких частотах флуктуаций, когда $\Omega \gg Np_1$, из выражений (17) и (18) следует

$$G_{\text{raphf}}^{\text{cor}} = N^2,$$

$$G_{\text{iaophf}}^{\text{cor}} = N.$$

Перейдём к определению коэффициентов коллективной трансформации амплитудно-фазовых флуктуаций при втором способе настройки генератора (подстройка диодных модулей) [5].

Если настройка генератора в процессе увеличения числа диодов осуществляется изменением связи диодных модулей с суммирующим резонатором, то, как показано в [1], действительную и мнимую части корреляционных составляющих взаимного спектра амплитудно-фазовых флуктуаций сигнала многодиодного генератора можно записать так:

$$\text{Re } S_{\text{aophfN}}^{\text{cor}}(\Omega) = \frac{1}{N} \frac{S_{\text{ukl}}(\Omega)}{(q_{\phi} + 1)^2 I_1^2(X_1')^2} \frac{p_1}{\Omega(p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (20)$$

$$\text{Im } S_{\text{aophfN}}^{\text{cor}}(\Omega) = -\frac{1}{N} \frac{S_{\text{ukl}}(\Omega)}{(q_{\phi} + 1)^2 I_1^2(X_1')^2} \frac{1}{(p_1^2 + \Omega^2)}. \quad (21)$$

При $N=1$, эти выражения описывают соответствующие величины для однодиодного генератора и, естественно, совпадают с равенствами (4),(5).

Деление выражений (20),(21) на равенства (4),(5) приводит к таким соотношениям для коэффициентов коллективной трансформации корреляционных составляющих взаимных спектров амплитудно-фазовых флуктуаций

$$G_{\text{raphf}}^{\text{cor}} = G_{\text{iaophf}}^{\text{cor}} = \frac{1}{N}$$

При втором способе настройки генератора коэффициенты коллективной трансформации

действительной и мнимой частей корреляционных составляющих взаимного спектра равны между собой и совпадают с аналогичными величинами, рассчитанными для первого способа настройки при условии, что $q_{\phi} \ll 1$. В указанных случаях вклад эффекта корреляции квадратурных компонент шума источников в полный взаимный спектр в многодиодном генераторе в N меньше, чем в однодиодном.

Отмеченные особенности зависимости коэффициентов коллективной трансформации от стратегии настройки генератора и фиксирующей способности его контура необходимо учитывать при разработке многодиодных автоколебательных систем и анализе результатов экспериментов.

Рассчитанные коэффициенты коллективной трансформации флуктуаций существенно дополняют известную систему подобных величин [3] и расширяют возможности её применения. С учётом рассмотренных частных случаев число уравнений связи коэффициентов трансформации становится довольно большим. Студентам предлагается самостоятельно выбрать те уравнения, которые представляют наибольший практический интерес.

В заключение отметим, что использованная методика анализа структуры и физической природы спектров флуктуаций может успешно применяться при решении аналогичных задач в различных областях физики [14-21]. Участие студентов в подобных расчётах способствует закреплению полученных знаний и развитию навыков научной работы.

Авторы выражают глубокую благодарность Буганковой Натальи Сергеевне за помощь в работе над статьёй и ценные замечания при её обсуждении.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Влияние корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников на взаимный спектр амплитудно-фазовых флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 32-36.
2. А.С. Шаповалов, С.А. Шаповалов, А.С. Шаповалов мл. Коэффициенты коллективной трансформации амплитудно-фазовых флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ, учитывающие влияние корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2020. – В. 27. – С. 32-35.
3. Шаповалов А.С., Машников В.В., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Система коэффициентов коллективной трансформации флуктуаций многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2010. – В. 17. – С. 33-38.
4. Шаповалов А.С. Спектры флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ // Гетеромагнитная микроэлектроника. 2017. – Вып. 22. - С. 16-26.
5. 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.
6. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодных СВЧ генераторов с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов. Изд-во СГУ. – 1997. – В. 3. – С. 47-70.
7. 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.
8. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С. Способ улучшения шумовых характеристик диодных СВЧ-генераторов, содержащих линию передачи // Электронная техника. Сер. 1. СВЧ-техника. - 1997. - В. 1. - С. 32-33.

9. 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.
10. Шаповалов А.С., Минкин Л.М. Взаимный спектр флуктуаций амплитуды и фазы сигнала многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2017. – В. 24. – С. 30-32.
11. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. Влияние корреляции квадратурных компонент шума внутренних источников на взаимный спектр амплитудно-частотных флуктуаций сигнала многодиодного генератора СВЧ // Вопросы прикладной физики. Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2008. – В. 15. – С. 37-40.
12. Шаповалов А.С. Исследование влияния сверхвысокочастотных и низкочастотных источников флуктуаций на шумовые параметры твердотельного генератора // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 1989. – В. 2. – С. 3-19.
13. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодных СВЧ генераторов с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 1997. – В. 3. – С. 67-70.
14. Игнатьев А.А., Куликов М.Н., Стальмахов В.С., Шаповалов А.С. Шумовые свойства ламп обратной волны со скрещенными полями. – Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983. – 96 с.
15. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
16. Minkin L. Shapovalov A.S. Indoor Radon Entry: 30 Years Later. // Iranian Journal of Radiation Research. – Summer 2008. – V. 6, № 1. P. 159-164.
17. 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.
18. Minkin L., Shapovalov A.S. Heat of Transport of Air in Clay. // Radiation Protection Dosimetry. - 2007.- V. 123, № 2, - P. 221-225.
19. 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.
20. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Многоуровневая дискретная модель неоднородного эмиттера и максимальный уровень аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2016. – В. 23. – С. 39-41.
21. Инкин М.Г., Мироненко К.В., Шаповалов А.С. Частотные характеристики аномального дробового шума для многоуровневой дискретной модели неоднородного эмиттера // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2016. – В. 23. – С. 42-44.

METHODICAL ASPECTS OF THE THEORY OF SIGNAL FLUCTUATIONS
OF A MULTI-DIODE MICROWAVE GENERATOR
A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, A.S. Shapovalov Jr
Saratov National Research State University

Using the example of calculating the coefficients of collective transformation of mutual amplitude-phase spectra, the general methodical aspects of the theory of signal fluctuations of a multi-diode microwave generator are discussed. The equations for the connection of the transformation ratios and their dependence on the tuning strategy, the features of the electrodynamic system and the number of generator diodes are determined. A distinctive feature of the calculation is taking into account the correlation of the quadrature noise components of internal sources.

УДК 538.9

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИГРОВЫХ СИСТЕМ UNITY И SOURCE
ДЛЯ АНИМАЦИОННОГО СОПРОВОЖДЕНИЯ
КУРСА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

В.Л. Дербов, Н.А. Карагодов

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н. Г. Чернышевского

Владимир Леонардович Дербов, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Карагодов Никита Алексеевич, студент 4-го курса
бакалавриата института физики СГУ

Предпринята попытка использования игровых программных средств Unity и Source для анимационного сопровождения учебного курса теоретической механики. В качестве примера выбрано свободное вращение твердого тела. Обсуждается применяемое в игровых системах описание вращений кватернионами в сравнении с традиционными углами Эйлера. Созданные анимации свободного вращения твердого тела показывают, что Source, в отличие от Unity, правильно описывает неустойчивость вращения асимметричного волчка вокруг оси со средним моментом инерции (эффект Джанибекова).

Теоретическая механика – обязательная дисциплина в учебных планах подготовки бакалавров направления «Физика». Помимо того, что данная дисциплина имеет важнейшее прикладное значение, она является и основой всего цикла теоретической физики. Теоретическую физику отличает дедуктивный подход и математическая строгость. К сожалению, обратной стороной этих достоинств является недостаток наглядности, особенно заметный при чтении классических учебников, где иллюстрации результатов занимают совсем незначительный объем по сравнению с описанием их математического вывода.

Наиболее сложным разделом теоретической механики является механика движения твердого тела. Принципиальная трехмерность задач этого раздела, необходимость задавать тензор инерции в системе собственных осей тела, которая не является инерциальной, сложность введения обобщенных координат вращательного движения, тот факт, что кажущаяся простой угловая скорость не является полной производной от какой-либо векторной величины, которая могла бы считаться вращательной координатой – таков далеко не полный список вопросов, вызывающих определенные трудности у студентов, изучающих этот раздел впервые. Многие из этих трудностей усугубляются при углубленном освоении данной дисциплины в магистратуре.

Как в классических учебниках по теоретической механике [1], так и в более поздних книгах [2], с учетом техники того времени, максимум наглядности представлено графиками для частных случаев динамического поведения, которые приводятся далеко не для всего материала, зачастую сложны для восприятия и малоинформативны. В итоге, все, что связано с визуализацией ложиться на плечи преподавателя, который либо пытается показать что-то на доске, используя все те же графики и схемы, либо демонстрирует готовые иллюстрации из книг и Интернета в компьютерной презентации. Возникает острая потребность в обеспечении курса теоретической механики анимированными демонстрациями, а современные средства вычислительной техники и программного обеспечения делают удовлетворение этой потребности вполне возможным.

Наиболее близким к нашим целям и задачам является разработанный проф. Е.И. Бутиковым учебно-методический материал «Free rotation of an axially symmetrical body» (Свободное вращение аксиально-симметричного тела) [3]. На странице приводится сжатое изложение теоретического материала по механике симметричного волчка и приводится ссылка на Java-апплет, обеспечивающий возможность визуализировать движение волчка при различных заданных параметрах, останавливать и снова запускать анимацию для обеспечения наглядности и проведения количественных измерений.

Указанные Java-апплеты разработаны с помощью ресурса Easy Java/Javascript Simulations

(EJS) [4], предоставляющего свободный доступ к написанному на Java программному пакету. Этот пакет предназначен для того, чтобы дать возможность авторам, не являющимся программистами, создавать интерактивные симуляции на Java или JavaScript, главным образом, для образовательных целей. EJS создан Франсиско Эскуембре (Francisco Esquemebre, [5]) и является составной частью проекта Open Source Physics [6].

К сожалению, доступ к указанным ресурсам в настоящее время затруднен рядом ограничений, что не позволило авторам настоящей работы запустить апплеты с помощью доступного им математического обеспечения. Поэтому данный материал вряд ли может быть рекомендован к широкому использованию в учебном процессе, в частности, в дисплейных классах СГУ.

Указанные ограничения хотя и не носят принципиального характера, тем не менее усиливают потребность в разработке альтернативных инструментов для наглядного сопровождения учебного материала по теоретической механике твердого тела с применением широко доступных программных инструментов. Вариантов довольно много, можно было использовать уже завоевавшие прочное положение в научном мире инструменты, например, COMSOL или Mathematica. Однако, в последние десятилетия бурно развивается еще целая индустрия анимации сложных движений, предназначенная для создания компьютерных игр. Богатые возможности имитационного моделирования на базе игровых платформ очевидны и актуальность попытки их использования для создания учебных иллюстративных материалов не вызывает сомнений.

Авторы данной работы выбрали для этой цели Unity – кроссплатформенную среду разработки компьютерных игр (игровой движок) с частично открытым кодом [15], разработанную компанией Unity Technologies (США), впервые анонсированную и выпущенную в июне 2005 года на Всемирной конференции разработчиков Apple Inc. в качестве эксклюзивного игрового движка для MacOS X. С тех пор движок постепенно расширялся для поддержки различных настольных, мобильных, консольных платформ и платформ виртуальной реальности. Unity можно использовать для создания трехмерных (3D) и двумерных (2D) игр, а также интерактивных симуляций и других возможностей. Этот движок нашел применение в отраслях, не связанных с видеоиграми, таких как кино [17], автомобилестроение [18], архитектура, машиностроение, строительство и вооруженные силы США [7].

Главным достоинством Unity является визуальная среда обработки, которая позволяет удобно взаимодействовать с объектами на игровой сцене, что снижает порог вхождения в моделирование для начинающего пользователя. В нем также присутствует межплатформенная поддержка, что очень важно для разработчика и расширяет аудиторию пользователей. Сам Unity, написан на C# и C++, однако модуль, который

отвечает за 3D физику, взят от PhysX, который был разработан Nvidia. На данный момент это самый популярный физический движок с открытым кодом [19], который разработан на C++ и на C. Для более основательного знакомства с функционалом Unity отсылаем читателя к книге [20].

При использовании Unity для иллюстрации в учебном процессе возникают естественные вопросы. Имеющийся функционал позволяет внешне правдоподобно имитировать сложные движения, например, движение тела, брошенного произвольным образом. Насколько это правдоподобное движение отвечает законам механики? Выполняются ли при этом законы сохранения? Насколько пригоден имеющийся функционал, а если нет - насколько сложно его модифицировать, чтобы приспособить анимацию для целей количественного анализа, сделать из простого наблюдения исследовательскую задачу для практикума. Например, указывать положение главных осей, вектор угловой скорости и момента импульса, останавливать анимацию для измерения углов ориентации и снова запускать ее и так далее. Попытка ответить на эти вопросы предпринята в данной работе. В литературе нам не удалось найти примеров использования игровых пакетов в учебном процессе.

Для более глубокого понимания того, как механика твердого тела отражается в анимации, необходимо расширение стандартных представлений о характеристике поворотов. Как в уже ставших классическими учебниках по теоретической механике [1], так и в более поздних книгах [2] описание вращательных степеней свободы твердого тела производится с помощью углов Эйлера. Более современные учебники, например, [8], уже затрагивают такие альтернативные подходы, как задание ориентации

твердого тела с помощью кватернионов и кватернионное сложение поворотов.

Кватернионы, впервые введенные Гамильтоном [9], представляют собой пары из скаляра и вектора трёхмерного пространства со специальным образом введенными операциями сложения и умножения. Они давно используются для описания положения твердого тела как альтернатива классическим углам Эйлера φ, θ, ψ (см., например, монографию [10] и ссылки в ней). Однако, особенно интенсивное применение они нашли с развитием компьютерного имитационного моделирования в технике (например, контроль ориентации подводных, летательных и космических аппаратов) и бурно развивающейся индустрии компьютерной анимации (см., например, [11]). Одним из примеров современного учебника по теоретической механике, где последовательно излагается описание кинематики твердого тела в терминах кватернионов, является размещенная в свободном интернет-доступе книга Н.И. Амелькина [12].

Одной из причин использования кватернионов, а не углов Эйлера, при анимации поворотов оказывается вырождение последних при $\theta=0, \pi$, когда определенными являются лишь $\varphi \pm \psi$, соответственно (gimbal lock). Тем не менее, поскольку параметризация в углах Эйлера является традиционной, наглядной и привычной для большинства пользователей, в Unity предусмотрено также задание поворотов углами Эйлера. Это открывает возможность наглядно сравнить кватернионы и углы Эйлера по качеству интерполяции поворотов. Рисунок 1 наглядно демонстрирует, что при описании вращения кватернионами (слева) получается гладкая интерполяция, тогда как использование углов Эйлера приводят к артефактам из-за указанного выше вырождения, приводящего к «заклиниванию» анимации.

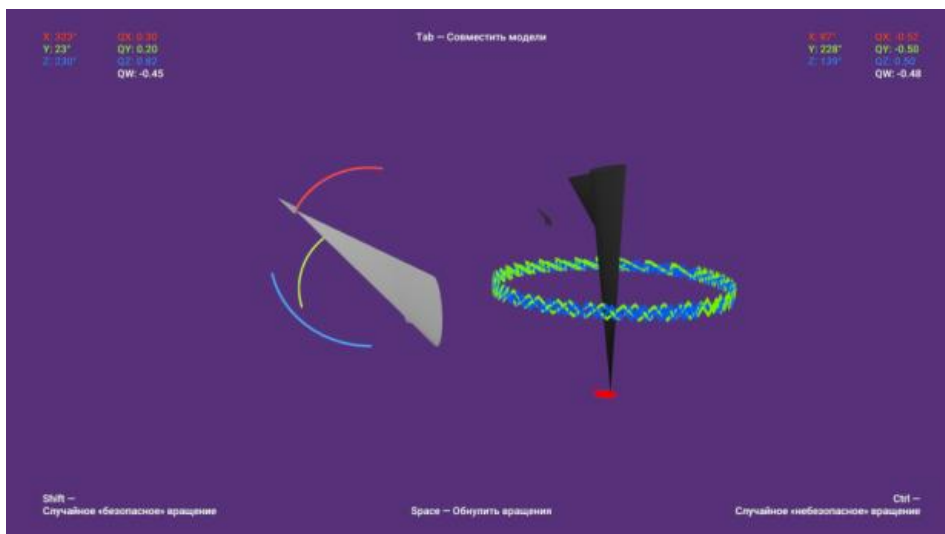


Рис. 1. (В цвете online). Гладкая интерполяция поворота с выходом из точки вырождения в кватернионах (слева) и артефакты gimbal lock углах Эйлера (справа). Желтая, красная и синяя дуги - повороты вокруг осей, соответствующие изменениям углов Эйлера φ, θ, ψ . При задании кватернионами тело плавно выходит из вертикального (вырожденного) положения, восстановленные углы Эйлера меняются гладким образом. При задании углами Эйлера тело «застывает» вблизи начального положения $\theta = \pi$, а углы φ, ψ не определяются (испытывают беспорядочные колебания).

Далее проводилась анимация свободного вращения твердого тела. Было бы полезно определить главные оси инерции произвольного тела, однако, готовый пользовательский интерфейс Unity не дает такой возможности (для любого тела можно задать, но не рассчитать, так называемую капсулу, являющуюся аналогом эллипсоида инерции), поэтому мы ограничились рассмотрением тела, главные оси которого совпадают с тремя осями симметрии четвертого порядка - прямоугольного параллелепипеда. В зависимости от соотношения его размеров, получается сферический волчок (куб), симметричный волчок (квадратный в сечении брус или квадратная пластина), либо асимметричный волчок (кирпич).

В Unity были созданы анимации свободного движения для всех трех случаев. Для куба правильно воспроизводилось равномерное вращение, причем не только вокруг осей симметрии, что вполне ожидаемо, но и вокруг произвольно наклоненной оси, что без математического обоснования представляется достаточно контринтуитивным. Для квадратной пластины (симметричный волчок), как и ожидалось, визуальное наблюдение прецессии. Надо заметить, что поскольку программа, не показывает сохраняющийся во времени вектор момента импульса, вокруг которого происходит вращение оси симметрии волчка, наибольшая наглядность достигается, когда скорость прецессии намного меньше скорости вращения волчка вокруг собственной оси.

Как известно [1], свободное вращение асимметричного волчка в общем случае сложно для анализа, а его моделирование малоинформативно. Поэтому в качестве наглядного примера мы

выбрали проявление неустойчивости вращения вокруг оси с промежуточным значением главного момента инерции. Неустойчивость вращения вокруг промежуточной (средней) оси инерции и устойчивость вращения вокруг двух других осей была впервые обнаружена Л. Пуансо в 1834 году и опубликована в его трактате «Новая теория вращения тел» [21]. В настоящее время этот эффект известен как эффект Джанибекова в честь космонавта, который обнаружил его наглядный пример экспериментально в условиях невесомости: гайка, получившая вращение в результате быстрого свинчивания с резьбовой шпильки, в свободном полете периодически переворачивалась. Отметим, что при наличии диссипативных сил, которые способны рассеивать энергию вращения, например приливных, как в случае нашей планеты, устойчивое вращение будет происходить только вокруг оси с максимальным главным моментом инерции.

Мы попытались продемонстрировать эффект Джанибекова в Unity, задавая начальное вращение с небольшим отклонением от главной оси со средним моментом инерции. Наши попытки окончились неудачей, хотя были испробованы разные формы волчка и начальные условия. При малых углах отклонения вектора начальной угловой скорости от главной оси инерции движение оставалось устойчивым, при увеличении угла можно было наблюдать поворот оси вращения тела примерно на 90° , но наблюдать переворот оси вращения на 180° не удалось.

Например, для прямоугольного параллелепипеда (рис. 2) с главными моментами инерции (0.42, 0.83, 1.08) ось вращения после движения по спирали поворачивается примерно на 90° .

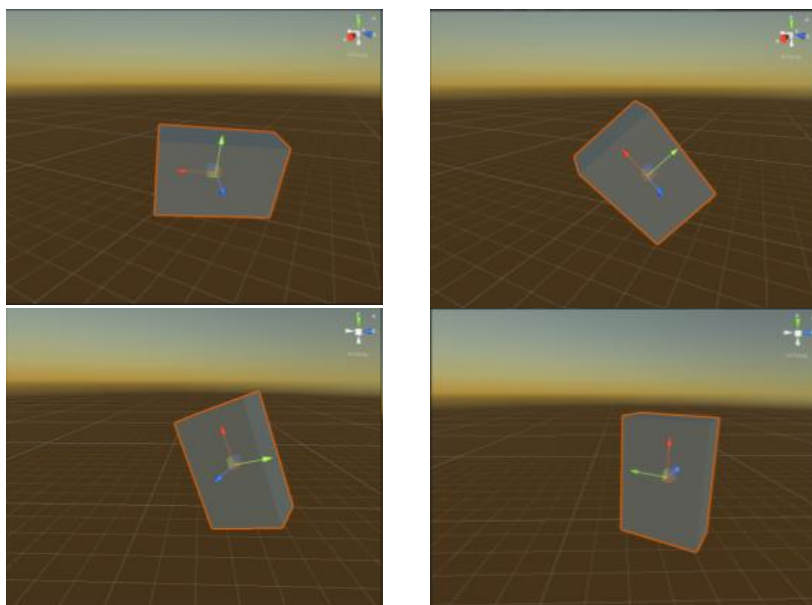


Рис. 2. (В цвете online.) Кадры спирального движения промежуточной оси асимметричного волчка при попытке демонстрации неустойчивости в Unity. Средний момент инерции соответствует желтой оси, которая на первом кадре направлена почти вертикально. Начальная угловая скорость волчка слегка отклонена от этой оси. На последнем кадре ось вращения повернута примерно на 90° (направлена влево почти по горизонтали).

Неудача демонстрации эффекта Джанибекова вызывает определенные сомнения в способности Unity корректно, а не просто правдоподобно моделировать все случаи вращательных движений твердого тела. Для выяснения причин необходимы дальнейшие исследования. А способны ли на это другие игровые пакеты? С целью ответа на данный вопрос рассмотрим игровой движок Source, разработанный компанией Valve Corporation (США) [22]. Он гораздо старше Unity и подарил миру немало замечательных проектов. Для

асимметричного волчка, показанного на рис. 3, анимация четко показала, что при малом отклонении начальной угловой скорости от главной оси со средним моментом инерции после нескольких оборотов происходит переворот оси сращения, как того и требует теорема Пуансо. К сожалению, статические кадры не дают об этом наглядного представления, так как в Source нет функции изображения осей, однако при анимации эффект виден хорошо.

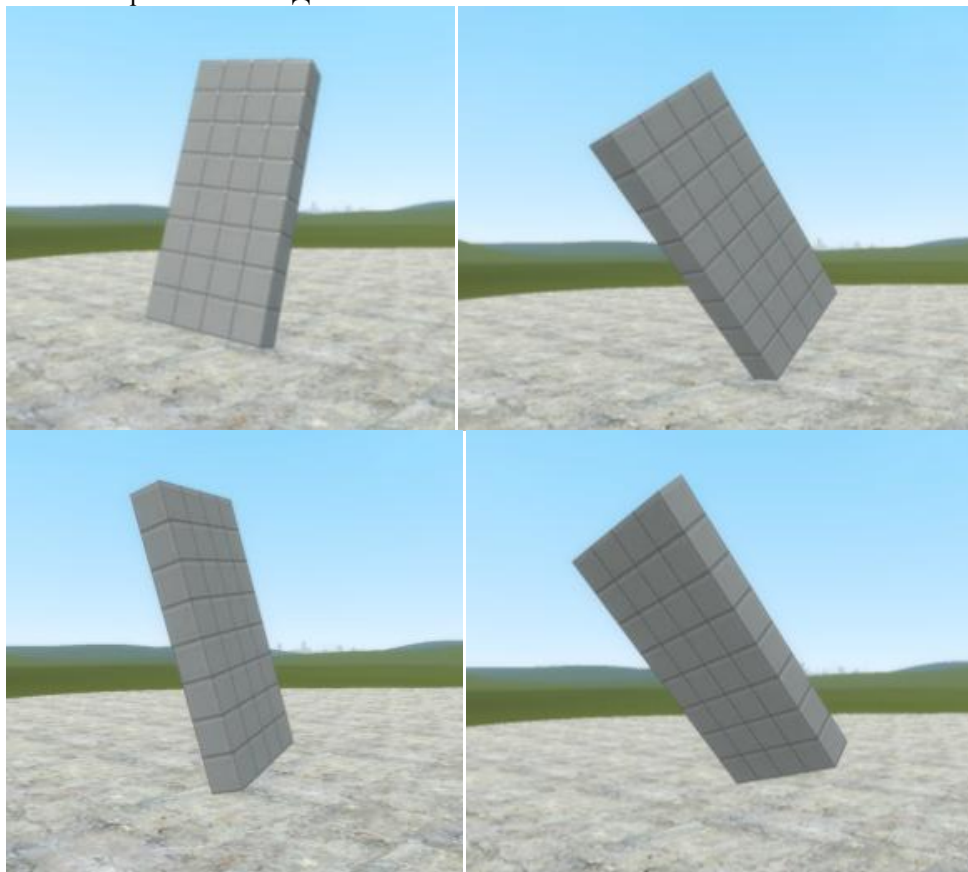


Рис. 3. Кадры анимации в Source, демонстрирующей неустойчивость вращения вокруг средней оси для асимметричного волчка.

В заключение отметим, что использование игровых систем для создания анимационных иллюстраций по механике в рассмотренных примерах дает правильное и достаточно наглядное представление трехмерных движений твердого тела. Однако, попытка демонстрации неустойчивости такого движения в Unity оказалась неудачной, тогда как Source хорошо справился с задачей. Общим недостатком игровых систем для применения в учебных целях является то, что их возможности

ограничены простым визуальным наблюдением, а выведение на экран величин, необходимых для количественной обработки результатов виртуального эксперимента, требует вмешательства в код за рамками возможностей пользователя. Поэтому разработка собственных программ, обеспечивающих не только анимацию, но и постановку компьютерных лабораторных работ, остается актуальной задачей.

Библиографический список

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. - М.: Наука, 1965.
2. Маркеев А.П. Теоретическая механика. - М.: Наука, 1990. - 416 с
3. Eugene Butikov (20 June 2012). Free rotation of an axially symmetrical body URL : <http://butikov.faculty.ifmo.ru/Applets/Precession.html>. Дата обращения : 26.04.22
4. EJS HOME PAGE(1999). URL : <https://www.um.es/fem/EjsWiki/>. Дата обращения : 01.05.22.
5. Francisco Esqueembre. URL : <https://www.um.es/fem/PersonalWiki/>. Дата обращения : 01.05.22
6. OSP (Open Source Physics) (2003). URL : <https://www.compadre.org/osp/>. Дата обращения : 01.05.22
7. Government & Aerospace. URL : <https://unity.com/solutions/government-aerospace>. Дата обращения: 20.03.22
8. Журавлев В.Ф. Основы теоретической механики. - М.: Физматлит, 2008. - 304 с

9. Полак Л. С. Уильям Роуэн Гамильтон (к 150-летию со дня рождения) // Труды Института истории естествознания. — АН СССР, 1956. — Т. 15 (История физ.-мат. наук). - С. 273.
10. Бранец В.Н., Шмыглевский И.П. Применение кватернионов в задачах ориентации твердого тела. – М.: Наука, 1973. – 320 с.
11. Боресков А. В. Графика трехмерной компьютерной игры на основе OPENGL. - М.: Диалог-МИФИ, 2004. - 384 с.
12. Амелькин Н.И. Динамика твердого тела. URL: (<https://mipt.ru/upload/medialibrary/dc2/amlkin-n.i.-dinamika-tverdogo-tela.pdf>). Дата обращения : 10.04.22
13. Бутиков Е.И. Свободное вращение твердого тела. Компьютерные инструменты в образовании, № 1 (январь – февраль 2006. С. 10 – 18.
14. Мисюра Н. Е., Митюшов Е. А. Кватернионные модели в кинематике и динамике твердого тела: учебное пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2020 – 120 с.,[1] лист ил.
15. Altmann Simon L. Rotations, Quaternions, and Double Groups. Mineola: Dover Publications, 1986. – 317 p.
16. Awesome Unity Open Source on GitHub (800+). URL: (<https://github.com/teameo.ca/baba-s/awesome-unity-open-source-on-github#Water>). Дата обращения : 15.03.22
17. Как Нил Бломкэмп и Unity формирует будущее кинопроизводства с Адамом: Зеркало. // Интернет-издание The Verge. URL: <https://www.theverge.com/2017/10/4/16409734/unity-neill-blomkamp-oats-studios-mirror-cinemachine-short-film>. Дата обращения : 20.03.22
18. Как игровая компания Unity подталкивает автопроизводителей к виртуальной реальности // Интернет-портал Digital Trends. URL: <https://www.digitaltrends.com/cars/unity-automotive-virtual-reality-and-hmi/> Дата обращения: 20.03.22
19. Открытый код PhysX. URL : <https://github.com/NVIDIAGameWorks/PhysX>. Дата обращения : 20.03.22
20. Оптимизация игр в Unity 5 / пер. с англ. Рагимова Р. Н. М.: ДМК Пресс, 2017. – 306 с.: ил.
21. Poinsot L. Outlines of a New Theory of Rotatory Motion (англ.) / пер. с фр. на англ.: Ч.Уитли (Ch. Whitley). Cambridge: Pitt Press, 1834. P. 63 –68.
22. Source Inside. // URL: <https://source-inside.ru/> Дата обращения: 20.03.22

USING *UNITY* AND *SOURCE* GAME SOFTWARE
FOR ANIMATION SUPPORT OF THE TRAINING COURSE IN THEORETICAL MECHANICS

V.L. Derbov, N.A. Karagodov
Saratov State University,

An attempt is made to use the game engines Unity and Source for animation support of the training course in theoretical mechanics. Free rotation of a rigid body is chosen as an example. The description of rotations by quaternions used in gaming systems is discussed in comparison with traditional Euler angles. The created animations of the free rotation of a rigid body show that Source, unlike Unity, correctly describes the instability of the rotation of an asymmetric top around an axis with an average moment of inertia (the Dzhanibekov effect).

УДК 378.016:53

СИСТЕМНЫЙ КОНТРОЛЬ ЗНАНИЙ И ОБРАТНАЯ СВЯЗЬ

М.А. Старшов

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Старшов Михаил Александрович, заведующий лабораторией
кафедры общей, теоретической и компьютерной физики Института физики

Описывается оригинальная система рейтингового объективного контроля знаний студентов и школьников. Письменные ответы студентов в ограниченное время на большое число вопросов, единых для всей проверяемой группы или курса практически гарантируют самостоятельное выполнение контрольной работы. Специфическим для этой методики свойством системы является определение баллов за каждый ответ по числу ошибок всего ансамбля проверяемых работ по этому вопросу. Благодаря этому преподаватель немедленно получает сведения об уровне сложности каждого вопроса, и тем самым возможность исправить положение в ходе дальнейшего изложения трудного для студентов фрагмента курса. Повторение контроля по следующим разделам курса уточняет уровень усвоения курса каждого студента, и поэтому проведение экзамена в традиционной форме со случайными вопросами в билете лишается смысла.

В далёкие годы студенту-физику третьего курса было необходимо срочно сдать экзамен по педагогике. Этому сильно мешало уже начавшее формироваться физическое мышление. Любое пособие по педагогике казалось пустым набором знакомых слов, лишённым какой-либо связи друг с другом. Студенту повезло с билетом: оба вопроса имели явную философскую окраску, а к философии тогда многие физики были расположены, и необходимая оценка оказалась заслуженной.

В практике преподавания бывают вопросы лёгкие, трудные или счастливые, всё это весьма относительно. С опытом приходит умение более или менее справедливо оценивать ответы учащихся. На родительском собрании физматклассов лицея зачитывал оценки за четверть университетский доцент, который вёл уроки математики, а преподаватель физики обратил внимание на почти полное совпадение оценок тех же лицейцев по его предмету. Причём это была даже не физика, а

спецкурс или факультатив «Исторические эксперименты и домашние опыты».

С первого дня чтения курса общей физики надо было решать проблему оценки знаний студентов биологического факультета, заранее зная их отношение к физике. Очень многие из них и на биофак пошли учиться, чтобы никогда больше не видеть ни математики, ни физики, и вот опять. Программа по физике мало отличается на различных факультетах, и если на одной неделе сдают физику студенты физического факультета и другого естественного факультета, то с «пятеркой» проблем немного. Но что такое оценка четыре, честно говоря, не знает никто. Даже в одной группе, по ходу экзамена в один день.

Многие годы верно служила оригинальная система письменного распределённого контроля знаний, о которой не знали деканаты. Больше того, она давала такую информацию об уровне развития каждого студента, какой нет ни у одного ответственного за учебную работу, но предложение поделить ею не вызвало интереса в деканате.

Система проста, хотя и прибавляет немало дополнительной работы преподавателю. Читая, скажем, три лекции по кинематике, лектор готовит 15 вопросов по этой теме и предупреждает студентов, что на следующей лекции изучение этого раздела будет закончено, а в конце проведена самостоятельная письменная работа, дающая некоторое количество баллов для итоговой оценки за семестр. Кроме того, каждый студент примерно увидит своё место на курсе. Это обычно интересует всех, и мы оцениваем это интуитивно. А здесь получим некое число, и студенты всегда очень внимательно слушают рейтинговый список после проверки очередной такой контрольной.

Вопросы подбираются самые разные, заведомо простые, каверзные, забавные. И 15 вопросов на полчаса не дают возможности пользоваться какими-то вспомогательными материалами. Каждый вопрос лектор зачитывает два или три раза, чтобы слушатели лучше его воспринимали. При этом студентов просим не писать то, что произносит преподаватель. Например, если вопрос звучит так: «Материальной точкой называется...», то студент может после номера вопроса написать всего лишь слова «любое тело, размерами которого можно пренебречь в данной задаче». В этом простом определении не то что студенты, авторы серьёзных учебников[1] допускают принципиальную ошибку, опуская два последних слова.

Для ускорения обработки большого массива работ все верные ответы помечаются знаком плюс, а ошибочные – минус. Эти знаки переносятся в таблицу-матрицу с числом строк по числу студентов, а в каждой строке 19 ячеек: для ФИО студента, всех вопросов, суммы баллов за все ответы и порядкового номера – рейтинга студента.

Главная особенность всей методики представляется в том, что число минусов в каждом столбце, т.е. по всем студентам, берётся в качестве «стоимости» каждого плюса по этому вопросу. Это

число вписывается в самую верхнюю строку над номером соответствующего вопроса.

Теперь остаётся просуммировать эти показатели по всем плюсикам в каждой строке, вписать это число в ячейку столбца «сумма», а затем определить номер студента по возрастанию сумм баллов каждого. Окончательные баллы для потока в сотню человек лежат обычно в диапазоне от единиц до 200-300 баллов, студенты очень детально распределяются по своим показателям уже после одной такой контрольной.

Следующие две-три проверки увеличивают баллы всех студентов, несколько меняют их относительное положение, но в конце концов приводят к довольно справедливому, объективному результату. Неоднократно проводилось сравнение с теми баллами ЕГЭ, с которыми студенты пришли в приёмную комиссию из школы. Резких противоречий практически не бывает. Пока речь шла о суммарном количестве баллов по всем вопросам контрольной и по всем контрольным за определённый временной отрезок, семестр или год, а может быть, и некий раздел изучаемой дисциплины, но для администрации нужны обезличенные отметки в зачётной книжке каждого студента и в экзаменационной ведомости. И как найти грань между пятеркой и четверкой? Многие годы большую пользу оказывал карманный калькулятор со встроенной статистической программой. В принципе, от неё требовалось умение быстро вычислить средний балл по коллективу и среднее отклонение от среднего или дисперсию. После введения всех баллов подряд, калькулятор уже имеет в памяти эти показатели. Можно принять такое правило игры: все баллы около среднего плюс-минус дисперсия определяют, условно говоря, норму, и в переводе на привычные отметки достойны указывать на четверку или «хорошо». Всё, что больше – отлично, а ниже, естественно, удовлетворительно, в обиходе тройка. Можно с удовлетворением отметить, что двоек в этой системе нет. Исключение только одно, если студент пропустил все те лекции, на которых проводились все контрольные. Для индивидуального обучения эта система не годится.

Самое интересное свойство этой системы, так сказать, побочное, состоит в том, что найденное число минусов по каждому вопросу совершенно чётко показывает сложность данного вопроса для этого коллектива слушателей. В другом потоке эта цена вопроса может заметно измениться, но в любом случае, лектор получает информацию для размышлений, не его ли вина в том, что тот или другой вопрос был недостаточно ясно и доступно изложен в лекциях. И тогда есть возможности вернуться к этой проблеме, ведь это был ещё не окончательный экзамен, когда уже ничего нельзя изменить, да и потребность в этом определить невозможно при ответах студентов на случайные и разные вопросы при традиционном экзамене. Таким образом, система даёт преподавателю надёжный и сильный инструмент обратной связи.

Примером определения сложности отдельных вопросов, придуманных преподавателем, послужит реальная таблица по двум факультетам, где автор в 2013 году читал курс «Концепции современного естествознания». В одной контрольной по разделу принципы классической механики минусы распределились так:

социологи
 8(20)-14(18)-15(18)-9(14)-10(14)-1(13)-13(12)-6(12)-
 3(11)-2(9)-12(9)-5(8)-4(6)-7(6)-11(4).
 журфак
 9(26)-14(26)-1(23)-10(21)-3(18)-7(18)-11(17)-5(16)-
 12(14)-13(10)-6(9)-8(8)-15(8)-4(6)-2(2).

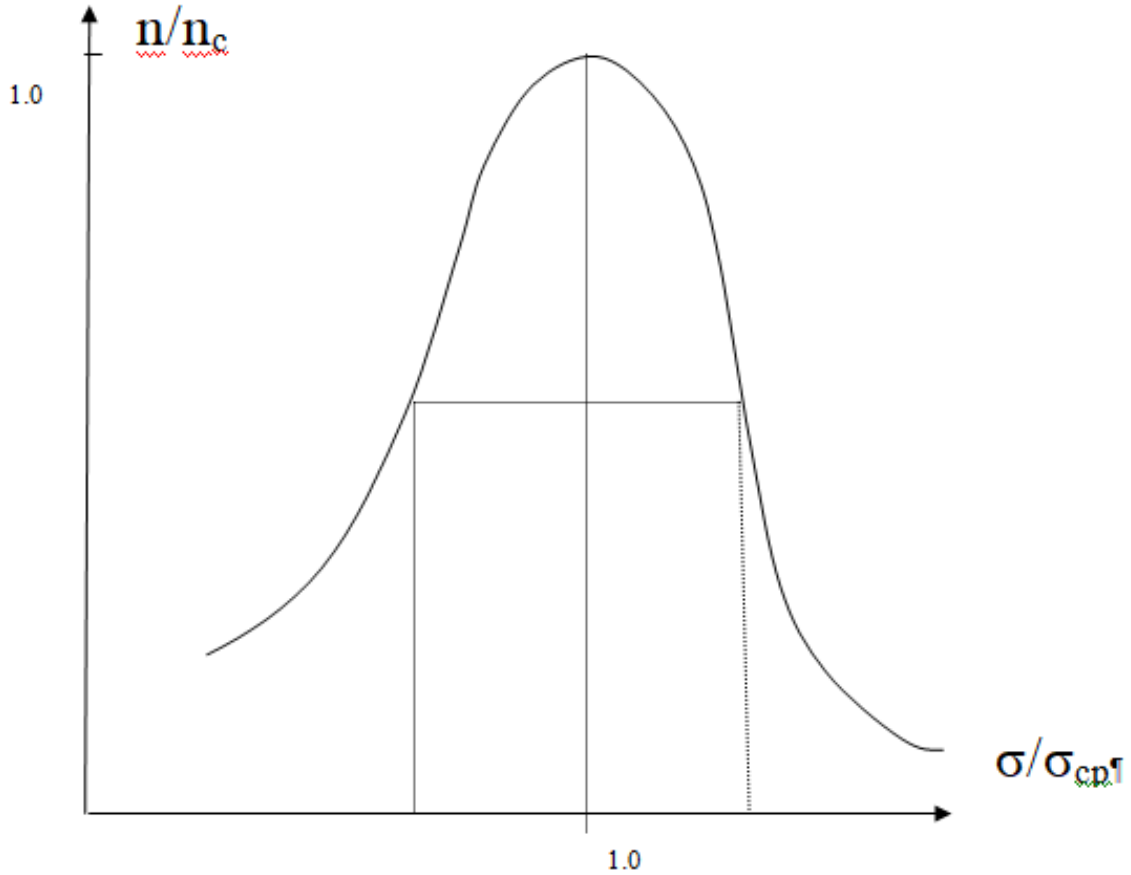


Рис.1. Графическое представление распределения студентов по итогам одной контрольной работы. Доля студентов, имеющих баллы в узком диапазоне баллов, показана в зависимости от этих баллов по отношению к среднему баллу по всему потоку.

В скобках правее номера вопроса указано количество неверных ответов по этому вопросу, или отсутствие ответа вообще. Видно, что сложность вопросов несколько отличается на двух специальностях, но если взять первую пятёрку вопросов этого списка, то более половины номеров совпали. Конечно, лектор не буквально «читает» лекцию, а создаёт это произведение на месте, и потому лекции отличаются, сохраняя содержание. Но эмпатия со студентами отличается уровнем или глубиной, и это сказывается на результатах контроля усвоения информации слушателями.

Другая существенная особенность метода проявляется при графическом отображении полученных результатов. Распределение студентов по набранным баллам неизменно имеет вид колокола, как и полагается в Природе, можно назвать это нормальным распределением. Вершина колокола показывает наибольшую долю испытуемых, набравших суммарный балл вблизи от среднего балла.

Если определить средний балл, то по одной оси удобно откладывать нормированные значения, т.е.

баллы, делённые на этот средний балл. По другой оси тогда есть смысл откладывать соответствующие доли студентов, делённые на максимальное число около среднего. В этом случае кривые для любых групп студентов и любых разделов любого курса будут стоять на месте, отличаясь только крутизной спада влево и вправо от единицы.

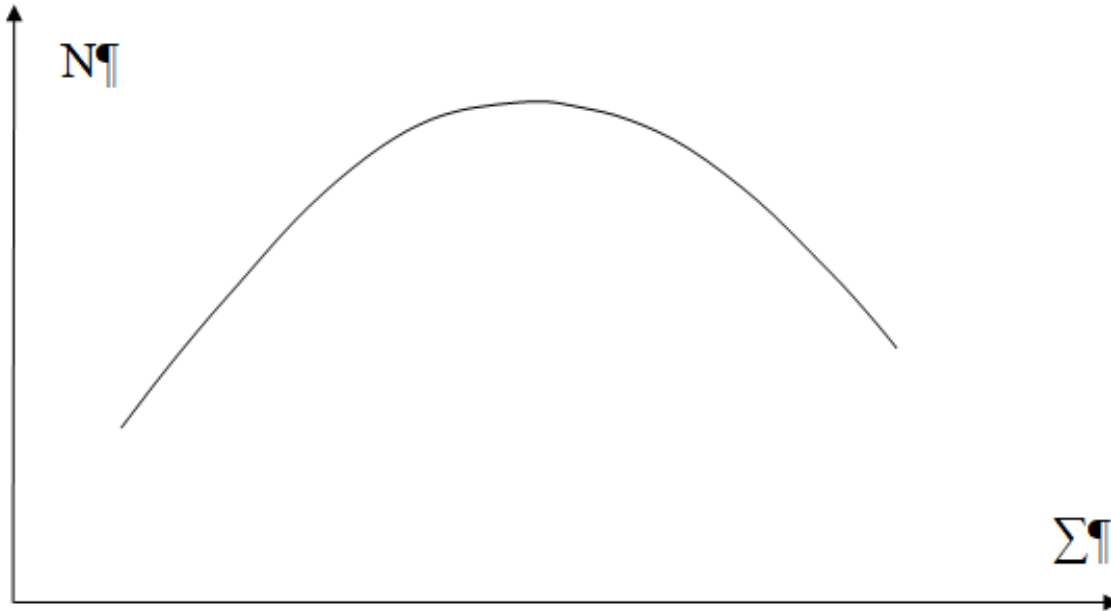
Проведя на таком графике горизонтальную прямую на половине высоты колокола, приобретаем объективный указатель, какие оценки соответствуют четвёрке, «хорошо» – это норма, те студенты, сумма баллов которых близка к среднему баллу всего коллектива. Это все, что попали внутрь колокола. Правее расположатся отличники, а левая ветвь отметит троечников (которые после вуза делают, как правило, прекрасную карьеру). Картина получается столь убедительная, что практически никогда не остаётся места спорам, претензиям и даже просто открытому недовольству своей итоговой оценкой. О чём тут говорить, если у меня 16 баллов, а у многих сокурсников вижу и 200, и 638, а в руках преподавателя моя работа со сплошными минусами, которые легко проверяются.

В памяти остался один студент геологического факультета из арабской страны, которому пришлось показывать все его ошибки («А почему вы другим поставили четыре, а мне...?!»).

Не так давно в интернете мелькнуло сообщение о проведённых в сочинском Центре «Сириус» курсах повышения квалификации учителей физики,

Рис.2. Распределение оценок тестируемых учителей.

причём приведены были похожие таблицы их результатов на выпускном экзамене. Только вместо плюсов и минусов стояли какие-то цифры 10, 20 и тому подобное. Но если по этим данным построить аналогичный описанному график, получается тоже подобное распределение типа колокол.



Можно принять во внимание, что тестирование проходили действующие учителя в своём предмете, поэтому разброс баллов не очень велик и основная масса курсантов попала в нормальную зону, троек мало, а высоких баллов относительно много, примерно, процентов двадцать.

В заключение можно заметить, что все объёмные вычисления, увеличивающие нагрузку на

преподавателя, вполне доступны компьютеру. Кроме ввода первичной информации после проверки работ студентов остальные операции легко программируются. Просто появилась эта система довольно давно, и был достаточен калькулятор для научных исследований с готовой статистической программой.

Библиографический список

1. Никитин С.Ю., Чесноков С.С. Механика: Учебно-методическое пособие. – М.: Издательский отдел факультета ВМиК МГУ им. М.В. Ломоносова (лицензия ИД N 05899 от 24.09.2001 г.), 2006. – 300 с.: ил. (Практические занятия по физике для студентов-математиков. Под ред. В.А. Макарова. Часть 1.

SYSTEMIC KNOWLEDGE CONTROL AND FEEDBACK

M.A. Starshov

Saratov State University

The original system of rating objective control of knowledge of students and schoolchildren is described. Written responses of students in a limited time to a large number of questions that are common for the entire group or course being tested practically guarantee independent completion of the test. A feature of the system that is specific to this technique is the determination of points for each answer according to the number of errors in the entire ensemble of checked works on this issue. Thanks to this, the teacher immediately receives information about the level of complexity of each question, and thus the opportunity to correct the situation in the course of further presentation of a fragment of the course that is difficult for students. Repetitive testing after the following parts of the course clarifies the level of mastering the course of each student, and therefore the examination in the traditional form with random questions in the cards loses its meaning.

В АРСЕНАЛ ЛЕКТОРА, СТУДЕНТУ ДЛЯ РАЗМИНКИ

М.А. Старшов

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского*Старшов Михаил Александрович*, зав. учебно-исследовательской лабораторией
кафедры общей, теоретической и компьютерной физики

Представлены некоторые примеры из различных разделов курса физики численных оценок и анализа словесных определений физических понятий, позволяющих сделать более интересным преподавание физики, углубить понимание физических теорий и развить критическое мышление студентов.

Жизненные линии Альберта Эйнштейна (1879-1955) и Филиппа Ленарда (1862-1947) неоднократно пересекались. Можно сказать, они были антиподами, как в научном отношении, так и по нравственным позициям. Наибольшую известность среди физиков Ленард приобрёл своими исследованиями по фотоэффекту и получил одну из первых Нобелевских премий в 1905 году, именно в этом году Эйнштейн опубликовал свои первые работы, сразу пять статей, радикально изменивших физическую картину мира. В одной из них Эйнштейн предложил совершенно новый взгляд на фотоэффект, и её отметит Нобелевский комитет, присуждая Эйнштейну Нобелевскую премию 1922 года (ровно сто лет назад!). В 1933 г Эйнштейна исключают из Берлинской (Прусской) академии наук и он будет вынужден покинуть родину навсегда, тогда как Ленард возглавит «работу» по созданию арийской физики в нацистской Германии. Оба переживут войну и увидят её результаты с разных сторон, во всех смыслах.

Альберту Эйнштейну имя Ленарда стало известно еще в студенчестве. В октябре 1897 года восемнадцатилетний студент Высшего технического училища (Политехникума) в Цюрихе а получил письмо из Гейдельберга от своей подруги, студентки факультета медицины того же Политехникума, но временно учившейся в университете Гейдельберга: «...О, вчера было очень мило на лекции проф. Ленарда, он рассказывает сейчас о кинетической теории теплоты в газах. Рассматривалась молекула кислорода, которая движется со скоростью 400 м в секунду, молодец-профессор считал, считал, строил уравнения, дифференцировал, интегрировал, что-то преобразовывал и, в конце концов, вывел, что молекулы хоть и движутся с такой скоростью, но проходят путь всего в одну сотую толщины волоса». [1].

Интересно, как отнесутся физики наших дней к портрету профессора конца позапрошлого столетия в изображении юной студентки, смогут ли восстановить уравнения и процедуры дифференцирования-интегрирования, проверить точность полученных тогда оценок.

Тем более, что на этом пути могут встретиться и другие физические величины, например, частота столкновений молекул газа или атмосферное давление, а также парадоксальные отношения средней длины свободного пробега молекул с температурой газа.

Следующий сюжет любопытен тем, что представляет нетривиальный взгляд на события

микромира физика, воспитавшего не одно поколение советских и российских школьников, побеждавших на самых престижных международных физических олимпиадах.

«Под действием электрического поля свободные заряженные частицы (носители зарядов) в проводящих телах движутся равномерно со средней скоростью, направленной вдоль вектора напряжённости электрического поля ... Эта “упорядоченная” скорость движения обычно пропорциональна величине напряжённости поля ... Поскольку движение происходит без ускорения, то можно сказать, что сила “тяги” со стороны электрического поля уравнивается силой “трения”, действующей на движущийся ион со стороны окружающей среды...»[2].

Любому вузовскому преподавателю, хотя бы раз прочитавшему курс общей физики, не составит большого труда оценить, какой порядок имеет эта “упорядоченная” скорость, и результат окажется довольно неожиданным. Несколько труднее, видимо, объяснить самому себе, почему эта скорость только «обычно» пропорциональна величине напряжённости поля.

Представляется, что размышления над этой цитатой будут полезны любому студенту - физику, потому что на этом пути он может встретить неожиданные повороты.

Великая революция в астрономии началась в ту ночь, когда Галилей направил свою самодельную зрительную трубу на небо, и делал одно открытие за другим. В данном случае наше внимание привлекает то, как он сам рассказывает об этом событии. С одной стороны, это популярное изложение для локального итальянского правителя, но с другой – прекрасный научный текст, совершенно в духе зарождающейся Физики. Чётко ставится задача, подбираются точные слова и описана измерительная процедура для новой области исследования.

«Месяцев десять тому назад до наших ушей дошел слух, что некоторый нидерландец приготовил подозрительную трубу, при помощи которой зримые предметы, хотя бы удаленные на большое расстояние от глаз наблюдателя, были отчетливо видны как бы вблизи; об его удивительном действии рассказывали некоторые сведущие; им одни верили, другие же их отвергали. Через несколько дней после этого я получил письменное подтверждение от благородного француза Якова Бальдовера из Парижа; это было поводом, что я целиком отдался исследованию причин, а также придумыванию средств, которые позволили бы мне стать

ОБРАЗОВАНИЕ

изобретателем подобного прибора; немного погодя, углубившись в теорию преломления, я этого добился; сначала я сделал себе свинцовую трубу, по концам которой я приспособил два оптических стекла, оба с одной стороны плоские, а с другой первое было сферически выпуклым, а второе — вогнутым; приблизив затем глаз к вогнутому стеклу, я увидел предметы достаточно большими и близкими; они казались втрое ближе и в девять раз

больше, чем при наблюдении их простым глазом. После этого я изготовил другой прибор, более совершенный, который представлял предметы более чем в шестьдесят раз большими.

Цитату великого учёного трудно прерывать, но здесь кажется оправданным показать рисунок, сделанный Галилеем явно для себя, в попытке разобраться в «теории преломления».

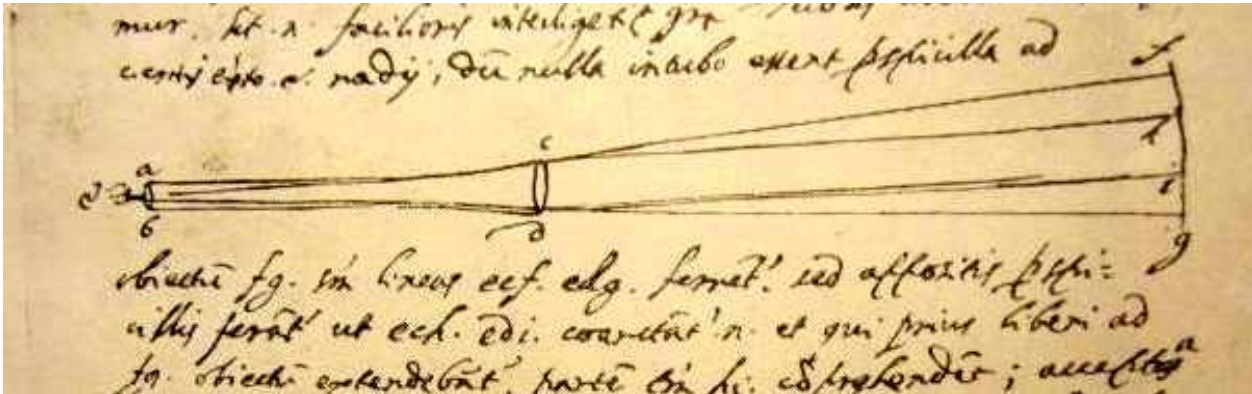


Рис.1 Гениальная, но неудачная попытка Галилея построить изображение в изобретённой им трубе. Задача не решена до сих пор, в отличие от трубы Кеплера, в которой окуляр создаёт мнимое и сильно уменьшенное изображение на расстоянии наилучшего зрения наблюдателя.

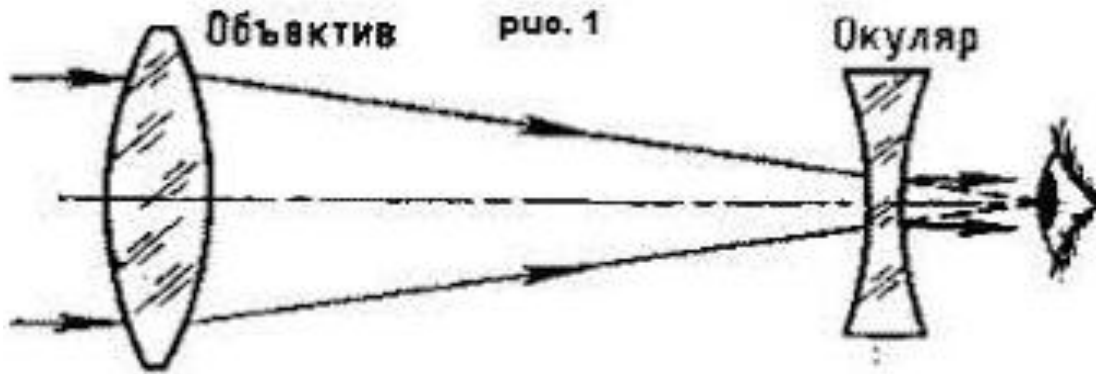


Рис.2. Современная схема показывает, что весь свет от далёкого объекта, попавший в объектив, выходит из глаз через гораздо меньшую площадь окуляра. Если диаметры действующих частей двух линз Галилея отличались в 5-6 раз, то плотность светового потока увеличивалась в 25-36 раз, совпадая с оценкой Галилея.

По рисунку видно, что и теории такой в то время не было. Правда, и современные учебники избегают формулировать определение «изображение точки» и создают путаницу в понятии «увеличение». Галилей более точен в своих рассуждениях, как это видно в продолжении цитаты.

«Наконец, не щадя ни труда, ни издержек, я дошел до того, что построил себе прибор до такой степени превосходный, что при его помощи предметы казались почти в тысячу раз больше и более чем в тридцать раз».

Продолжим цитировать Галилея.

«...Но, оставив земное, я ограничился исследованием небесного и сначала наблюдал Луну настолько близкой, как будто она отстояла всего лишь на два диаметра Земли. После того я с

невероятным ликованием духа часто наблюдал звезды как неподвижные, так и блуждающие; видя, насколько они часты, я начал думать, каким образом можно было бы измерить расстояние между ними и, наконец, нашел это. Об этом следует заранее поставить в известность тех, которые захотели бы приступить к наблюдениям подобного рода. Прежде всего, необходимо, чтобы они приготовили себе точнейшую зрительную трубу, которая представляла бы предметы ясными, отчетливыми и без всякого тумана; она должна увеличивать, по меньшей мере, в четыреста раз; тогда она покажет эти наблюдаемые предметы в двадцать раз более близкими; если такого инструмента не будет, то напрасно пытаться видеть все то, что наблюдалось нами в небе и что описывается ниже. Чтобы всякий

легко мог удостовериться в размерах увеличения, пусть он приготовит из бумаги два круга или квадрата, из которых один должен быть в четыреста раз больше другого; это будет, когда отношение длин диаметров большего круга к меньшему будет двадцатикратным; после этого, прикрепив их поверхности к той же самой стене, нужно одновременно смотреть на них издали, на меньший, — придвинув глаз к зрительной трубе, а на больший — простым глазом; это легко можно будет одновременно сделать, открыв оба глаза; обе фигуры покажутся тогда одинаковой покрытой впадинами и возвышениями, совершенно так же, как и поверхность Земли, которая то здесь, то там отмечается горными хребтами и глубокими долинами». – Что-то здесь натворил переводчик и не заметил редактор! Тем более интересно воспользоваться таким текстом на лекции, да и просто почитать его ради удовольствия.

Чтобы видеть меньший круг издали мимо трубы, его диаметр должен иметь величину порядка одного метра. При этом для второго круга потребуется листочек бумаги примерно десять на десять метров. Видимо, Галилею удалось построить трубу, которая что-то увеличивала в четыреста раз, и даже оценить это увеличение придуманным способом..

Типична фраза, которой разные авторы пытаются похвалить достижения Галилея: «В 1609 году Галилей самостоятельно построил свой первый телескоп с выпуклым объективом и вогнутым окуляром. Труба давала приблизительно трёхкратное увеличение. Вскоре ему удалось построить телескоп, дающий увеличение в 32 раза». Почему-то у читателя не возникает желания понять, что именно увеличивается примитивной зрительной трубой в такое большое число раз, если на полевых биноклях периода и первой, и второй мировых войн можно увидеть 8^x .

Если фокусное расстояние линзы-объектива лучших труб Галилея было около полутора метров, то при расстоянии 150 метров изображение двухметрового человека имело размер в два сантиметра. Потом его рассматривали через рассеивающую линзу, которая едва ли способна поправить «увеличение».

Несколько позже Иоганн Кеплер, не дождавшись от Галилея его трубы, придумал свою конструкцию,

но не сделал. В этом случае окуляром служит положительная, собирающая линза, работающая как лупа. Она что-то увеличивает, примерно в 4-6 раз, но объектив-то всё равно сильно уменьшает изображение удалённого предмета.

Система Кеплера применялась гораздо чаще, хотя и переворачивает изображение. В астрономии это не имеет существенного значения, но по этой схеме строились подзорные трубы для моряков и полководцев. Как они руководили боевыми действиями до изобретения бинокля, тоже интересная тема для обсуждения.

Казалось бы, и в трубе Галилея, и в телескопе - рефракторе Кеплера объективом может быть одна и та же собирающая линза, в этих приборах только окуляры отличаются. Но в исторических обзорах часто просто констатируют, что при двух собирающих линзах изображение получается более ярким и чётким. А современные телескопы редко характеризуют «увеличением», зато подчёркивают диаметр устройства. Это интересно сопоставить с поведением Галилея, который делал для объектива линзу диаметром около двух дюймов, а использовал только центральную часть около полутора дюймов в диаметре.

В учебниках и других текстах по физике очень часто встречаются оценки и выводы, вызывающие подозрение и дающие повод для размышлений, а иногда создающих мгновенную уверенность в ошибке: «...Число столкновений Z молекулы БАВ с клеткой в единицу времени можно определить из уравнения Смолуховского $Z=4\pi Rn$, где R – радиус клетки (мы пренебрегли радиусом самой частицы БАВ); n – число молекул БАВ в единице объема ...» [4]. Показательно, что здесь нет ссылки на источник сведений об «уравнении Смолуховского». Видимо, оно общеизвестно, как таблица умножения, только совершенно невозможно. Достаточно обратить внимание на то, что слева можно заметить время (размерность – обратные секунды), а в правой части «уравнения» места для него не предусмотрено, размерность – обратная длина в квадрате. Мариан Смолуховский был бы удовлетворён, увидев справа в своём уравнении не радиус клетки, а её эффективное сечение, а также средне квадратичную скорость налетающих на неё молекул.

Библиографический список

1. Беркович Е. // Семь искусств, №7 • 17.08.2014 . <https://document.wikireading.ru/45263>
2. Варламов С.Д.//ФИЗИКА. Первое сентября, 2003, №21, С.28.
3. Галилей. Избр. Соч. В двух томах. Т.1. М., НАУКА. 1964. С.21.
4. Кременцова А.В.// БИОФИЗИКА, 1998, №3, С.511.

TO THE LECTOR'S ARSENAL, TO THE STUDENT FOR WARM-UP

M. A. Starshov

Saratov State University

Some examples from various branches of physics of numerical assessments and analysis of verbal definitions of physical concepts are presented, which make it possible to make the teaching of physics more interesting, deepen the understanding of physical theories and develop students' critical thinking.

ОСОБЕННОСТИ ЭФФЕКТА ПОДАВЛЕНИЯ АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА
НА ЛИНЕЙНОМ НЕОДНОРОДНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ БАРЬЕРЕ

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент Института физики СГУ

Инкин Максим Глебович, аспирант Института физики СГУ

Шаповалов Александр Степанович мл, бакалавр

В рамках линейной модели неоднородного потенциального барьера детально исследуется зависимость степени подавления аномального дробового шума от крутизны вероятностной характеристики модели.

В работах [1,2] рассмотрена линейная статистическая модель неоднородного потенциального барьера, позволившая обнаружить эффект подавления аномальной компоненты дробового шума (АКДШ), генерируемой на подобном барьере. В рамках этой модели, как и ранее [3], предполагается случайный характер параметра интенсивности λ переходов (эмиссии) носителей заряда через барьер. Под параметром интенсивности понимается условное математическое ожидание числа частиц, проходящих через барьер за единицу времени при условии, что барьер находится в данном эмиссионном состоянии. В качестве основной вероятностной характеристики барьера принимается плотность распределения $\psi(\lambda)$ параметра λ .

Предварительные исследования [1,2] показали, что крутизна вероятностной характеристики существенно влияет на уровень АКДШ, и при соответствующей крутизне наблюдается эффект подавления этой компоненты. В данной работе проводится детальное исследование влияния крутизны вероятностной характеристики барьера на глубину подавления аномальной компоненты дробового шума.

Основные положения используемой модели состоят в следующем. Как и в [1,2], будем считать, что возможные значения параметра интенсивности λ лежат в интервале $\lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a$, а вероятностная характеристика барьера $\psi(\lambda)$ описывается линейной функцией

$$\psi(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_a - \lambda_p} + k \frac{\lambda - \lambda_o}{\lambda_o^2} & \text{при } \lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a, \\ 0 & \text{при } \lambda < \lambda_p, \lambda > \lambda_a. \end{cases} \quad (1)$$

где $\lambda_o = \frac{\lambda_a + \lambda_p}{2} = const$, $k = \lambda_o^2 \frac{d\psi}{d\lambda} = const$.

Здесь λ_o - средняя точка интервала возможных значений λ ; λ_a и λ_p - соответственно наибольшее и наименьшее дозволённые значения параметра интенсивности, k - безразмерная крутизна вероятностной характеристики (алгебраическая величина). Для того, что бы исключить возможность появления отрицательных значений $\psi(\lambda)$, на абсолютную величину крутизны накладывается ограничение $-|k_{zp}| \leq k + |k_{zp}|$. Модуль граничного (предельно допустимого) значения крутизны $|k_{zp}|$ определяется соотношением граничных значений параметра интенсивности эмиссии λ_p и λ_a . Если основной характеристикой эмиссионной неоднородности модели принять величину максимального перепада параметра интенсивности эмиссии $\eta = \lambda_a / \lambda_p$, то

$$|k_{zp}| = \frac{1}{2} \left(\frac{\eta + 1}{\eta - 1} \right)^2.$$

Увеличение параметра неоднородности η ведёт к монотонному уменьшению модуля граничных

значений крутизны. При $\eta \rightarrow \infty$ величины k_{zp} составляют +0,5 и -0,5.

Для анализа зависимости интенсивности АКДШ от крутизны вероятностной характеристики модели вводится безразмерный уровень $\gamma_o - 1$ АКДШ [1,3-6], под которым понимается отношение двухсторонней спектральной плотности аномальной компоненты к величине, определяемой формулой Шоттки ($eI_o/2\pi$), где I_o - постоянная составляющая тока через барьер; e - абсолютная величина заряда электрона. Нулевой индекс у символа γ означает, что уровень наблюдается на частоте $\omega \ll I_o/e$.

Целесообразность принятого обозначения уровня АКДШ величиной $\gamma_o - 1$ заключается в том, что в этом случае безразмерный уровень полного дробового шума, содержащего и классическую, и аномальную компоненты, равен γ_o .

Расчёт, проведённый в [1], показал, что безразмерный уровень $\gamma_o - 1$ аномальной компоненты дробового шума, для линейной модели неоднородного потенциального барьера определяется выражением

$$\gamma_o - 1 = \gamma_o(\eta, k) - 1 = \frac{2(\eta + 1) \left[\frac{(\eta + 1) - 2k(\eta - 1)}{\eta} + \frac{4k}{\eta + 1} \ln \eta \right]}{\left[\frac{(\eta + 1) - 2k(\eta - 1)}{\eta - 1} \ln \eta + \frac{4k(\eta - 1)}{\eta + 1} \right]^2} - 2. \quad (2)$$

В общем случае приведённое выражение отражает довольно сложную зависимость уровня АКДШ от параметра неоднородности η и крутизны k вероятностной характеристики барьера. Однако наибольший практический интерес представляют значения уровня АКДШ при достаточно большой неоднородности барьера. Поэтому в дальнейшем проанализируем поведение уровня АКДШ именно в этом случае.

Если $\eta \gg 1$, то соотношение (2) существенно упрощается и принимает вид

$$\gamma_o(\eta \gg 1) - 1 = \frac{2[(1 - 2k)\eta + 4k \ln \eta]}{[(1 - 2k) \ln \eta + 4k]^2} - 2. \quad (3)$$

Рассмотрим характерные точки кривой, описываемой выражением (3). Нетрудно показать, что зависимость уровня АКДШ от крутизны вероятностной характеристики имеет максимум. Это означает, что существует такое значение крутизны характеристики, при котором процесс трансформации случайной смены эмиссионных состояний барьера [3-5] в дробовые флуктуации тока протекает наиболее интенсивно.

Проведение стандартных математических операций даёт следующее выражение для крутизны k_{max} , при которой уровень АКДШ максимален,

$$k_{max} = \frac{2 \ln^2 \eta + \eta (\ln \eta - 4)}{2(\eta - 2 \ln \eta)(\ln \eta - 2)}. \quad (4)$$

При $\eta = 1000$ безразмерная крутизна k_{max} составляет величину порядка 0,3.

Подстановка равенства (4) в соотношение (3) даёт выражение для максимального значения $\gamma_{0max} - 1$ уровня АКДШ, наблюдающегося при крутизне $k = k_{max}$

$$\gamma_{0max} - 1 = \frac{(\eta - 2 \ln \eta)^2}{4(\ln \eta - 2)(\eta - \ln^2 \eta)} - 2. \quad (5)$$

При $\eta = 1000$ максимальное значение безразмерного уровня $\gamma_{0max} - 1$ АКДШ близко к 50.

Проанализируем поведение уровня АКДШ во всём диапазоне дозванных значений крутизны, то есть при $-0,5 < k < +0,5$. Кривые зависимости $\gamma_o - 1$ от k при $\eta = 200; 400; 600; 800; 1000$ представлены на рис. 1.

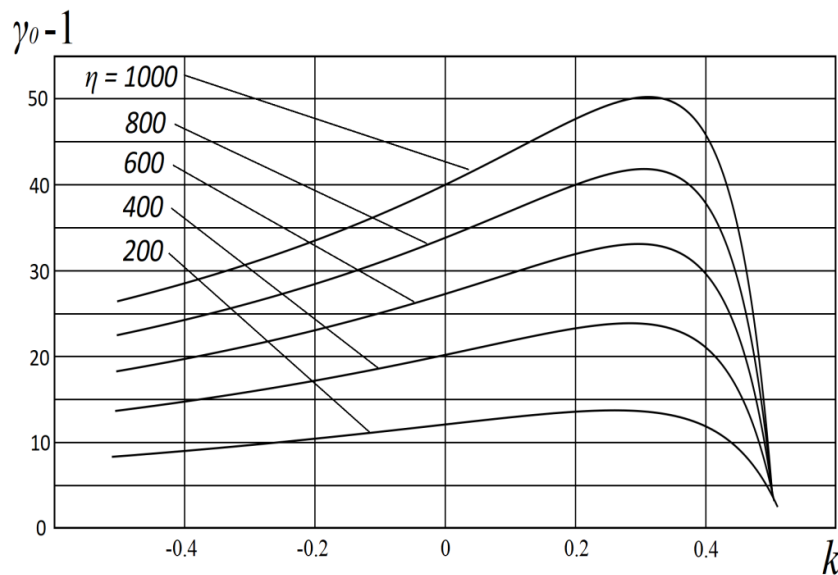


Рис. 1

При изменении параметра неоднородности η кривые ведут себя аналогичным образом. При любой неоднородности барьера η величина k_{max} остаётся положительной. С увеличением η положение максимума $k = k_{max}$ незначительно смещается в сторону более низких значений k . Существенно изменяется только высота максимума $\gamma_{0max} - 1$.

Основной вывод, следующий из вида кривых, заключается в том, что при любой неоднородности барьера η в областях $k < k_{max}$ и $k > k_{max}$ наблюдается существенное уменьшение уровня АКДШ. При реализации соответствующих значений крутизны k уровень АКДШ может быть значительно ниже не только максимума $\gamma_{0max} - 1$, но и величины АКДШ,

наблюдающейся при нулевой крутизне. Это явление – уменьшение уровня АКДШ ниже величины $\gamma_o(k=0) - 1$, в работе [2] было названо эффектом подавления аномального дробового шума за счёт реализации соответствующей крутизны вероятностной характеристики системы. Там же был введён в рассмотрение коэффициент подавления АКДШ, равный отношению уровней АКДШ при $k = 0$ и $k \neq 0$.

Эффект подавления АКДШ наблюдается и при отрицательной, и при положительной крутизне k . Специфика его проявления заключается в том, что при отрицательной крутизне он наблюдается при любых значениях модуля k , а при положительной крутизне он начинает проявляться лишь при

крутизне, превышающей некоторое пороговое значение $k_{пор}$. Так, при $\eta=1000$ величина $k_{пор} \approx 0,43$, и в области $0 < k < 0,43$ эффект подавления отсутствует. Более того в указанной области наблюдается повышение уровня АКДШ.

Для вычисления величины $k_{пор}$ достаточно приравнять величину $\gamma_0(k = k_{пор})$, определяемую выражением (3), к значению $\gamma_0(k = 0)$. По мере уменьшения параметра неоднородности η пороговое значение также уменьшается и при $\eta=200$ величина $k_{пор} \approx 0,4$.

Таким образом, эффект подавления АКДШ действует лишь в областях $k < 0$ и $k > k_{пор}$. В этих областях коэффициент подавления уровня АКДШ больше 1. В области $0 < k < k_{пор}$ эффект подавления АКДШ отсутствует. Вместо эффекта подавления здесь наблюдается эффект повышения уровня генерируемого шума, и коэффициент подавления меньше 1.

Приведённые кривые и соответствующие аналитические выражения позволяют получить важную в практическом отношении информацию о коэффициенте подавления шума: оценить области

значений крутизны, при которых действует эффект подавления, определить величину коэффициента подавления при заданных значениях η и k т.д. Сопоставление коэффициентов подавления при отрицательной и положительной крутизне вероятностной характеристики показывает, что при $k > 0$ достижимые значения коэффициента подавления существенно выше, чем при $k < 0$. Так, при $\eta=1000$ и $k < 0$ изменение крутизны может привести к уменьшению уровня АКДШ примерно в 1,5 раза, в то время как при $k > 0$ он может быть уменьшен более, чем на порядок. Таким образом, результаты детального анализа, проведённого в широком диапазоне изменения параметров барьера, существенно дополняют выводы работ [1,2].

В заключение отметим, что методика исследования, основанная на применении статистических моделей, может успешно применяться при решении актуальных проблем [7-12] в различных областях физики.

Авторы выражают глубокую благодарность Буганковой Наталии Сергеевне за помощь в работе над статьёй и ценные замечания при её обсуждении.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С., Машников В.В., Инкин М.Г., Шаповалов А.С. мл. Линейная модель неоднородного потенциального барьера и расчётные выражения для уровня аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С. 24-28.
2. Шаповалов А.С., Машников В.В., Инкин М.Г., Шаповалов А.С. мл. Эффект подавления аномального дробового шума линейной модели неоднородного потенциального барьера // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С. 28-34.
3. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
4. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Универсальная статистическая модель неоднородного потенциального барьера в режиме генерации аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 11-14.
5. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Шаповалов А.С. мл. Методические аспекты общей теории аномального дробового шума и её практического применения // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2020. – В. 27. – С. 6-9.
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 Саратов. ун-та, - 2016. – Вып. 20. – С. 41-46.
7. Minkin L., Shapovalov A.S. Heat of Transport of Air in Clay. // Radiation Protection Dosimetry. - 2007.- V. 123, № 2. - P. 221-225.
8. Dittrich W., Shapovalov A.S., Minkin L. Measuring the Specific Heat of Metals By Cooling. // Physics Teacher. – 2010. - V. 48. № 8. - P.531-533.
9. Minkin L. Shapovalov A.S. Indoor Radon Entry: 30 Years Later. // Iranian Journal of Radiation Research. – Summer 2008. – V. 6, № 1. P. 159-164.
10. 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.
11. Игнатъев А.А., Куликов М.Н., Стальмахов В.С., Шаповалов А.С. Шумовые свойства ламп обратной волны со скрещенными полями. – Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983. – 96 с
12. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодного СВЧ генератора с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 1997. – В. 3. – С. 67-70.

SOME FEATURES OF THE EFFECT OF SUPPRESSING OF THE ANOMALOUS SHOT NOISE ON LINEAR INHOMOGENEOUS POTENTIAL BARRIER

A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, M.G. Inkin, A.S. Shapovalov Jr
Saratov National Research State University

Within the linear model of an inhomogeneous potential barrier, the dependence of the degree of suppression of anomalous shot noise from the steepness of the probabilistic characteristic of the model is studied in details.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭФФЕКТА ПОДАВЛЕНИЯ
АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА ЛИНЕЙНОГО
НЕОДНОРОДНОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл
Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики Института физики СГУ

Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент Института физики СГУ

Инкин Максим Глебович, аспирант Института физики СГУ

Шаповалов Александр Степанович мл, бакалавр

Исследуется влияние эффекта подавления аномального дробового шума линейного неоднородного потенциального барьера на спектр дробовых флуктуаций. Приводятся данные о зависимости ширины спектра аномальной компоненты шума от крутизны вероятностной характеристики системы.

В работе [1] эффект подавления аномальной компоненты дробового шума (АКДШ), генерируемой на линейном неоднородном потенциальном барьере [2,3], исследовался на достаточно низких частотах флуктуаций ω , когда $\omega \ll I_0/e$ (I_0 - постоянная составляющая тока эмиссии, e - абсолютная величина заряда электрона), а спектральная плотность образует плато. Однако спектральная плотность аномальной компоненты в отличие от классической составляющей Шоттки [4] зависит от частоты, и её спектр имеет конечную ширину. Естественно, для полноты информации об эффекте необходимо исследовать его проявление на всех частотах аномальных флуктуаций. В связи с этим в данной работе эффект подавления анализируется в широком диапазоне частот, что позволяет выяснить его влияние на ширину спектра аномальной компоненты и глубину подавления шума на любой частоте. Исследование проводится на основе линейной статистической модели неоднородного потенциального барьера [1-3].

Как и ранее [4], под уровнем аномальной компоненты дробового шума на произвольной частоте ω будем понимать безразмерную величину $\gamma(\omega)-1$, равную отношению двухсторонней спектральной плотности аномальной компоненты к спектральной плотности Шоттки ($eI_0/2\pi$). В качестве основных характеристик неоднородности линейной модели барьера примем параметр эмиссионной неоднородности η и безразмерную крутизну вероятностной характеристики барьера k , которые определяются следующими выражениями: $\eta = \lambda_a/\lambda_p$, $k = (\lambda_0)^2 [d\psi(\lambda)/d\lambda]$, где $\lambda_0 = (\lambda_a + \lambda_p)/2$, λ - параметр интенсивности прохождения (эмиссии) зарядов через потенциальный барьер, равный условному математическому ожиданию числа частиц, проходящих через барьер за единицу времени при условии, что барьер находится в данном состоянии; λ_a и λ_p - соответственно наибольшее и наименьшее дозволённые значения параметра интенсивности; $\psi(\lambda)$ - вероятностная характеристика барьера, под которой понимается плотность распределения параметра интенсивности λ [1-3]. Дозволённые значения крутизны k лежат в пределах $-|k_{zp}| < k < +|k_{zp}|$. Введение граничных

значений крутизны k_{zp} обеспечивает положительный характер функции $\psi(\lambda)$. В качестве характеристики эффекта подавления АКДШ используются также глубина подавления шума, равная разности уровней $\gamma(\omega, \eta, k=0)-1$ и $\gamma(\omega, \eta, k \neq 0)-1$, и коэффициент подавления шума, равный отношению $\gamma(\omega, \eta, k=0)-1$ и $\gamma(\omega, \eta, k \neq 0)-1$.

Для определения уровня $\gamma(\omega)-1$ АКДШ на произвольной частоте ω воспользуемся универсальной методикой расчёта [5-8], в рамках которой непрерывное распределение $\psi(\lambda)$ параметра интенсивности заменяется дискретным, параметр интенсивности λ принимает значения $\lambda = \lambda_i$, $i=1, 2, \dots, N$; $N \gg 1$ и

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

Нетрудно показать, что если в качестве плотности распределения параметра интенсивности $\psi(\lambda)$ принимается линейный закон [2,3]

$$\psi(\lambda) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_a - \lambda_p} + k \frac{\lambda - \lambda_0}{\lambda_0^2} & \text{при } \lambda_p \leq \lambda \leq \lambda_a, \\ 0 & \text{при } \lambda < \lambda_p, \lambda > \lambda_a. \end{cases} \quad (2)$$

то уровень аномальной компоненты шума, возникающей вследствие непрерывной смены состояний барьера, определится выражением

$$\gamma(\Omega, \eta) - 1 = 2 \frac{AC - B^2}{\Omega^2 C^2 + B^2}, \quad (3)$$

где

$$A(\Omega, \eta) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i \Lambda_i^2}{\Lambda_i^2 + \Omega^2}, \quad (4)$$

$$B(\Omega, \eta) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i \Lambda_i}{\Lambda_i^2 + \Omega^2}, \quad (5)$$

$$C(\Omega, \eta) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i}{\Lambda_i^2 + \Omega^2}, \quad (6)$$

$$\Lambda_i = \frac{\lambda_i}{\lambda_0} = 1 + \left(\frac{\eta - 1}{\eta + 1} \right) \cdot \left(2 \frac{i-1}{N-1} - 1 \right), \quad (7)$$

$$p_i = \frac{\psi(\lambda_i)}{\sum_{i=1}^N \psi(\lambda_i)} = \frac{\frac{\eta+1}{2(\eta-1)} + k \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} - 1 \right)}{N \frac{\eta+1}{2(\eta-1)} + k \sum_{i=1}^N \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} - 1 \right)}. \quad (8)$$

Здесь $\Lambda_i = \lambda_i/\lambda_0$ – безразмерный параметр интенсивности эмиссии, $\Omega = \omega/\lambda_0$ – безразмерная частота флуктуаций.

Выражения (3) - (8) являются основными расчётными соотношениями, позволяющими

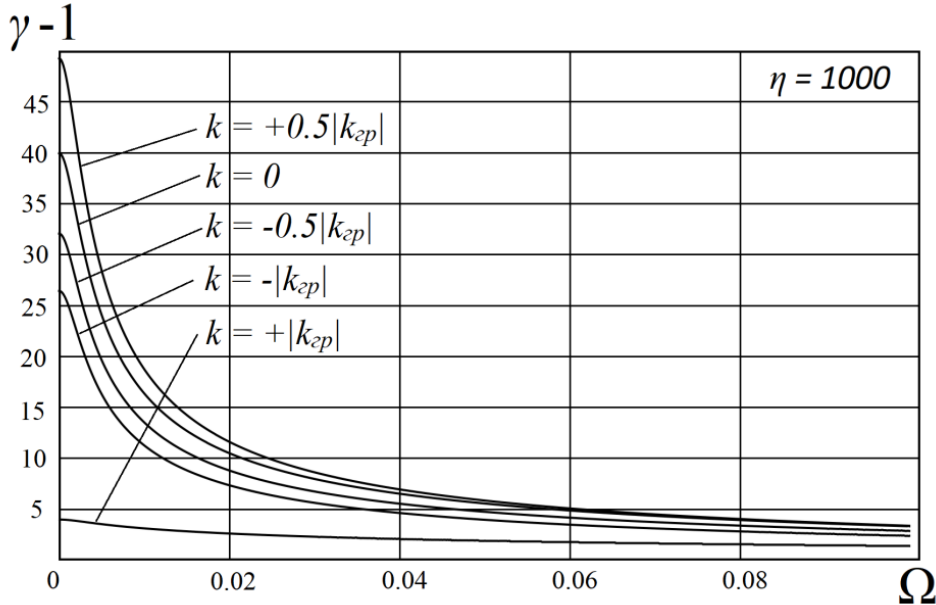


Рис. 1

Кривая, соответствующая $k=0$, то есть отсутствию крутизны, служит индикатором присутствия или отсутствия эффекта подавления АКДШ. Если кривая $\gamma(\Omega)-1$ при некотором $k=const$ лежит ниже кривой для $k=0$, то эффект подавления действует. Если указанная кривая располагается выше кривой для $k=0$, то эффект подавления отсутствует.

В работе [1] было показано, что эффект подавления шума наблюдается лишь в областях $k < 0$ и $k > k_{пор}$, где $k_{пор} > 0$ – пороговое значение параметра крутизны. В области $0 < k < k_{пор}$ наблюдается противоположное явление – повышение уровня АКДШ. Однако эта закономерность была обнаружена на низких частотах Ω , когда кривая спектральной плотности образует плато. Для спадающей части спектра вопрос о влиянии крутизны k на уровень АКДШ остался открытым. Анализ кривых рис. 1 показывает, что указанная выше закономерность наблюдается на всех частотах.

Действительно, все кривые указанного рисунка имеют одинаковый вид и не пересекаются. При $\eta=1000$ пороговое значение крутизны $\approx 0,43$, а её граничное значение $k_{cp} \approx 0,5$ [1]. Таким образом, верхняя кривая рис.1, отвечающая $k=+0,5|k_{cp}|$, соответствует значению крутизны $k \approx +0,25$, которое

определить спектр аномальной компоненты дробовых флуктуаций тока и выяснить влияние на спектр эффекта подавления шума.

Результаты расчётов представлены на рисунках. Спектр аномальных флуктуаций иллюстрирует рис.1, показывающий зависимость уровня АКДШ $\gamma(\Omega)-1$ от безразмерной частоты при величине параметра неоднородности барьера $\eta=1000$ и различных значениях крутизны k вероятностной характеристики.

лежит в области усиления шума. Аналогичные рассуждения показывают, что остальным кривым рисунка соответствуют значения крутизны ($k=-0,5|k_{cp}| \approx -0,25$; $k=-|k_{cp}| \approx -0,5$; $k=+|k_{cp}| \approx +0,5$), лежащие в областях действия эффекта подавления шума. Указанные кривые рис.1 проходят ниже кривой для $k=0$, что свидетельствует о действии эффекта подавления АКДШ на всех частотах флуктуаций.

Сравнение кривых рис. 1 показывает, что с ростом частоты флуктуаций Ω уровень АКДШ и глубина её подавления (разность ординат кривых для $k=0$ и $k \neq 0$) непрерывно уменьшаются.

Анализ кривых позволяет подтвердить и распространить на любые частоты важные выводы, полученные в работе [1] для низких частот флуктуаций. Прежде всего, это вывод о том, что глубина подавления шума растёт с увеличением модуля параметра крутизны. То же самое относится и к выводу о том, что при положительной крутизне достигается более глубокое подавление шума, чем при отрицательной.

Изменение крутизны вероятностной характеристики системы влияет на ширину спектра аномальных флуктуаций. Для иллюстрации этого влияния на рис.2 представлена кривая зависимости ширины $\Delta\Omega$ спектра флуктуаций от относительной крутизны $k/|k_{cp}|$ вероятностной характеристики.

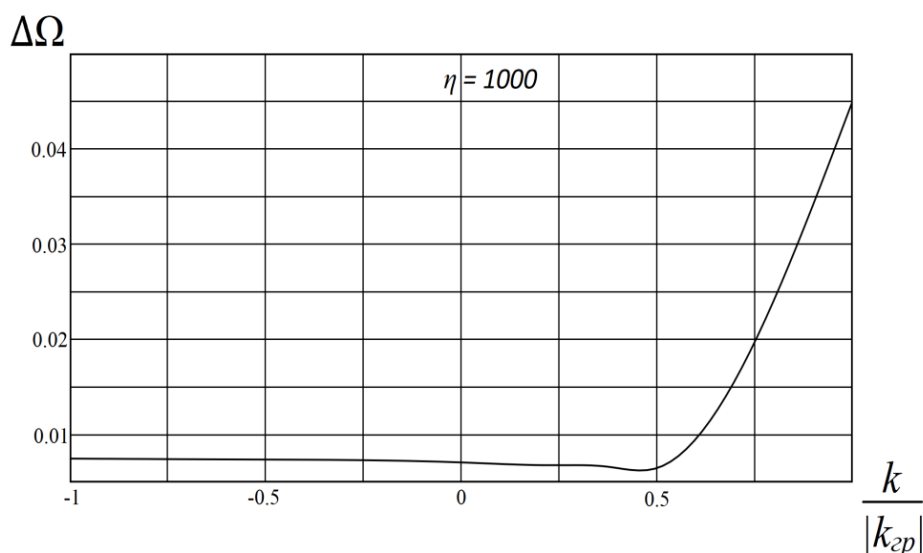


Рис. 2

Указанная кривая соответствует значению параметра неоднородности барьера $\eta=1000$. Особенность кривой заключается в том, что в довольно широкой полосе значений относительной крутизны $k/|k_{cp}|$, когда $-1 < k/|k_{cp}| < 0,5$, ширина спектра практически не меняется и равна 0,005. Однако в области $k/|k_{cp}| > 0,5$ ширина спектра резко возрастает и при $k/|k_{cp}| \rightarrow 1$ увеличивается примерно на порядок. Как следует из рис. 1, именно в этой области значений крутизны вероятностной характеристики наблюдается наиболее эффективное подавление уровня АКДШ. Таким образом, увеличение глубины подавления АКДШ сопровождается расширением полосы шумов.

В заключение отметим основные выводы, полученные в процессе исследования. Эффект подавления АКДШ наблюдается на всех частотах спектра флуктуаций; эффект действует лишь в определенной области значений крутизны вероятностной характеристики; при любой частоте флуктуаций глубина подавления тем выше, чем больше модуль крутизны; на всех частотах флуктуаций при положительной крутизне глубина подавления АКДШ выше, чем при отрицательной; с увеличением частоты уровень АКДШ и глубина её подавления непрерывно уменьшаются; с ростом крутизны вероятностной характеристики системы ширина спектра аномальных флуктуаций увеличивается.

Следует также подчеркнуть, что теоретическая и практическая значимость полученных результатов свидетельствует об эффективности использованной методики анализа сложных физических систем и целесообразности её применения для решения актуальных проблем [9-14] в различных областях физики.

Авторы выражают глубокую благодарность Буганковой Наталии Сергеевне за помощь в работе над статьёй и ценные замечания при её обсуждении.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С., Машников В.В., Инкин М.Г., Шаповалов А.С. мл. Особенности эффекта подавления аномального дробового шума на линейном неоднородном потенциальном барьере // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2022. – В. 29. – С. 26-28.
2. Шаповалов А.С., Машников В.В., Инкин М.Г., Шаповалов А.С. мл. Линейная модель неоднородного потенциального барьера и расчётные выражения для уровня аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С.24-28.
3. Шаповалов А.С., Машников В.В., Инкин М.Г., Шаповалов А.С. мл. Эффект подавления аномального дробового шума линейной модели неоднородного потенциального барьера // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2021. – В. 28. – С. 28-34.
4. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров.- Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983, - 90 с.
5. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Универсальная статистическая модель неоднородного потенциального барьера в режиме генерации аномального дробового шума // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 11-14.
6. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Шаповалов А.С. мл. Методические аспекты общей теории аномального дробового шума и её практического применения // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2020. – В. 27. – С. 6-9.
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 Саратов. ун-та, - 2016. – Вып. 20. – С. 41-46.
8. Шаповалов А.С., Инкин М.Г. Спектр дробового шума на неоднородном потенциальном барьере Релеевского типа // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 2019. – В. 26. – С. 41-44.

9. Игнатьев А.А., Куликов М.Н., Стальмахов В.С., Шаповалов А.С. Шумовые свойства ламп обратной волны со скрещенными полями. – Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983. – 96 с
10. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С., Шаповалов С.А. Исследование многодиодного СВЧ генератора с суммированием мощности в общем резонаторе // Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. – 1997. – В. 3. – С. 67-70.
11. Minkin L., Shapovalov A.S. Heat of Transport of Air in Clay. // Radiation Protection Dosimetry. - 2007.- V. 123, № 2. - P. 221-225.
12. Dittrich W., Shapovalov A.S., Minkin L. Measuring the Specific Heat of Metals By Cooling. // Physics Teacher. – 2010. - V. 48. № 8. - P.531-533.
13. Minkin L. Shapovalov A.S. Indoor Radon Entry: 30 Years Later. // Iranian Journal of Radiation Research. – Summer 2008. – V. 6, № 1. P. 159-164.
14. 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.

SPECTRAL CHARACTERISTICS OF THE SUPPRESSION EFFECT
ANOMALOUS SHOT NOISE OF THE LINEAR
HETEROGENEOUS POTENTIAL BARRIER

A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, M.G. Inkin, A.S. Shapovalov Jr
Saratov National Research State University

It is investigated the influence of the effect of the suppressing anomalous shot noise of the linear heterogeneous potential barrier on the spectrum of shot fluctuations. Data about the dependence of the width of the spectrum of the anomalous noise component from the steepness of the probabilistic characteristic of the system are given.

О ПАРАДОКСЕ ДРУГА ВИГНЕРА В ЯЩИКЕ

Д.В. Чурочкин, С.В. Чурочкина, Э.М. Насанова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Чурочкин Дмитрий Викторович, к.ф.-м.н., доцент, кафедра общей, теоретической и компьютерной физики
Чурочкина Светлана Викторовна, к.ф.-м.н., доцент, кафедра общей, теоретической и компьютерной физики,

Насанова Эльмира Максимовна, студентка 3 курса бакалавриата
института физики СГУ

Обсуждается вариант парадокса друга Вигнера в ящике. Проанализирована согласованность полученных результатов с интерпретациями квантовой механики.

В последнее время заметно возрос интерес к выяснению онтологического статуса волновой функции и вектора квантового состояния, являющимися одними из основных понятий квантовой механики [1]. Проявления так называемой квантовой нелокальности и множество квантовых парадоксов не находят бесспорных и общепринятых непротиворечивых интерпретаций. В этой связи все больше приверженцев находят так называемая информационная интерпретация квантовой механики, истоки которой намечены еще Нильсом Бором [2,3]. Информационная интерпретация отрицает объективное существование волновой функции и вектора состояния, приписывая им статус математических абстракций, исключительная роль которых сводится лишь к инструменту вычислений. Это сразу снимает ряд вопросов к большинству квантовых парадоксов, например, нет проблем с мгновенным коллапсом волновой функции, т.к. ее в природе не существует, с нелокальностью, поскольку все ее проявления опять же связаны с необычным поведением вектора состояния, и т.д. Одним из аргументов в пользу такой интерпретации выдвигается так называемый парадокс друга Вигнера [1], получивший экспериментальное подтверждение. Кратко, сущность парадокса сводится к следующему. Друг Вигнера производит измерение квантовой системы, находящейся в состоянии квантовой суперпозиции. В результате этого измерения вектор состояния коллапсирует и получается определенный результат.

Но сам Вигнер о нем не знает. Для него, поэтому, система по-прежнему находится в состоянии суперпозиции. Что же произошло на самом деле? Был коллапс, или нет? Если друзья не общаются между собой, то у каждого получается своя «объективная» реальность.

Фактически парадокс друга Вигнера – это парадокс наблюдателя, то есть корректного его учета в рамках квантовой механики. Не следует думать, что парадоксы наблюдателя являются исключительно епархией квантовой механики. В классической физике проблема наблюдателя также приводила к парадоксам. Остановимся на этом вопросе подробнее с тем, чтобы лучше понять проблемы, возникающие на квантовом уровне.

Прежде всего, отметим, что мысленные эксперименты имеют давнюю традицию в физике. Ярким ранним примером является парадокс демона Максвелла [4]. На рисунке 1 схематически изображена ситуация, описывающая парадокс демона Максвелла. На рисунке 1 показан маленький наблюдатель – демон, который способен отслеживать отдельные частицы газа. Используя этот контроль, демон может уменьшить энтропию газа, путем разделения частиц по скоростям, что противоречит второму закону термодинамики. Исследование этого парадокса, в конечном счете, привело к пониманию того, что любая необратимая обработка информации (например, демоном) имеет неизбежные энергетические затраты.

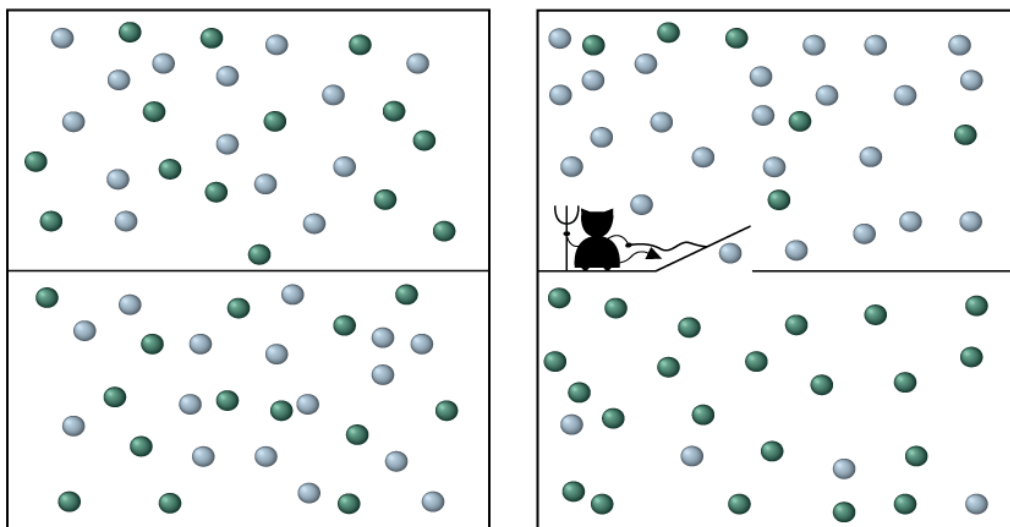


Рисунок 1. Демон Максвелла

Замечательный аспект парадокса демона Максвелла заключается в том, что демон допускает две разные роли. С одной стороны, это *наблюдатель*, который измеряет частицы газа и воздействует на них. С другой стороны, для разрешения парадокса крайне важно рассматривать *самого демона* как физическую систему, подчиняющуюся законам термодинамики.

Фактически, парадокс друга Вигнера, сформулированный и предложенный Юджином Вигнером в 1961 году, основан на той же самой двойственности наблюдателя, но в квантово-

механическом контексте, который с одной стороны является внешним фактором по отношению к наблюдаемой квантовой системе, а с другой стороны, сам требует учета, как часть большой квантово-механической системы, но со стороны другого наблюдателя (см. [1] и ссылки в ней).

Рассмотрим более наглядную версию парадокса друга Вигнера, служащую для прояснения концептуальных основ квантовой механики.

Пусть наблюдатель Алиса находится в совершенно изолированном ящике или лаборатории (см. рис. 2).

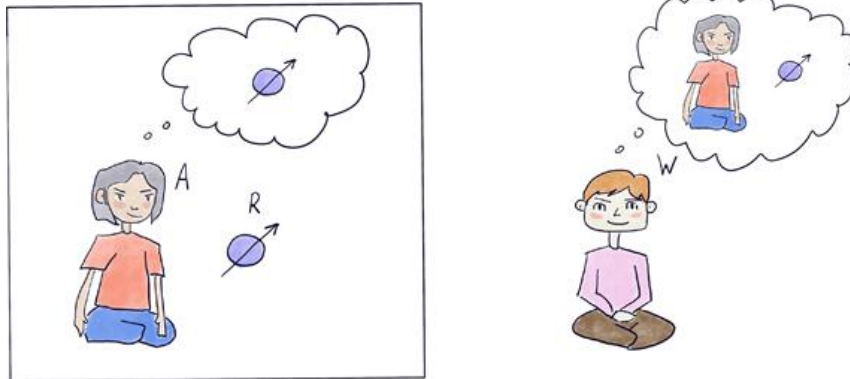


Рисунок 2. Эксперимент Вигнера «друг в ящике»: Алиса проводит свое измерение системы R в изолированном ящике или лаборатории [1]. Таким образом, для Вигнера лабораторию можно рассматривать как большую квантовую систему, которая претерпевает унитарную эволюцию во времени.

Считаем, что, Алиса измеряет квантовую систему R , находящуюся в квантовом состоянии

$$|+\rangle_R = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_R + |1\rangle_R), \quad (1)$$

относительно вычислительного базиса $\{|0\rangle_R, |1\rangle_R\}$ и записывает результат, $a = 0$ или $a = 1$. Делая это, она остается в своей изолированной лаборатории. Тем временем, другой наблюдатель, Вигнер, описывает этот эксперимент со стороны. Он трактует Алису и ее лабораторию, как физическую систему. Более того, с точки зрения Вигнера, Алиса и ее лаборатория изначально должны находиться в чистом состоянии. Важнейшее предположение, лежащее в основе мысленного эксперимента друга Вигнера, заключается в том, что вся лаборатория Алисы, включая саму Алису, подчиняется законам квантовой теории. В частности, память Алисы, в которой она хранит свои наблюдения и выводы, представляет собой квантовую систему, которая обозначается через A и которая, как предполагается, оснащена дискретным набором базовых состояний.

Полезно пометить их с помощью таких утверждений, которые может сделать Алиса, как $| \text{"Я наблюдала } a = 0. \text{"} \rangle_A$ или $| \text{"Я наблюдала } a = 1. \text{"} \rangle_A$. Хотя эта абстракция отражает все, что имеет отношение к нашим соображениям, подчеркивается, что Алиса, конечно, может быть сколь угодно сложной физической системой. Стоит напомнить о том, как выглядит эксперимент с точки зрения Вигнера. Вигнер знает, что память Алисы изначально находится в чистом состоянии, которое может называться $| \text{"Я готова."} \rangle_A$. Обозначим через \bar{A} окружающую среду в лаборатории Алисы, то есть все в лаборатории Алисы, кроме квантовой системы R и памяти Алисы A . Таким образом, лаборатория Алисы образует сложную систему, состоящую из подсистем R , A и \bar{A} . Модификация состояния в ходе измерения Алисы и записи результата принимает вид

$$\begin{aligned} |0\rangle_R \otimes | \text{"Я готова."} \rangle_A \otimes | \text{О.С.} \rangle_{\bar{A}} &\mapsto | \text{lab}_0 \rangle_{RA\bar{A}} := |0\rangle_R \otimes | \text{"Я наблюдала } a = 0. \text{"} \rangle_A \otimes | \text{О.С.}_0 \rangle_{\bar{A}}, \\ |1\rangle_R \otimes | \text{"Я готова."} \rangle_A \otimes | \text{О.С.} \rangle_{\bar{A}} &\mapsto | \text{lab}_1 \rangle_{RA\bar{A}} := |1\rangle_R \otimes | \text{"Я наблюдала } a = 1. \text{"} \rangle_A \otimes | \text{О.С.}_1 \rangle_{\bar{A}}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $| \text{О.С.} \rangle_{\bar{A}}$ обозначает начальное чистое состояние среды в лаборатории Алисы и где $| \text{О.С.}_a \rangle_{\bar{A}}$ снова является чистым состоянием среды, которое может

зависеть от $a \in \{0, 1\}$. Поскольку, согласно предположению, лаборатория изолирована, ее эволюция во времени должна быть унитарной. Вигнер знает, что R (система, которую измеряет Алиса) находится в состоянии суперпозиции. Таким

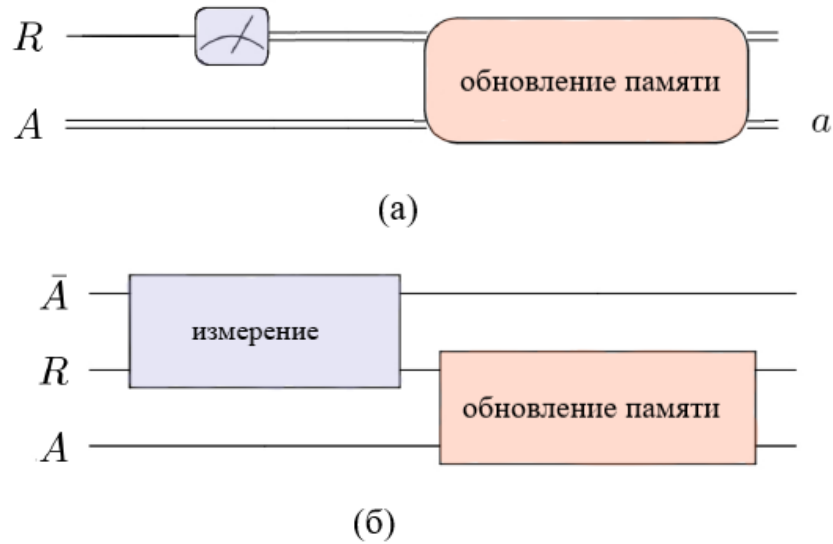
образом, он должен заключить, по линейности, что лаборатория Алисы оказывается в состоянии суперпозиции

$$|\text{lab}_+\rangle_{RA\bar{A}} = \sqrt{\frac{1}{2}} (|\text{lab}_0\rangle_{RA\bar{A}} + |\text{lab}_1\rangle_{RA\bar{A}}) \quad (3)$$

Состояние из (3), конечно, соответствует общепринятой трактовке парадокса Вигнера [1], за

исключением того, что теперь предполагается, что Алиса находится в изолированной лаборатории, так что достаточно рассмотреть окружающую среду внутри нее, которая обозначена \bar{A} .

Точка зрения Алисы и Вигнера на мысленный эксперимент может быть представлена схемами, как показано на рисунке 3.



Обе диаграммы относятся к одному и тому же эксперименту, но их различия отражают разные взгляды на него двух наблюдателей. Например, Алиса обычно описывала бы R только как квантовую систему, но не себя или свое окружение \bar{A} . Более того, она будет относиться к своей собственной памяти как к классическому регистру. Это показано на рисунке 3а. И наоборот, Вигнер рассматривает R , A и \bar{A} , как квантовые системы, как показано на рисунке 3б. Каждая одиночная линия в схеме соответствует квантовой подсистеме, а двойная линия – системе, которая считается классической. Каждый блок на рисунке соответствует операции (также называемой гейтом), выполняемой наблюдателем, и она применяется слева направо.

Каждая схема показывает представление одного наблюдателя об эксперименте. Одиночные линии представляют системы, которые рассматриваются как квантовые системы, а двойные линии обозначают системы, которые считаются классическими в том смысле, что они имеют определенное значение для наблюдателя. Например, память Алисы A является классической для Алисы, но квантовой для Вигнера. Блоки (или гейты) представляют собой отдельные операции, выполняемые наблюдателями. Поля с одинаковым

цветом соответствуют одной и той же операции. В зависимости от точки зрения наблюдателя операция может быть унитарной или нет. Например, для Алисы измерение над R является неунитарной операцией (обозначенной закругленными углами), действующей только на R , тогда как для Вигнера это унитарная операция (прямоугольные углы), действующая на R и окружение Алисы \bar{A} .

- Согласно интерпретациям, которые постулируют субъективный разрез Гейзенберга (к примеру, нео-копенгагенская интерпретация [5]), утверждения всегда относятся к наблюдателю и не должны сравниваться. Следовательно, правильно сказать, что, с точки зрения Алисы, наблюдался окончательный результат $a = 0$ или $a = 1$. В то же время также правильно сказать, что, с точки зрения Вигнера, лаборатория Алисы находится в состоянии суперпозиции $|\text{lab}_+\rangle_{RA\bar{A}}$.
- Согласно интерпретациям, которые постулируют универсальную волновую функцию Вселенной (к примеру, интерпретация Дэвида Бомы [6]), лаборатория Алисы находится в состоянии суперпозиции $|\text{lab}_+\rangle_{RA\bar{A}}$, но это не противоречит

утверждению, что Алиса наблюдает окончательный результат $a = 0$ или $a = 1$. В случае механики Боба фактический результат определяется классическими скрытыми переменными.

Можно сделать вывод, что всем этим интерпретациям удастся каким-то образом обойти противоречие между точками зрения Алисы и Вигнера. Однако ситуация становится более запутанной по мере того, как рассматривается расширение этого мысленного эксперимента.

В заключение отметим, что мысленный эксперимент Вигнера указывает на конфликт между идеей о том, что квантовая теория является универсально обоснованной теорией, и нашим опытом, согласно которому измерения дают определенные результаты. Этот вывод может быть сформулирован как теорема, которая сама по себе не зависит от интерпретации: три разумно звучащих предположения, а именно Q (квантовая теория универсальна), C (взгляды разных наблюдателей взаимно согласуются) и S (измерение имеет единственный результат для измеряющего наблюдателя), противоречат друг другу. Но, очевидно, физика не должна быть противоречивой, следовательно, по крайней мере, одно из трех предположений, должно быть неточным.

Эти три предположения связаны с конкретными правилами рассуждения, которые пользователи квантовой теории могут применять при получении прогнозов относительно результатов эксперимента. Хотя эти правила рассуждения неоспоримы в контексте обычных экспериментов, которые проводятся в лабораториях, их использование уже не является простым в специальных условиях, таких как эксперименты, являющиеся модификациями мысленного эксперимента Вигнера [1]. Здесь прогнозы зависят от нашего выбора того, какие предположения сохраняются или изменяются. Таким образом, сделать этот выбор – задача физики. Это тот момент, когда в игру вступают

интерпретации. Ни одна из основных интерпретаций квантовой теории не отвергает предположение S . Принимая, таким образом, S как должное, в основном остается выбор между Q и C , и, при этом, интерпретации разделяются на две категории. Одна из них состоит из интерпретаций, таких как традиционная копенгагенская теория или теория коллапса, которые отвергают Q . По их мнению, квантовая теория не является универсально верной – скорее, определенные части мира принадлежат к классической области и, следовательно, неточно описываются теорией. Другая категория включает в себя такие интерпретации, как, к примеру, неокопенгагенская интерпретация, согласно которой квантовая теория применима к любой физической системе, так что Q выполняется. Однако эта интерпретация затем должна отвергать предположение C , т.е. заявления, сделанные разными наблюдателями, не всегда будут взаимно согласованными.

Ни один из двух вариантов не представляется удовлетворительным. Любая интерпретация, которая отвергает Q , должна включать четкий критерий, определяющий тип систем, к которым все еще применим квантовый формализм. Однако, за исключением некоторых теорий коллапса, ни одна из интерпретаций в этой категории не предоставляет такого критерия. И наоборот, отказ от предположения о согласованности C без замены равносильно лишению наблюдателей способности рассуждать друг о друге, что следует воспринимать скептически. Таким образом, любая интерпретация, которая отвергает C , должна заменить его другими предположениями, позволяющими наблюдателям сравнивать свои индивидуальные взгляды. Хотя до недавнего времени эта проблема в значительной степени игнорировалась, но можно с оптимизмом ожидать, что будущие исследования, вдохновленные (реальными или мысленными) экспериментами, вскоре прольют на это больше света.

Библиографический список

1. Nurgalieva N., Renner R. Testing quantum theory with thought experiments // Contemporary Physics. 2020. Vol. 61, Issue 3. P. 193-216.
2. Bohr N. Atomic Theory and the Description of Nature: Four Essays. Volume 1. Cambridge University Press, 1934.
3. Heisenberg W. The representation of nature in contemporary physics // Daedalus. 1958. Vol. 87, No. 3. P. 95-108.
4. Нильсен М., Чанг. И. Квантовые вычисления и квантовая информация. М: Мир, 2006.
5. de Muynck W. M. From Copenhagen to neo-Copenhagen interpretation // AIP Conference Proceedings. 2007. Vol. 962, Issue 1. P. 75-84.
6. Bohm D. A suggested interpretation of the quantum theory in terms of "hidden" variables. I. // Physical Review. 1952. Vol. 85, Issue 2. P. 166-179.

ON WIGNER'S FRIEND PARADOX IN A BOX

D. Churochkin, S. Churochkina, E. Nasanova
Saratov State University

A version of Wigner's friend paradox in a box was discussed. Consistency of the obtained results with the interpretations of quantum mechanics was analysed.

ДВУМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ О ЯМАХ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ
С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ, ПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ ОСЯМ КООРДИНАТ

Н.Е. Нюнько, К.В. Санков

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского
Нюнько Николай Евгеньевич, к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры общей теоретической
и компьютерной физики

АО ВНИИПИ Газдобыча, Саратов
Санков Константин Викторович, Начальник ОКСТИ

Рассмотрены плоские задачи для свободной частицы в бесконечной яме с границами, параллельными осям координат.

Двумерное уравнение Шредингера для свободной частицы [1,2,3] имеет вид:

$$-(\hbar^2/2m)(\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi(x,y) = E\psi(x,y) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi(x,y) = -E\psi(x,y) \quad (1)$$

Здесь $E = (2m/\hbar^2)E$, E – полная энергия частицы, волновая функция (ВФ) факторизуется – $\psi(x,y) = \varphi(x)\chi(y)$, $E = E_x + E_y$. В результате имеем общее решение этого уравнения в виде произведения решений уравнений

$$\varphi''(x)/\varphi(x) = -E_x, \quad \chi''(y)/\chi(y) = -E_y$$

$$\psi(x,y) = \varphi_I(k_x x)\chi_I(k_y y) =$$

$$= [A_1 I(k_x x) + A_2 I(-k_x x)] [A_3 I(k_y y) + A_4 I(-k_y y)]$$

$$k_x = \sqrt{E_x}, \quad k_y = \sqrt{E_y}, \quad I(x) = \exp(ix) \quad (2)$$

В данной работе рассматриваются потенциальные ямы с бесконечными стенками, многочисленные границы которых параллельны осям координат.

Хорошо известна подобная задача [1,2,3] для прямоугольной ямы, имеющей четыре границы $x=0$, $x=a$, $y=0$, $y=b$, на которых ВФ (2) частицы обращается в ноль.

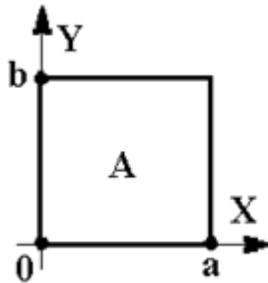


Рис.1

Обращением ВФ в ноль на границах ($x=0$, $y=0$) из общего решения (2)

$$\psi(x,y) = \varphi_I(k_x x)\chi_I(k_y y)$$

формируется произведение

$$\psi(x,y) = A \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

а учет двух других границ ($x=a$, $y=b$) приводят к дискретным значениям компонент волнового вектора $k_x = n\pi/a$ и $k_y = m\pi/b$, $n, m = 1, 2, 3, \dots$

Возрастание числа параллельных границ, усложняющее конфигурацию ямы, приводит к увеличению граничных условий, обеспечивающих зануление ВФ на границах.

Такие потенциальные ямы принципиально представляют из себя невыпуклые многоугольники типа приведённых на следующих рисунках

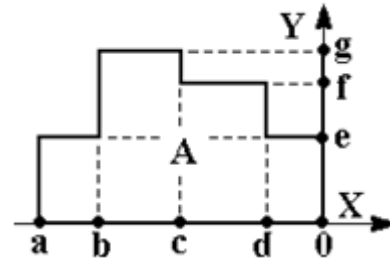


Рис.2

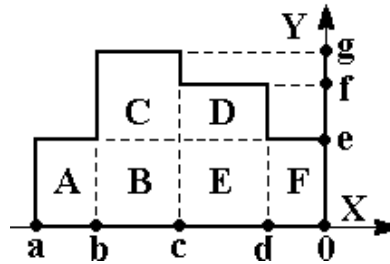


Рис.3

Первый из них соответствует интерпретации потенциальной ямы как единой области, в которой на ВФ (2) можно накладывать граничные условия $x=0$, $y=0$, $x=d$, $y=e$, и т.д. В отличие от такого некорректного, на наш взгляд, подхода (в этом случае, например, на линии $x=d$ произойдёт зануление ВФ не только на границе, но и внутри области A), яму надо рассматривать, как совокупность прямоугольных частей, как это представлено на Рис.3.

В каждой из этих частей A, B, C, ... надо приравнять нулю ВФ на внешних границах. На следующем рисунке символически показаны типичные границы части области подобной ямы

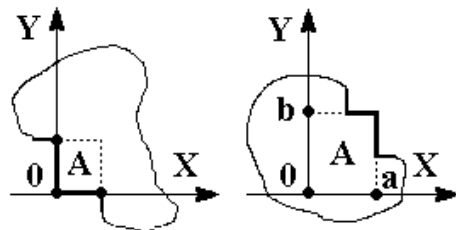


Рис.4

В соответствии с Рис.2, для области A при $x=0$ и $y=0$ ВФ принимает вид

$$\varphi_I(k_x 0) = 0 \Rightarrow A_2 = -A_1,$$

$$\chi_I(k_y 0) = 0 \Rightarrow A_4 = -A_3$$

$$\psi(x,y) = A \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

Во втором случае при $x=a$ и $y=b$ для $\psi(x,y)=\varphi_l(k_x x)\chi_l(k_y y)$ получаем

$$\varphi_l(k_x a)=0 \Rightarrow A_2=-A_1 I(2k_x a),$$

$$\chi_l(k_y b)=0 \Rightarrow A_4=-A_3 I(2k_y b)$$

$$\psi(x,y)=A \sin[k_x(x-a)] \sin[k_y(y-b)]$$

После наложения на составляющие области подобных граничных условий, для непрерывности ВФ необходимо сшить полученные функции

$$\psi_A(x,y)=\psi_B(x,y)=\dots=\psi_F(x,y)$$

Рассмотрим описанный процесс на примере несложной конфигурации, приведённой на рисунке. Вначале трактуем яму, как единую область А

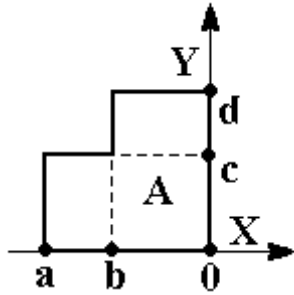


Рис.5

На границах $y=0$ $x=0$ области А, в соответствии с изложенным выше, ВФ принимает вид

$$\psi(x,y)=A \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

С учетом граничных условий получим

$$x=a \quad \psi(x,y)=A \sin(k_x a) \sin(k_y y)=0 \Rightarrow \\ \Rightarrow k_{n1x}=n_1 \pi/a$$

$$y=d \quad \psi(x,y)=A \sin(k_x x) \sin(k_y d)=0 \Rightarrow \\ \Rightarrow k_{m1y}=m_1 \pi/d$$

$$x=b \quad \psi(x,y)=A \sin(k_x b) \sin(k_y y)=0 \Rightarrow \\ \Rightarrow k_{n2x}=n_2 \pi/b$$

$$y=c \quad \psi(x,y)=A \sin(k_x x) \sin(k_y c)=0 \Rightarrow \\ \text{где } n_i, m_i=1,2,\dots \quad (3)$$

и ВФ принимает вид

$$\psi(x,y)=A \sin(k_{n1x} x) \sin(k_{m1y} y)$$

Естественно, что из двух множеств компонент k_{n1x} (как и для k_{m1y}) должны учитываться только совпадающие элементы, что приводит к неожиданному заключению о необходимости рассмотрения таких ям с учетом конкретизации соотношений между числами a, b и c, d , связанными с длинами соответствующих границ.

При трактовке области ямы, как совокупности областей А, В и С

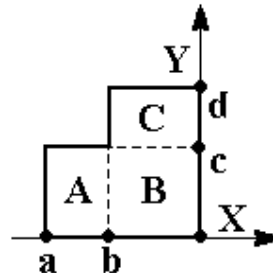


Рис.6

для сшиваемых компонент ВФ $\psi_A(x,y)$, $\psi_B(x,y)$ и $\psi_C(x,y)$ получим

$$\text{Обл. В } \Rightarrow x=0, y=0,$$

$$\psi_B(x,y)=A \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

$$\text{Обл. А } \Rightarrow x=a, y=0, y=c$$

$$\psi_A(x,y)=A \sin[k_x(x-a)] \sin(k_y y)$$

$$\psi_A(x,y)=A \sin[k_x(x-a)] \sin(k_y c)=0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_{m1y}=m_1 \pi/c$$

$$\psi_A(x,y)=A \sin[k_x(x-a)] \sin(k_{m1y} y)$$

$$\text{Обл. С } x=0, y=d, x=b$$

$$\psi_C(x,y)=A \sin(k_x x) \sin[k_y(y-d)]$$

$$\Rightarrow k_{n1x}=n_1 \pi/b \quad (4)$$

Теперь остаётся сшить полученные компоненты ВФ. При этом в части $\psi_A(x,y)$ слагаемое $k_x a$ в аргументе первого множителя можно убрать требованием обращения его в период синуса

$$\psi_A(x,y)=A \sin(k_x x - k_x a) \sin(k_{m1y} y) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_x a = 2n_2 \pi \Rightarrow k_{n2x} = 2n_2 \pi/a$$

Аналогично поступая со слагаемым $k_y d$ в части $\psi_C(x,y)$, получим

$$\psi_C(x,y)=A \sin(k_{n1x} x) \sin(k_y y - k_y d) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow k_y d = 2m_2 \pi \Rightarrow k_{m2y} = 2m_2 \pi/d$$

Таким образом получили необходимые для сшивания компоненты ВФ

$$\psi_A(x,y)=A \sin(k_{n2x} x) \sin(k_{m1y} y)$$

$$\psi_B(x,y)=A \sin(k_x x) \sin(k_y y)$$

$$\psi_C(x,y)=A \sin(k_{n1x} x) \sin(k_{m2y} y)$$

что даёт окончательное выражение для ВФ

$$\psi_A(x,y)=\psi_B(x,y)=\psi_C(x,y)=A \sin(k_{n1x} x) \sin(k_{m1y} y) \quad (5)$$

$$k_{n1x} = \{n_1 \pi/b \cap 2n_2 \pi/a\}, \quad k_{m1y} = \{m_1 \pi/c \cap 2m_2 \pi/d\}$$

Очевидно, что результаты второго подхода (4) (который мы считаем правильным) отличаются от первого (3), однако требующий осмысления любопытный вопрос о необходимости существования кратности длин границ в подобных задачах возникает при обоих подходах.

Библиографический список

1. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т.1, Изд-во Мир, М., 1974.
2. Л. Шифф. Квантовая механика. Изд-во ИЛ, М., 1959
3. Н.Е. Ньюнко, К.В.Санков. Некоторые двумерные задачи квантовой механики для областей, ограниченных параллельными бесконечными стенками. Вопросы прикладной физики.: Межвуз. науч. сб. Саратов.: Изд-во СГУ. - 2019. - Вып.25. – С.47-49.

TWO-DIMENSIONAL PROBLEMS ABOUT PITS OF COMPLEX SHAPE WITH INFINITE WALLS PARALLEL TO THE COORDINATE AXES

¹N.E. Nyun'co, ²K.V. Sankov

¹Saratov state University

²Saratov region AO VNIPI GAZDOBYCHA, RUSSIA

Plane problems for a free particle in an infinite well with boundaries parallel to the coordinate axes are considered.

НЕКОТОРЫЕ ДВУМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ О СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЕ В КОСОУГОЛЬНЫХ БЕСКОНЕЧНЫХ ЯМАХ

Н.Е. Нюнько, К.В. Санков

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского
 Нюнько Николай Евгеньевич, к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры общей теоретической и компьютерной физики

АО ВНИИПИ Газдобыча, Саратов
 Санков Константин Викторович, Начальник ОКСТИ

Рассмотрены плоские задачи для свободной частицы в бесконечной яме косоугольной формы.

Двумерное уравнение Шредингера для свободной частицы [1,2] имеет вид:

$$-(\hbar^2/2m)(\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi(x,y) = E\psi(x,y) \Rightarrow (\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi(x,y) = -E\psi(x,y) \quad (1)$$

Здесь $E = (2m/\hbar^2)E$, E - полная энергия частицы, волновая функция (ВФ) факторизуется $\psi(x,y) = \varphi(x)\chi(y)$, $E = E_x + E_y$. В результате имеем общее решение уравнения в виде произведения

$$\psi(x,y) = \varphi_l(k_x x)\chi_l(k_y y) = [A_1 I(k_x x) + A_2 I(-k_x x)][A_3 I(k_y y) + A_4 I(-k_y y)] \quad (2)$$

$$k_x = \sqrt{E_x}, k_y = \sqrt{E_y}, I(x) = \exp(ix)$$

В данной работе рассматриваются косоугольные потенциальные ямы с бесконечными стенками.

Потенциальную яму называем косоугольной при наличии хотя бы одной границы - прямой линии, не параллельной осям координат. Для понимания особенностей подобных задач рассмотрим простой случай такой области в сравнении с известной задачей о прямоугольной двумерной яме с бесконечными стенками.

Задача о частице в прямоугольной бесконечной яме характеризуется наличием четырёх границ, на которых ВФ должна быть равна нулю.

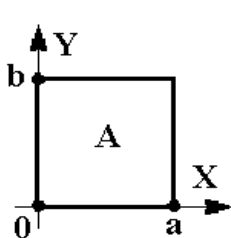


Рис.1

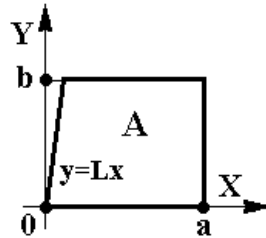


Рис.2

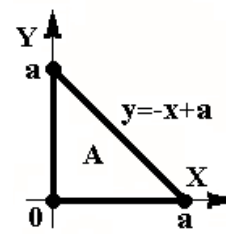


Рис.3

Две границы ($x=0$ и $y=0$) области бесконечной ямы А на Рис.1 формируют из ВФ $\varphi_l(k_x x)\chi_l(k_y y)$ произведение синусов

$$\psi(x,y) = \varphi_l(k_x x)\chi_l(k_y y) = A \sin(k_x x)\sin(k_y y)$$

а условия обнуления на двух других ($x=a$ и $y=b$) приводят к дискретности компонент $k_{xn} = n\pi/a$ и $k_{ym} = m\pi/b$, $n, m = 1, 2, 3, \dots$

На Рис.2 изображена аналогичная ситуация с тремя прямоугольными границами и косоугольной границей $y=Lx$. Параметр L при стремлении к $+\infty$ должен переводить вторую задачу в первую.

Для косоугольной ямы дело обстоит сложнее из-за наличия четвёртого условия на линии $y=Lx$. Граничные условия при $y=0$ и $x=a$ формируют функцию $\psi(x,y) = A \sin[k_x(x-a)]\sin(k_y y)$, а граничное

условие $y=b$ приводит к дискретности компоненты волнового вектора k_y

$$\psi(x,b) = 0 \Rightarrow \sin(k_y b) = 0 \Rightarrow k_{ym} = m\pi/b, m = 1, 2, 3, \dots$$

Далее необходимо выяснить, условие зануления функции

$$\psi(x,y) = A \sin[k_x(x-a)]\sin(k_y y)$$

на линии $x=y/L$

$$\psi[(y/L), y] = A \sin\{k_x[(y/L)-a]\}\sin(k_y y) = 0$$

Очевидно, что при $L \rightarrow +\infty$ получаем результат для прямоугольной ямы (линия $y=Lx$ переходит в координатную ось $x=0$), и в пределе получаем правильное дискретное соотношение для компоненты k_x

$$A \sin(k_x a) = 0, k_{xn} = n\pi/a, n = 1, 2, 3, \dots$$

Стандартный приём приводит к результату

$$\psi[(y/L), y] = 0 \Rightarrow \sin\{k_x[(y/L)-a]\} = 0 \Rightarrow k_{xn} = n\pi/(a-x), 0 < x < b/L$$

Далее рассмотрим простейшую косоугольную область, изображённую на Рис.3 - треугольную, имеющую только три границы, на которых ВФ должна обращаться в нуль.

С учетом обнуления при $x=0$ и $y=0$, ВФ принимает привычный вид

$$\psi(x,y) = \varphi_l(k_x x)\chi_l(k_y y) = A \sin(k_x x)\sin(k_y y)$$

Обращение в нуль на третьей границе $y=-x+a$, приводит к условиям

$$\psi(x, -x+a) = A \sin(k_x x)\sin[k_y(x-a)] = 0$$

Можно из условия $\sin[k_y(a-x)] = 0$ потребовать $k_{yn} = n\pi/(a-x)$.

Можно использовать соотношение для произведения синусов

$$\cos[(k_x + k_y)x - k_y a] - \cos[(-k_x + k_y)x - k_y a] = 0$$

из которого можно извлечь либо факт зануления компоненты k_x , приводящего к отсутствию частицы в такой яме, либо при равенстве компонент k_x и k_y возможно получение из соотношения

$$\cos[2k_x x - k_x a] - \cos[k_x a] = 0$$

дискретности для $k_{xn} = n\pi/x$. В любом случае настораживает зависимость компонент волнового вектора от координаты и сингулярности при $x=a$, или при $x=0$.

Далее рассмотрим задачу, соответствующую Рис.4:

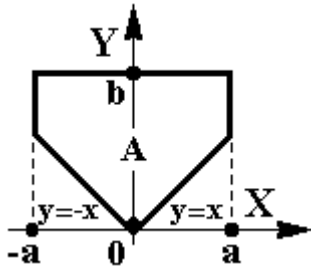


Рис.4

Учёт границ ($x=a, x=-a, y=b$), параллельных осям координат,

$$\begin{aligned} \psi_A(x,b)=0 &\Rightarrow \psi_A(x,y)=\varphi_1(k_x x)\sin[k_y(y-b)] \\ \psi_A(a,y)=0 &\Rightarrow \psi_A(x,y)=A\sin[k_x(x-a)]\sin[k_y(y-b)] \\ \psi_A(-a,y)=0 &\Rightarrow \sin[2k_x a]=0 \Rightarrow k_{xn}=n\pi/2a \end{aligned}$$

приводит для ВФ к выражению

$$\psi_A(x,y)=A\sin[k_{xn}(x-a)]\sin[k_y(y-b)]$$

На границе $y=|x|$ имеем

$$\begin{aligned} \psi_A(x,|x|)=0 &\Rightarrow \sin[k_y(|x|-b)]=0 \Rightarrow \\ &\Rightarrow k_{yn}=n\pi/(b-|x|) \end{aligned}$$

Отметим, что полученные результаты требуют дальнейшего осмысления факта дискретности компонент волнового вектора, содержащих зависимость от координаты.

Библиографический список

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

SOME TWO-DIMENSIONAL FREE PARTICLE PROBLEMS IN OBLIQUE INFINITE WELLS

¹N.E. Nyun`co, ²K.V. Sankov.

¹Saratov state University

²Saratov region AO VNIPI GAZDOBICHA, RUSSIA

The planar problems for a free particle in an infinite well of oblique shape are considered.

Г.Н. Тен

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского*Тен Галина Николаевна*, д.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики

Рассмотрены структура и колебательные спектры 2-гидрокси,4-оксо- таутомера урацила. Проведен сравнительный анализ ИК и КР спектров урацила и его таутомера. Показано, что в спектре таутомера проявляется ряд линий, позволяющих однозначно определить присутствие 2-гидрокси,4-оксо таутомера в его смеси с урацилом.

Введение. Прототропная таутомерия изучается различными экспериментальными и теоретическими методами, среди которых наиболее распространенными являются колебательная спектроскопия и квантово-химические расчеты [1-3]. Интерпретация экспериментального колебательного спектра смеси таутомерных форм, близких по своей структуре, вызывает серьезные затруднения. Особенно сложно однозначно определить по колебательным спектрам таутомерный состав вещества, состоящего из нескольких, например, оксо-гидрокси таутомеров, каждый из которых может иметь, как в случае урацила (Ura), цис- и транс-изомерию. Недостаточная информативность экспериментальных спектров, как и их отсутствие, может быть восполнена теоретическими расчётами и анализом

особенностей колебательных спектров различных таутомерных форм. Ранее были проведен расчёт и дана интерпретация колебательных спектров 12 цис- и транс-изомеров таутомеров Ura, при этом сравнительный анализ со спектрами Ura не был выполнен [2].

В данной работе с целью определения влияния прототропной таутомерии на структуру и колебательные спектры выполнен сравнительный анализ ИК и КР спектров Ura и его 2-гидрокси,4-оксо таутомера (Taut) в приближении B3LYP/6-311+G(d,p) [4].

Результаты и обсуждение. На рис. 1 приведены молекулярные диаграммы Ura (рис.1а) и его таутомера Taut (рис. 1б).

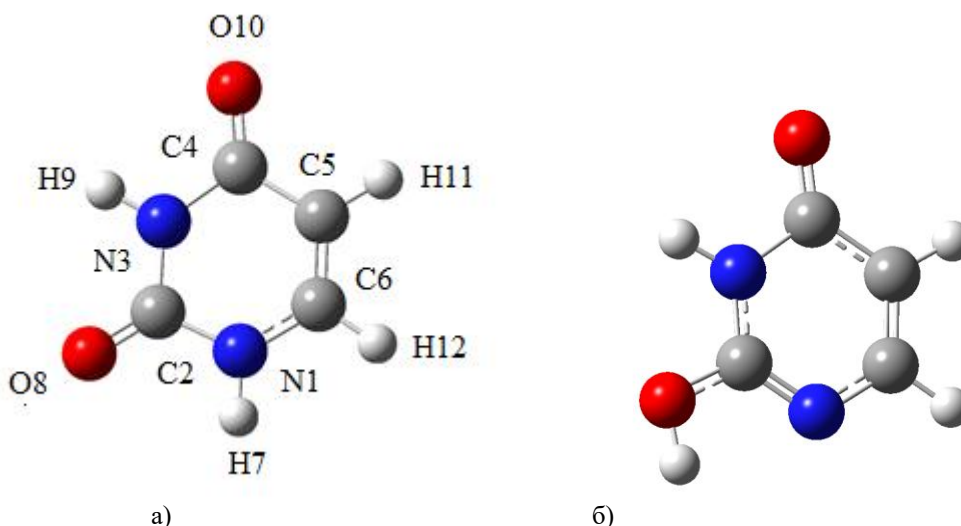


Рис. 1. Молекулярные диаграммы Ura (а) Taut (б) с нумерацией атома

Наибольшие структурные изменения при превращении Ura в Taut наблюдаются в области переноса протона: связь N_1C_2 уменьшается, а связь C_2O_8 увеличивается на 0.096 и 0.127 Å, соответственно; угол $N_1C_2N_3$ увеличивается на 22.8, а угол $N_3C_2O_8$ уменьшается на 10.2 град (табл.1).

Значения частот и интенсивностей колебательных ИК и КР Taut приведены в табл.2 данной статьи, а колебательные спектры Ura – в статье [6].

Таблица 1. Экспериментальные и вычисленные длины связей (Å), углы (град) Ura и Taut

Связь	Ura [5]	Ura	Taut	угол	Ura [5]	Ura	Taut
N ₁ C ₂	1.399	1.393	1.297	N ₁ C ₂ N ₃	114.6	112.9	124.7
C ₂ N ₃	1.399	1.384	1.352	C ₂ N ₃ C ₄	126.0	128.1	123.1
N ₃ C ₄	1.399	1.412	1.424	N ₃ C ₄ C ₅	115.5	113.5	111.7
C ₄ C ₅	1.462	1.458	1.447	C ₄ C ₅ C ₆	119.7	113.5	120.1
C ₅ C ₆	1.343	1.347	1.360	N ₁ C ₆ C ₅	122.1	121.9	124.8
N ₁ C ₆	1.399	1.375	1.373	C ₂ N ₁ C ₆		123.6	115.5
C ₅ H ₁₁	1.072	1.079	1.081	C ₂ N ₁ H ₇	115.8	115.2	
C ₆ H ₁₂	1.072	1.083	1.085	N ₁ C ₂ O ₈	123.8	122.3	121.1
C ₂ O ₈	1.212	1.212	1.339	N ₃ C ₂ O ₈		124.3	114.1
C ₄ O ₁₀	1.212	1.215	1.216	C ₂ N ₃ H ₉	116.1	115.6	119.8
N ₁ H ₇	1.002	1.009		N ₃ C ₄ O ₁₀	120.2	120.3	119.8
N ₃ H ₉	1.002	1.013	1.013	C ₅ C ₄ O ₁₀		126.2	128.5
O ₈ H ₇			0.968	C ₄ C ₅ H ₁₁	118.9	118.1	117.8

Таблица 2. Вычисленные значения частот (ν , см⁻¹) и интенсивностей спектров ИК ($I_{ИК}$, км/моль) и КР ($I_{КР}$, Å⁴/а.е.м.) Taut

№ кол.	Taut			Отнесение
	ν_p	$I_{ИК}$	$I_{КР}$	
1	131	2.3	0	χ
2	210	2.8	0.7	χ, χ (C ₂ O ₈ H)
3	360	3.3	1.5	β (C ₂ O ₈), β (C ₄ O ₁₀)
4	418	36.6	0.6	χ
5	516	115.6	8.3	ρ (O ₈ H)
6	521	24.8	0.7	γ
7	539	0.9	5.2	γ
8	573	0.9	5.9	γ
9	664	65.6	0.9	ρ (N ₃ H)
10	724	0.4		ρ (C ₄ O ₁₀)
11	764	18.6	0.5	ρ (C ₂ O ₈)
12	778	9.3	20.9	Q(CC), Q(CN)
13	833	49.1	0.2	ρ (C ₅ H), ρ (C ₆ H)
14	955	21.1	1.5	Q(N ₃ C ₄), Q(C ₄ C ₅), γ
15	1001	1.0	1.7	ρ (C ₅ H), ρ (C ₆ H)
16	1013	34.9	4.3	Q(N ₁ C ₂), Q(N ₁ C ₆), Q(C ₂ N ₃), Q(N ₃ C ₄), γ
17	1101	0.9	3.7	Q, β (C ₅ H), β (C ₆ H)
18	1181	197.3	1.9	Q, β (O ₈ H), β (N ₃ H), β (C ₆ H)
19	1216	72.5	19.4	Q, β (C ₅ H)
20	1298	9.9	3.6	Q(C ₂ O ₈), β (N ₃ H), β (C ₆ H)
21	1342	12.3	9.0	Q, β (N ₃ H), β (C ₆ H), β (O ₈ H)
22	1436	7.3	3.6	Q(C ₄ C ₅), β (C ₅ H), β (C ₆ H)
23	1525	5.6	21.9	Q(C ₂ N ₃), Q(C ₅ C ₆), β (N ₃ H)
24	1593	591.7	41.7	Q(C ₂ O ₈), Q(C ₄ O ₁₀), Q(C ₅ C ₆)
25	1658	199.3	6.3	Q(N ₁ C ₂), Q(C ₅ C ₆)
26	1773	706.0	42.7	Q(C ₄ O)
27	3174	13.8	106.9	q(C ₆ H)
28	3224	0.3	119.3	q(C ₅ H)
29	3593	70.3	88.5	q(N ₃ H)
30	3777	126.3	113.7	q(O ₈ H)

Поскольку энергии Ura и Taut отличаются на 11.5 ккал/моль, то возможно одновременное существование рассматриваемых молекулярных структур. Вследствие отсутствия экспериментальных данных, в данной работе выполнен расчёт и теоретическое сравнение ИК и КР спектров смеси

Ura и Taut с использованием программы [7], позволяющей не только предсказывать спектр суперпозиции таутомеров, но и их количественное отношение. На рис. 2 приведены ИК (а) и КР спектры (б) смеси Ura и Taut (по 50%) с полушириной спектральных линий, равной 10 см^{-1} .

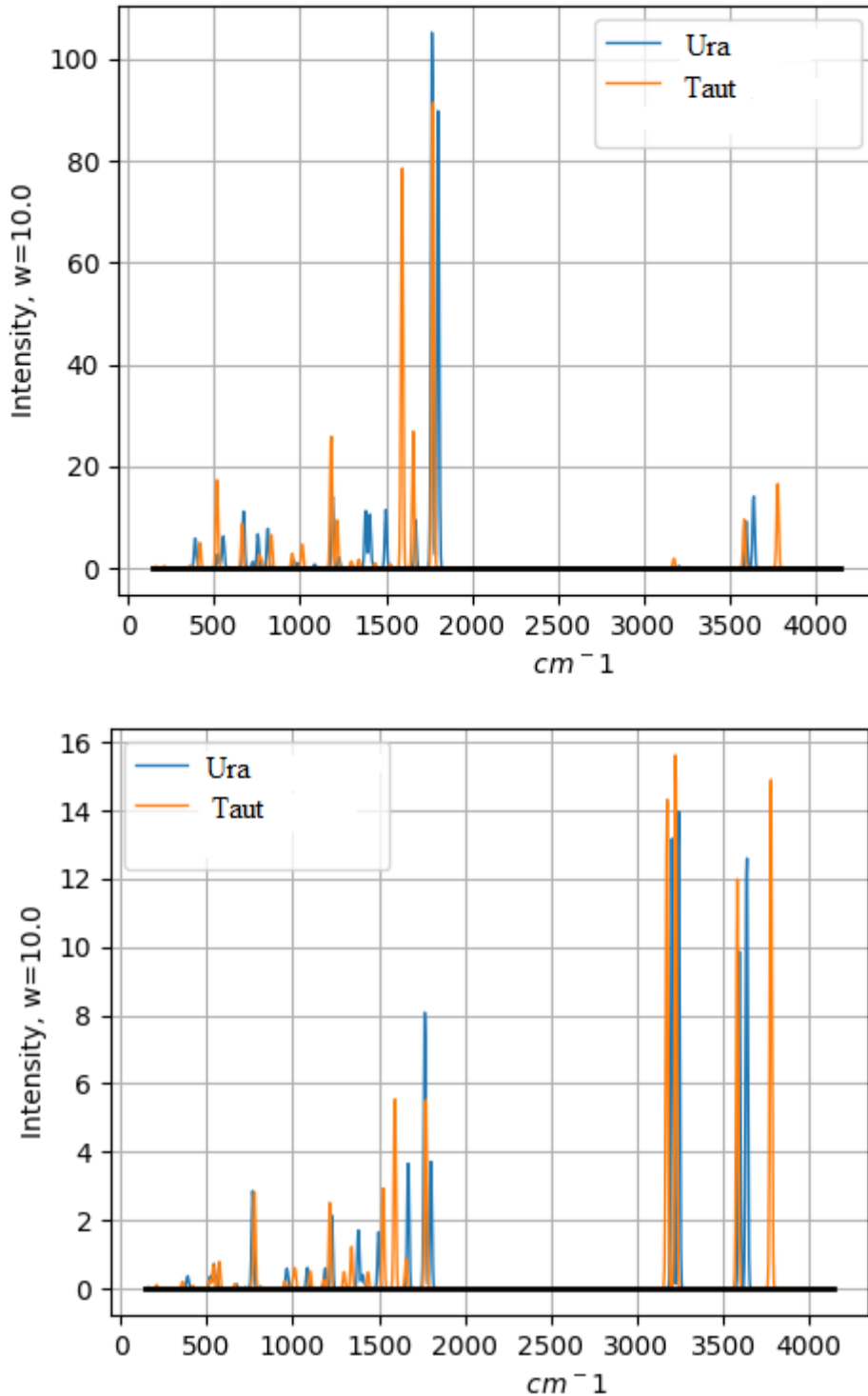


Рис.2. Колебательные ИК (вверху) и КР (внизу) спектры Ura и Taut

Сравнение колебательных спектров Ura и Taut показывает, что наличие Taut в ИК спектре смеси можно судить по проявлению двух сильных по интенсивности полос поглощения в спектре Taut в области ~ 1180 и $\sim 1600\text{ см}^{-1}$, отвечающие

деформационным $\beta(\text{O}_8\text{H})$ и валентным колебаниям $Q(\text{C}_2\text{O}_8)$, соответственно (колебания 18 и 24). Основное отличие спектров КР Ura и Taut состоит в проявлении в спектре Taut интенсивных линий в области ~ 1600 и $\sim 3800\text{ см}^{-1}$, отвечающие валентным

колебаниям $Q(C_2O_8)$ и $q(O_8H)$ (колебания 24 и 30).

Выводы. Выполнен расчёт структуры и колебательных спектров 2-гидрокси, 4-оксо таутомера урацила. Показано, что энергии U_{gr} и T_{aut} отличаются на 11.5 ккал/моль. Сравнительный анализ колебательных ИК и КР спектров U_{gr} и его

2-гидрокси-4-оксо таутомера показывает, что наличие в спектре смеси ряда полос поглощения и линий позволяет с определенностью говорить о таутомерном превращении $U_{gr} \leftrightarrow T_{aut}$.

Библиографический список

1. Тен Г.Н., Баранов В.И. Таутомерия оснований нуклеиновых кислот. Часть 1. Теоретический анализ таутомерного состава оснований нуклеиновых кислот методами колебательной и электронной спектроскопии. – Саратов, Изд-во Саратовского университета, 2015 г., 132 с.
2. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Щербаков Р.С., Баранов В.И. Расчёт и анализ структуры и колебательных спектров таутомеров урацила // Журнал структурной химии. 2010. Т.51, № 1. С. 38-45.
3. Тен Г.Н., Бурова Т.Г., Баранов В.И. Исследование таутомерных форм пурина методами колебательной спектроскопии и резонансного комбинационного рассеяния. I. Определение таутомерных форм пурина в разных фазовых состояниях. // Известия вузов. Физика. 2004. №6. с. 47-59.
4. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2009.
5. Ferenczy G, Haesanyi L., Rozsondai B., Hargittai I. J. Mol. Struct., 1986. V. 140. P. 71-80
6. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Баранов В.И. Влияние водородной связи на структуру и колебательные спектры комплементарных пар оснований нуклеиновых кислот. 1. Аденин- Урацил // Журнал структурной химии. 2010. т. 51, № 3. С. 474-482.
7. Тен Г.Н., Савостьянов Г.В., Щербакова Н.Е. Программа SPECTRAMIXER. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ 2021662098, 22.07.2021. Заявка № 2021661306 от 20.07.2021.

VIBRATIONAL SPECTRA OF 2-HYDROXY,4-OXO-TAUTOMER OF URACIL

G.N. TEN

Saratov State University

The structure and vibrational spectra of the 2-hydroxy,4-oxo-tautomer of uracil are considered. A comparative analysis of IR and Raman spectra of uracil and its tautomer was carried out. It is shown that a number of lines appear in the spectrum of the tautomer, which make it possible to unambiguously determine the presence of 2-hydroxy,4-oxo tautomer in its sweep with uracil.

УДК 539.194; 539.196.3

СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК СПЕКТРОВ ТРИФЕНИЛФОСФИТА

Л. М. Бабков, Н.А. Давыдова, И. В. Ивлиева (Перетокина)

Саратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского

Бабков Лев Михайлович, д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики

Ивлиева(Перетокина) Ирина Валерьевна, инженер кафедры общей, теоретической
и компьютерной физики

Институт физики НАН Украины, Киев

Давыдова Надежда Александровна, д.ф.-м.н., ст.н.с., в. н.с

Измерены ИК спектры образца трифенилфосфита в кристаллических (стабильном и метастабильном), "глассиал", аморфном и жидком состояниях при 12 и 320 К. Методом B3LYP/6-31G(d) построены структурно-динамические модели трёх наиболее устойчивых его конформеров и димера, образованного водородной связью. Выполнен колебательный анализ измеренных ИК спектров. Выявлены обертоны и составные частоты. Дана полная интерпретация спектров. Установлено наличие в образце спектрально различных конформеров и комплексов со слабой водородной связью.

Введение

Трифенилфосфит ($P(OC_6H_5)_3$, сокращённо – ТФФ) обладает набором уникальных свойств, благодаря которым он продолжает вызывать интерес к себе. Опубликованы десятки работ [1-41], в которых представлены результаты исследований свойств и строения ТФФ в различных фазовых состояниях с помощью разнообразных физических методов. Исследовались образцы ТФФ в твёрдокристаллическом (ТК) [1-9], аморфном [10-

16], "глассиал" (состояние, промежуточное между аморфным и кристаллическим) [17-32], жидком [33-37] состояниях. Предметами исследования в цитируемых источниках были полиморфизм, фазовые переходы, процессы стеклования. Методом теории функционала плотности (ТФП) исследовалась структура ТФФ [38].

Колебательная спектроскопия, как выяснилось, использовалась крайне редко: в работах [25, 27, 28] она представлена спектроскопией КР. Это стало для

нас одним из стимулов к исследованиям структуры и свойств ТФФ методами колебательной ИК спектроскопии, начатым в [39-41] и завершаемым в настоящей работе. Результаты таких исследований и сформулированные на их основе выводы представляют интерес. Их сравнение с результатами и выводами, содержащимися в цитированных источниках, могут подтвердить достоверность последних и в чём-то их дополнить. Вместе с тем исследование ИК спектров ТФФ представляют самостоятельный интерес, поскольку позволяют установить в нём фундаментальную связь "структура-свойства".

Изменение конформации молекулы и водородная связь непосредственным образом влияют на ИК спектр образца ТФФ. Его структура в кристаллическом, аморфном, "глассиал" и жидком состояниях исследовалась в [9] методами рентгеноструктурного анализа (РСА) и нейтронографии. Обнаруженные различия структур в указанных фазовых состояниях, по мнению авторов, определяются конформационными изменениями молекул ТФФ и межмолекулярными взаимодействиями за счёт слабых водородных связей. В работе [38] исследована конформационная мобильность молекулы ТФФ, которая, по мнению авторов, чрезвычайно высока. Из 99 моделей конформеров молекулы ТФФ авторы выделили три, которые, по их мнению, соответствуют наиболее устойчивым конформерам и могут реализовываться в исследуемых образцах. Один из трех конформеров по своим геометрическим параметрам оказался близок к конформеру из [9], реализующемуся в гексагональной модификации, а другой – к конформеру, реализующемуся в моноклинной модификации. Различия между их энергиями не превышает 0,3 ккал/моль, а между дипольными моментами – 1 D. Авторы [38] констатируют наличие слабой водородной связи (С-Н...О), возникающей за счёт обобществления атома водорода между атомами углерода фенильного кольца одной молекулы и кислорода фрагмента $R(O-C)_3$ – другой. Благодаря этой связи молекулы в образце ТФФ могут объединяться в димеры и тримеры.

Особенности строения ТФФ, связанные с наличием устойчивых конформаций и водородных связей, на которые указано в [9] и [38], не могут не проявиться в его ИК спектрах. В работе [39] методами ИК спектроскопии исследовались структурные изменения ТФФ в ходе процессов "глассиализации" и кристаллизации. В ней впервые в исследованиях были использованы результаты решения механической и электрооптической задач для изолированных конформеров. В работе [40] на основе результатов молекулярного моделирования для трёх устойчивых конформеров, были интерпретированы спектры ТФФ, измеренные в пяти фазовых состояниях: в жидкости, стеклофазе, "глассиал" и ТК, стабильном и метастабильном. Предложенная интерпретация не стала полной из-за ограниченности модели изолированной молекулы. Выход за её рамки осуществлён в работе [41]: была

построена структурно-динамическая модель димера молекул ТФФ, образованного водородной связью, и установлено её влияние на структуру и ИК спектр. Однако и в этом случае интерпретация ИК спектров ТФФ не стала полной: осталось не выясненным происхождение полос ИКС в областях 1750-1900 и 2800-3000 cm^{-1} . В данной статье предложена полная интерпретация измеренных ИК спектров ТФФ на основе результатов построения его структурно-динамических моделей и детального колебательного анализа его спектров.

Эксперимент и моделирование

В проведённых исследованиях использован образец ТФФ, приобретённый у фирмы Aldrich, очищенный до 99%. ИК спектры образцов ТФФ в жидком, стеклофазе, "глассиал" и двух кристаллических (моноклинной, метастабильной и гексагональной, стабильной) состояниях измерены в области 600 – 4000 cm^{-1} на Фурье-спектрометре модели IFS-88 фирмы Bruker с разрешением 2 cm^{-1} . Образцы располагались между пластинками CsI, прозрачными в ИК области, и закреплялись в криостате типа OxfordND 1754, обеспечивающем изменение температуры с точностью измерений 0,1 К. ИК спектры образцов ТФФ в стеклофазе, "глассиал" и ТК измерены при температуре 12 К, в жидкости – при 320 К. Обработка экспериментальных данных была выполнена с использованием программного обеспечения OPUS.

Методом ТФП ВЗЛР/6-31G(d) [42-44], реализованным в программном пакете GAUSSIAN-03 [45], построены структурно-динамические модели конформеров I, II, III (сокращённо, KI, KII, KIII), различающихся ориентацией плоскостей фенильных колец относительно плоскостей атомов Р, О, С, и Н-комплекса ТФФ, представленного димером молекул KI (сокращённо, DIV), устойчивого в ТК модификации. На рисунке 1 приведено строение конформера молекулы ТФФ, и димера, образованного за счёт контакта атома водорода связи С-Н фенильного кольца одной молекулы и кислорода O_4 группы PO_3 – другой. Вычислены параметры адиабатических потенциалов конформеров и димера: минимумы энергий, оптимизированные геометрии, силовые постоянные и дипольные моменты, использованные при решении механической и электрооптической задач. Рассчитаны частоты и формы нормальных колебаний в гармоническом приближении и их интенсивности в ИК спектре. Расхождения между измеренными и рассчитанными частотами, обусловленные ограниченностью гармонического приближения, минимизированы масштабированием вычисленных частот, процедурой широко распространённой в мировой практике [46-48]. Используются масштабированные множители: 0,990 (диапазон 800-1000 cm^{-1}); 0,980 (диапазон 1000-1100 cm^{-1}); 0,970, (диапазон 1100-1650 cm^{-1}); 0,953 (диапазон выше 3000 cm^{-1}).

Результаты и обсуждение

Энергии конформеров составили – 1261,991493 (I), -1262,007903 (II), – 1262,005736 (III) Хартри.

Разница между ними не превышает 0,01641 Хартри. Наибольшей энергией обладает КІ, наименьшей – КІІ Энергия димера составила -2523,985059 Хартри. Вычисленные геометрические параметры КІ, КІІ, КІІІ и ДІV приведены в таблице 1. Их значения лежат в пределах, допустимых структурной химией. Для конформеров они совпадают с рассчитанными в работе [38]. Здесь же приведены данные РСА [9] по длинам связей молекул, находящихся в элементарных ячейках гексагональной и моноклинной модификаций ТФФ. Отличие вычисленных длин связей от экспериментальных не превышает 2,5% и обусловлено, отчасти, ограниченностью модели изолированной молекулы. Симметрия фрагмента $P(O-C)_3$ молекулы приближается к точечной группе C_3 для КІІ, C_s – для КІІІ и C_1 – для КІ, что согласуется с данными [38]. Энергия водородной связи в ДІV составляет 1,3 ккал/моль, что позволяет отнести её к слабому типу. Её влияние на геометрию молекул ТФФ, образующих димер, не велико (изменившиеся

параметры отмечены в таблице 1 жирным шрифтом) и сказывается лишь на окрестности водородного мостика $C-H \cdots O$, длина которого составляет 2,963 Å. Длина связи $C-H$ в нём равна 1,093 Å, что на 0,008 Å больше её длины в КІ. Длины связей P_1-O_4 и O_4-C_{16} уменьшились на 0,016 и на 0,006 Å соответственно. Дипольные моменты конформеров равны 1,14 (КІ), 2,03 (КІІ) 1,15 (КІІІ) D. Разница между ними не выходит за пределы 0,88 D. Дипольный момент ДІV равен 4,5 D, что на 3,36 D больше дипольного момента КІ.

На рисунке 2 для сравнения приведены измеренные ИК спектры ТФФ в стабильной и метастабильной фазах и рассчитанный КІ. Согласие спектров в целом можно считать удовлетворительным, учитывая, что расчёт был проведён для изолированной молекулы в рамках гармонического приближения. Имеет место характеричность фундаментальных колебаний фенильных колец по частоте, форме и смещениям, типичная для монозамещенных бензола.

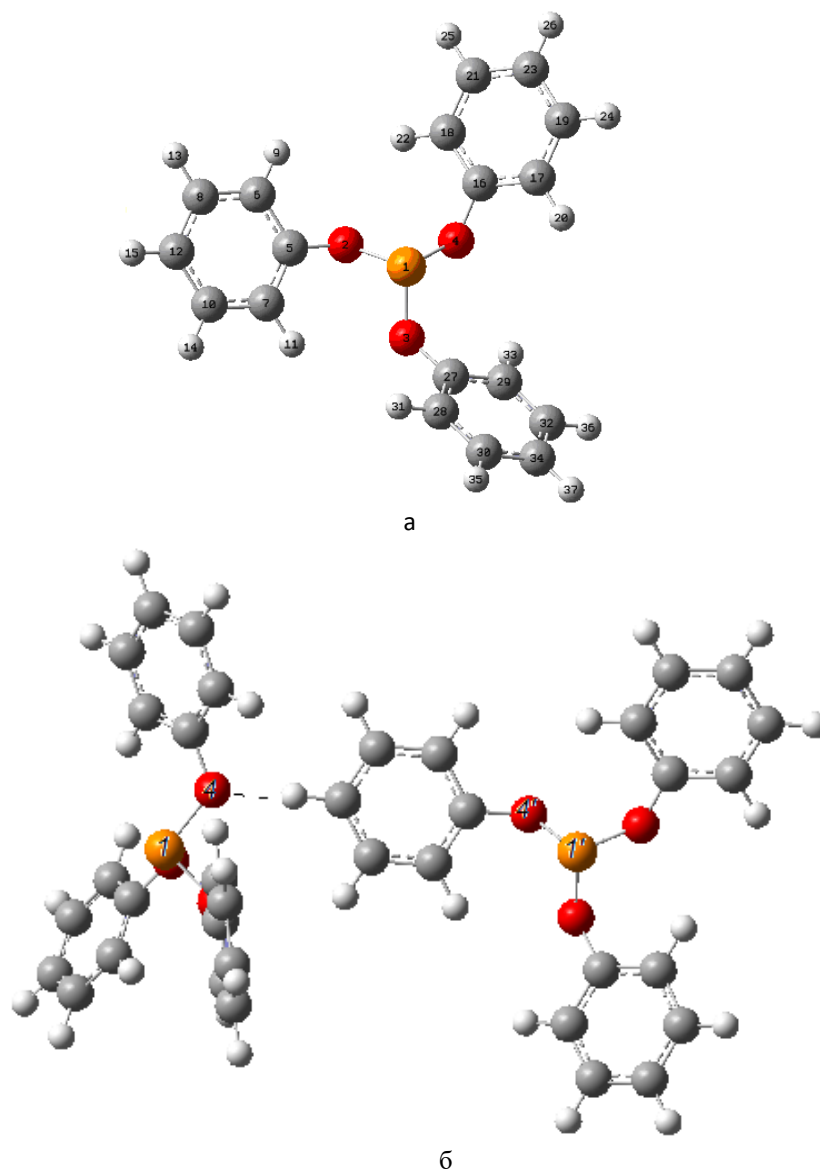


Рис.1. Строение молекулы (а) и димера (б) ТФФ

Таблица 1 Геометрические параметры ТФФ

Связь (Å), угол (град)	Эксперимент		Теория				
	гекс.[9]	мон.[9]	I [38]	I	II	III	IV
P ₁ -O ₂	1,621	1,603	1,629	1,629	1,651	1,654	1,629
P ₁ -O ₃	1,644	1,639	1,650	1,650	1,651	1,647	1,650
P ₁ -O ₄	1,636	1,632	1,673	1,673	1,651	1,654	1,657
O ₂ -C ₅	1,403	1,405	-	1,382	1,390	1,387	1,382
O ₄ -C ₁₆	1,395	1,388	-	1,391	1,390	1,406	1,385
O ₃ -C ₂₇	1,390	1,412	-	1,389	1,390	1,388	1,389
P ₁ -O ₂ -C ₅	-	-	132	132	122	122	132
P ₁ -O ₃ -C ₂₇	-	-	121	122	122	126	122
P ₁ -O ₄ -C ₁₆	-	-	122	121	122	122	121
P ₁ -O ₂ -C ₅ -C ₆	-	-	-	143	108	43	136
P ₁ -O ₃ -C ₂₇ -C ₂₈	-	-	-	105	117	156	141
P ₁ -O ₄ -C ₁₆ -C ₁₇	-	-	-	91	94	137	137

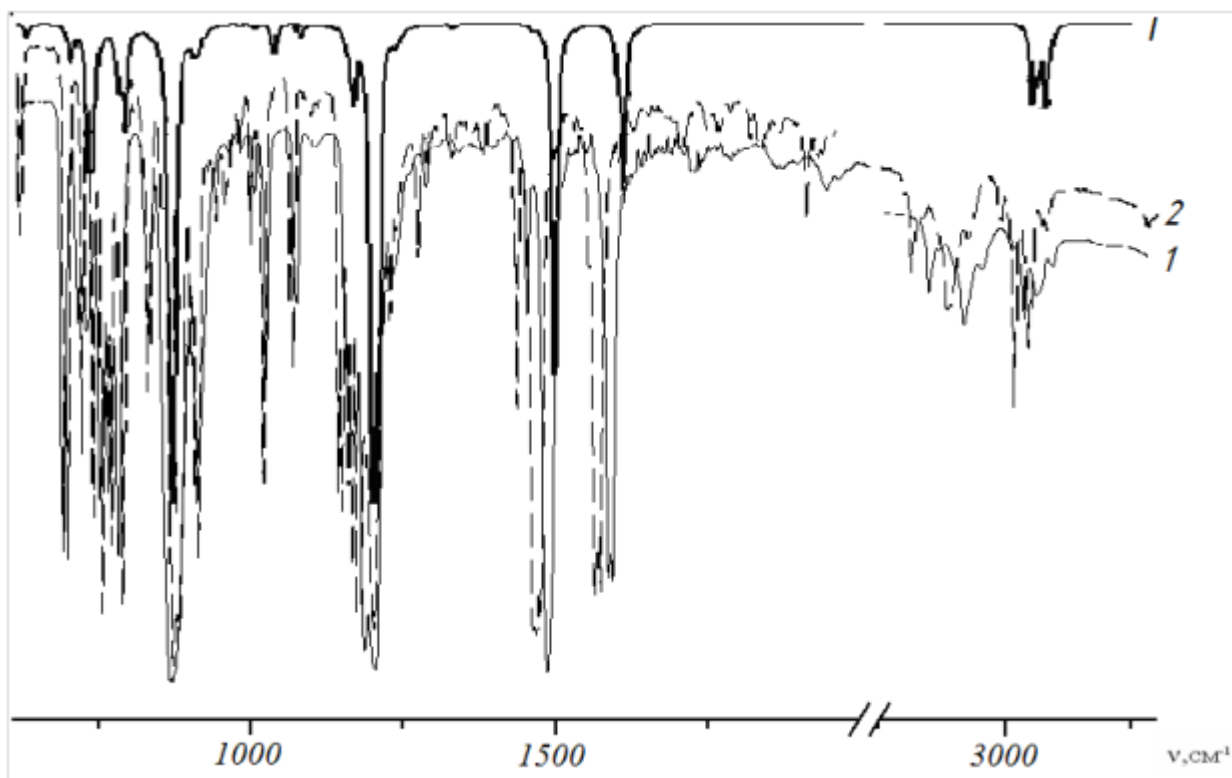


Рис.2. ИК спектры ТФФ: измеренный (1 – метастабильная фаза, 2 - стабильная фаза), и рассчитанный (I)

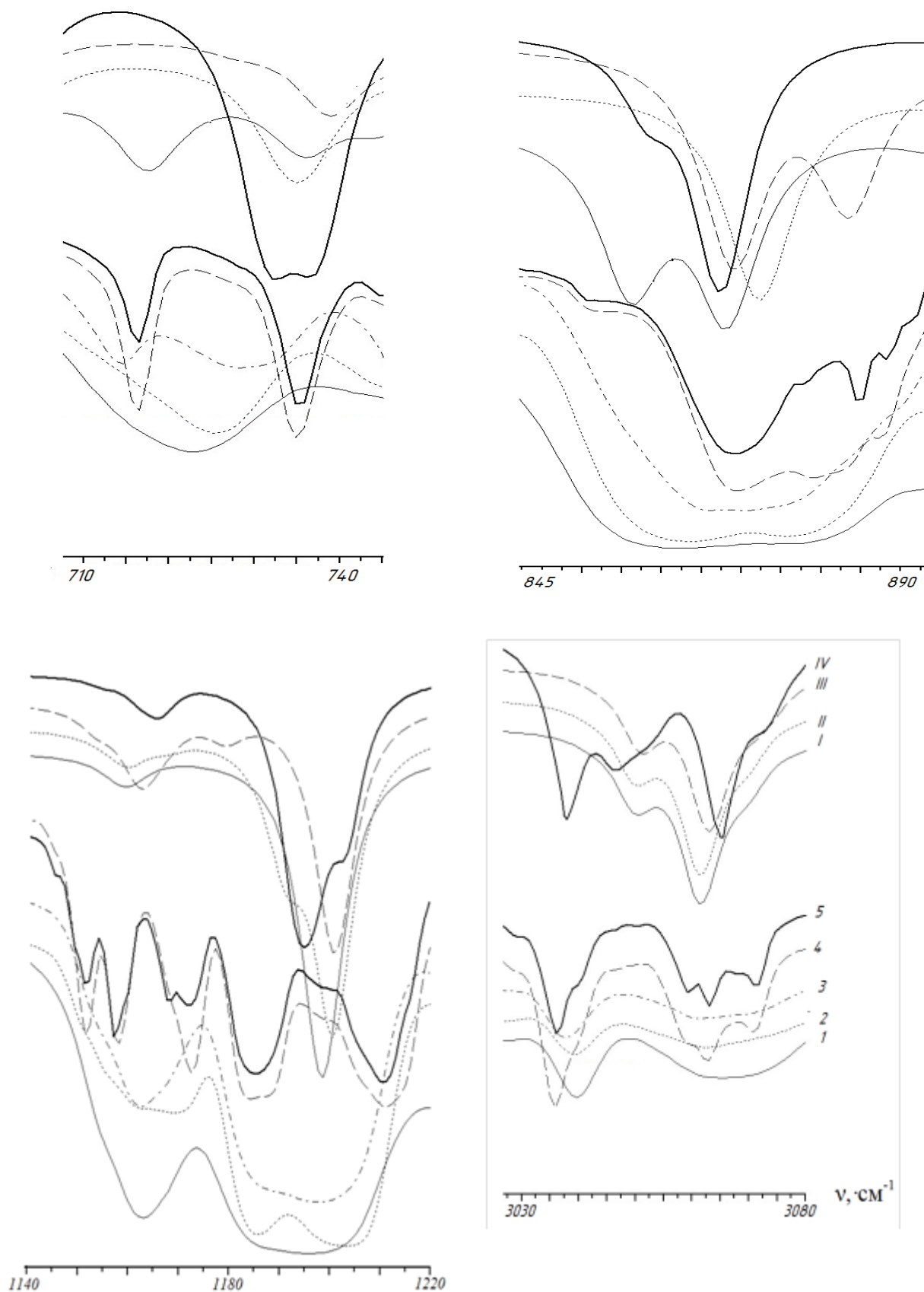


Рис.3. ИК спектры ТФФ: измеренные (1 – жидкость, 2 - стекло, 3 - «глассиал», 4, 5 – стабильная и метастабильная фазы); теоретические (I, II, III – конформеры, IV- димер)

								860	221,8	Q (CC)	
45	887(пл.) 888(пл.)	891	6,3	893	2,1	890	1,0	884	8,4	χ (OCCH), χ (HCCH), χ (CCCH), χ (CCCC)	
								885	4,0		
46	898(ср.) 900(ср.) 904(ср.)	897	32,7	902	70,8	893	8,2	892	12,0	χ (OCCH), χ (HCCH), χ (CCCH), χ (CCCC)	
								893	15,1		
47		904	67,0	904	78,3	899	70,1	896	9,1	χ (OCCH), χ (HCCH), χ (HCCC), χ (CCCC)	
								898	24,6		
48	909(с.) 914(с.) 915(пл.)	929	300,1	915	37,7	907	35,5	902	33,6	Q (PO), Q (CC), χ (HCCH)	
								912	11,3		
49	942(сл.)	942	0,6	944	2,4	942	0,1	941	0,01	χ (HCCH), χ (HCCC), χ (OCCH)	
								943	0,02		
50			944	0,7	945	1,5	944	0,05	942	0,04	χ (HCCH), χ (HCCC), χ (OCCH)
									944	0,03	
51		945	0,7	945	0,6	945	1,3	945	0,01	χ (HCCH), χ (CCCH), χ (OCCH)	
								945	0,08		
52	982(о.сл.)	966	0,9	969	1,4	967	0,4	966	0,8	χ (HCCH), χ (CCCH)	
								969	0,5		
53	1000(сл.) 1001(сл.) 1005(сл.)	969	0,8	969	0,9	968	0,5	966	0,3	χ (HCCH), χ (HCCC)	
								969	0,6		
54		970	0,4	969	1,7	969	2,1	971	0,8	χ (HCCH), χ (HCCC)	
								996	1,7		
55		999	1,0	1001	0,4	999	0,03	999	0,2	γ (CCC), Q (CC), β (HCC), γ (OCC)	
								999	0,03		
56		1000	0,01	1001	0,1	999	0,2	999	0,1	γ (CCC), Q (CC), β (HCC), γ (OCC)	
								999	0,1		
57		1001	0,1	1001	0,3	1000	0,1	1000	0,4	γ (CCC), Q _{RI} (CC), β _{RI} (HCC), γ (OCC)	
								1004	6,9		
58	1023(ср.)	1031	12,4	1032	16,9	1034	26,3	1034	14,5	Q (CC), β (HCC), γ (CCC)	
								1034	22,2		
59			1032	15,7	1032	21,0	1035	5,3	1034	17,4	Q (CC), β (HCC), γ (CCC)
									1034	10,4	
60		1035	21,8	1033	4,0	1036	19,4	1034	0,4	Q (CC), β (HCC), γ (CCC)	
								1036	4,1		
61	1068(ср.)	1082	3,4	1081	4,4	1087	4,2	1076	3,5	β (HCC), Q (CC)	
								1076	2,3		
62	1075(ср.)	1083	5,4	1083	2,6	1088	7,5	1076	4,5	β (HCC), Q (CC)	
								1077	6,0		

63	1076(ср.)	1088	6,0	1084	5,2	1091	6,8	1077	6,0	β (HCC), Q (CC)	
								1079	5,1		
64	1150(с.)	1154	7,2	1155	2,9	1153	41,2	1154	4,9	β (HCC), Q (CC)	
								1155	6,5		
65			1155	3,3	1155	1,6	1154	8,9	1154	3,2	β (HCC), Q (CC)
									1155	4,7	
66		1155	0,9	1155	0,2	1154	0,3	1155	3,3	β (HCC), Q (CC)	
								1162	56,0		
67	1158(с.)	1159	37,6	1158	39,0	1180	74,0	1166	52,8	β (HCC), Q (CO)	
	1173(с.)							1166	19,6		
68		1160	49,7	1160	41,4	1167	43,5	1166	41,6	β (HCC), Q (CO)	
								1167	14,2		
69		1168	27,4	1162	7,9	1169	8,4	1167	0,8	β (HCC), Q (CC)	
								1180	7,6		
70	1184(о.с.)	1191	307,4	1198	475,6	1162	200,5	1193	482,8	Q (CO), β (HCC), Q (CC), γ (CCC)	
								1195	391,8		
71	1188(о.с.)	1201	821,8	1200	476,7	1201	718,9	1197	401,5	Q (CO), β (HCC), γ (CCC)	
	1212(о.с.)							1204	512,0		
72	1225(ср.) 1240(ср.) 1242(пл.)	1243	80,6	1237	1,1	1233	21,6	1230	25,6	Q (CO), β (HCC), Q (PO), Q (CC)	
								1236	17,5		
73	1286(сл.) 1287(сл.)	1295	0,2	1295	0,2	1300	2,1	1297	0,1	β (HCC), Q (CC), γ (OCC), χ (OPOC)	
								1300	0,6		
74			1296	0,6	1296	0,2	1301	0,4	1299	0,7	β (HCC), Q (CC), γ (OCC), χ (OPOC)
								1300	0,7		
75		1301	3,9	1297	0,1	1304	1,7	1299	0,9	Q (CC), β (HCC), γ (OCC)	
								1301	0,6		
76	1302(о.сл.)	1320	0,4	1320	0,2	1325	2,3	1323	0,6	β (HCC), Q (CC)	
	1310(о.сл.)							1324	0,9		
77		1320	0,04	1321	0,7	1326	1,4	1324	1,9	β (HCC), Q (CC)	

								1324	2,0	
78	1318(о.сл.)	1326	4,5	1322	1,2	1328	1,5	1324	2,1	β (HCC), Q (CC)
								1329	1,4	
79	1451(ср.) 1454(пл.)	1454	2,1	1455	1,4	1457	0,1	1457	1,0	β (HCC), Q (CC)
								1457	1,6	
80	1455(ср.)	1456	1,9	1456	1,4	1458	2,3	1458	0,8	β (HCC), Q (CC)
									1458	
81		1458	1,0	1457	1,0	1459	2,4	1458	0,3	β (HCC), Q (CC)
								1471	0,8	
82	1483(о.с.)	1491	157,7	1492	182,0	1492	126,0	1492	154,3	β (HCC), Q (CC), Q (CO)
								1492	179,1	
83	1487(о.с.) 1494(о.с.)	1493	244,0	1492	184,3	1495	245,8	1493	243,2	β (HCC), Q (CC), Q (CO)
								1493	220,4	
84		1499	15,1	1498	4,1	1499	0,9	1498	9,7	β (HCC), Q (CC), Q (CO)
								1499	6,5	
85	1576(сл.) 1578(сл.) 1586(о.с)							1597	19,0	Q (CC), β (HCC), γ (CCC), γ (OCC)
		1597	14,6	1599	12,2	1598	27,2	1598	21,3	
86	1604(пл.)	1599	20,6	1599	5,3	1599	26,9	1598	14,1	Q (CC), β (HCC), γ (CCC), γ (OCC)
									1599	
87		1601	3,3	1600	4,6	1600	6,2	1600	1,3	Q (CC), β (HCC), γ (CCC), γ (OCC)
								1601	23,3	
88	1605 (о.с.)	1602	65,7	1604	89,8	1607	67,1	1605	45,2	Q (CC), β (HCC), Q (CC), β (HCC), γ (CCC)
									1605	
89		1604	118,2	1604	90,9	1607	105,1	1606	68,5	Q (CC), β (HCC), γ (CCC), Q (CO), γ (OCC)
								1607	116,3	
90		1609	16,9	1609	3,6	1611	1,8	1610	24,3	Q (CC), β (HCC), γ (CCC), Q (CO)
								1612	3,7	
	3036(ср.)	3037	1,1	3036	0,9	3037	1,0	3038	1,9	q (CH)
									3036	

91 - 105	3038(пл.)	3037	0,3	3036	1,0	3038	1,0	3036	1,2	q (CH)
								3036	1,1	
	3040(пл.)	3037	0,5	3037	0,4	3038	0,4	3039	1,9	q (CH)
								3047	9,4	
	3059(сл.)	3045	16,0	3044	9,4	3045	13,7	3040	69,9	q (CH)
								3046	11,2	
	3063(ср.)	3045	15,3	3044	16,3	3046	15,7	3043	8,2	q (CH)
								3046	10,2	
	3071(сл.)	3046	13,6	3044	15,5	3046	13,3	3043	20,1	q (CH)
								3047	9,5	
	3071(сл.)	3058	30,1	3057	38,0	3059	28,2	3031	158	q (CH)
								3059	43,6	
	3071(сл.)	3059	42,3	3057	38,3	3059	47,8	3057	44,2	q (CH)
								3059	33,2	
	3071(сл.)	3059	23,8	3058	27,1	3059	18,9	3058	27,3	q (CH)
								3059	32,3	
	3071(сл.)	3069	3,0	3064	8,7	3065	10,3	3059	4,1	q (CH)
								3066	10,4	
	3071(сл.)	3069	12,0	3065	8,9	3069	3,8	3066	9,9	q (CH)
								3066	10,9	
3071(сл.)	3069	3,7	3967	7,9	3069	12,5	3066	11,6	q (CH)	
							3967	8,7		
3071(сл.)	3076	1,6	3075	1,9	3072	0,7	3068	6,7	q (CH)	
							3071	0,9		
3071(сл.)	3077	1,5	3076	2,4	3073	1,1	3071	1,5	q (CH)	
							3073	2,5		
3071(сл.)	3080	0,4	3078	1,4	3098	0,1	3072	1,5	q (CH)	

В таблице 2 приведены результаты расчёта ИК спектров КI, КII, КIII и ДIV. В ней приведены измеренные частоты (в см^{-1}) и интенсивности (качественно оценённые) ИКС образца ТФФ в стабильной фазе при 12 К, рассчитанные частоты и интенсивности (I) ИКС (в км/моль) нормальных колебаний КI, КII, КIII и ДIV, дано их отнесение по формам колебаний КI. При этом использованы общепринятые обозначения координат: q , Q – валентные колебания связей, γ , β , – плоские и χ – неплоские деформационные колебания. Данные таблицы 2 и рисунок 3, иллюстрируют текст, содержат результаты, представляющие наибольший интерес, и позволяют сделать ряд выводов фундаментального характера. Остановимся кратко на некоторых из них. Установлено, что конформеры ТФФ спектрально различимы и водородная связь влияет на их ИК спектры. ИК спектр КI близок к спектрам кристаллических полиморфных модификаций. Его строение близко к строению конформера в работе [9]. Таким образом, наличие КI в исследуемом образце ТФФ можно считать установленным.

Полосы ИКС в областях 700–750, 860–880, 1140–1220 см^{-1} , соответствующие колебаниям группы $\text{P}(\text{OC})_3$, являются спектрально-структурными признаками ТФФ. Структура этих полос сложная. Их анализ представляет наибольший интерес с точки зрения влияния конформационных изменений и водородной связи на ИК спектр ТФФ. Полосы средней интенсивности с максимумами 717 и 735 см^{-1} и очень интенсивные, с максимумами 869 и 879 см^{-1} , в спектрах ТК фаз (рис. 3, кривые 4, 5), соответствуют нормальным колебаниям ν_{34} , ν_{35} и ν_{43} , ν_{44} . Значительный вклад в них вносят колебания $\text{Q}(\text{P}-\text{O})$ и $\text{Q}(\text{C}-\text{O})$. Полосы в области 1180–1220 см^{-1} соответствуют нормальным колебаниям ν_{70} , ν_{71} и ν_{72} и отнесены к колебаниям $\text{Q}(\text{C}-\text{O})$, к которым примешены валентные и плоские деформационные колебания бензольных колец. При переходе от ТК фаз к состоянию "глассиал", стеклофазе и жидкости ИК спектр в указанных областях трансформируется: полосы уширяются, перекрываются, их максимумы сдвигаются, интенсивности перераспределяются (рис.3, кривые 5, 4, 3, 2, 1), что связано, в частности, и с конформационными изменениями (рис.3, кривые I, II, III, табл. 2). Из анализа таблицы 2 следует, что вклады в интенсивность полос измеренного ИКС колебаний конформеров неравнозначны. Отметим, в частности, значительное уменьшение частоты интенсивного колебания ν_{70} ($\sim 30 \text{ см}^{-1}$) при переходе от КI к КIII. В результате $\nu_{70} = 1162 \text{ см}^{-1}$ КIII и $\nu_{67} = 1159 \text{ см}^{-1}$ КI оказались близки по частоте, но не по интенсивности (см. табл. 2). В измеренном спектре этим колебаниям соответствует интенсивная полоса с максимумом 1158 см^{-1} . Интенсивность этой полосы определяется, как следует из расчёта, колебанием ν_{70} КIII.

Влияние водородной связи на колебания

фрагмента $\text{P}(\text{OC})_3$ молекулы ТФФ в указанных областях ИК спектра, как следует из расчёта, не велико для частот и в большей степени заметно для интенсивностей (табл.2, рис. 3, кривая IV). Кривые распределения интенсивности по нормальным координатам ДIV и конформеров КI, КII, КIII в ИК спектрах (рис. 4) отличаются по виду и по положению их центров тяжести. Вполне вероятно, что измеренные ИК спектры жидкости, стекла, "глассиал" и ТК фаз являются суперпозицией спектров КI, КII, КIII и ДIV.

Наибольший интерес с точки зрения влияния Н-связи на ИК спектр ТФФ представляет область 3000–3100 см^{-1} (табл.2, рис.3). Установлено, что образование димера сопровождается небольшим сдвигом частоты валентного колебания ν_{97} КI на $\sim 27 \text{ см}^{-1}$ в низкочастотную сторону и к возрастанию его интенсивности более, чем в пять раз. И по частоте, и по интенсивности это колебание в большей степени соответствует полосе измеренного ИКС с пиком 3036 см^{-1} , в окрестность которого попадает колебание ν_{94} , возросшее по интенсивности более, чем в четыре раза. Сдвиг частоты, пусть и в небольшой, и сильное увеличение интенсивности согласуется с выводом о наличии слабой водородной связи в образце, сделанным на основе результатов квантово-механического расчёта параметров адиабатических потенциалов КI и ДIV. Частоты и интенсивности других валентных колебаний связей С–Н изменяются в меньшей степени. Как видно из рисунка 3, рассчитанная кривая распределения интенсивности IV в области 3000–3100 см^{-1} ИК спектра отличается от кривой I и в большей степени соответствует распределению интенсивности в измеренных спектрах ТК модификаций. Полученный результат указывает на наличие в образцах ТФФ комплексов со слабой Н-связью и согласуется с положениями, сформулированными в работах [9, 38].

В состояниях "глассиал", стеклофазы и жидкости и при различных температурах вполне вероятна реализация в образце ТФФ трёх конформеров и их Н-комплексов, динамика которых формирует ИК спектры образца.

Полосы слабой и средней интенсивности измеренного ИК спектра в областях 1730–1900 и 2830–3000 см^{-1} (рис.4) не относятся к фундаментальным колебаниям. Их происхождение может быть понято, если выйти за рамки гармонического приближения. Ангармонизм является механизмом, вызывающим взаимодействие колебаний, благодаря которому в спектре возникают полосы, соответствующие обертонам, колебаниям с составными частотами и резонансам. С позиций этой модели можно, проведя колебательный анализ в указанных областях измеренного ИКС, предложить следующую интерпретацию проявляющихся в них полос (см. табл. 3 и рис.4):

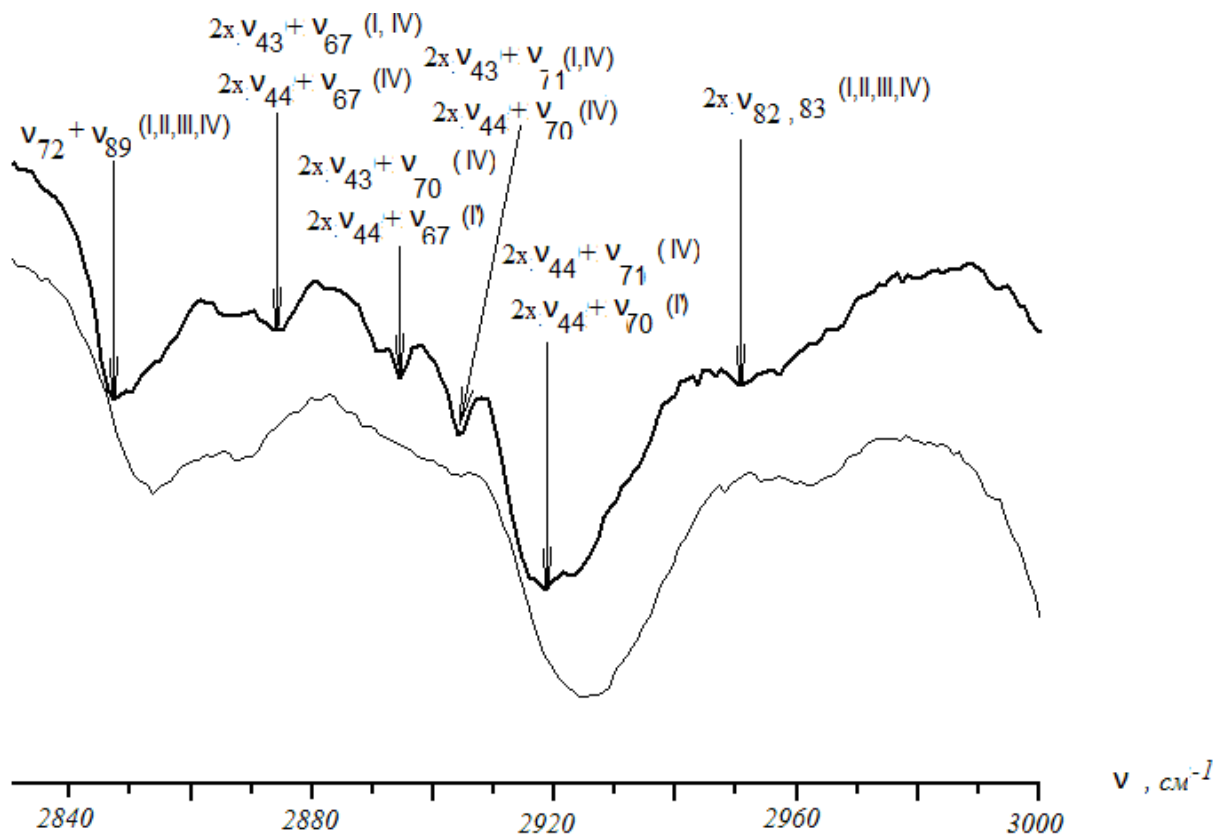
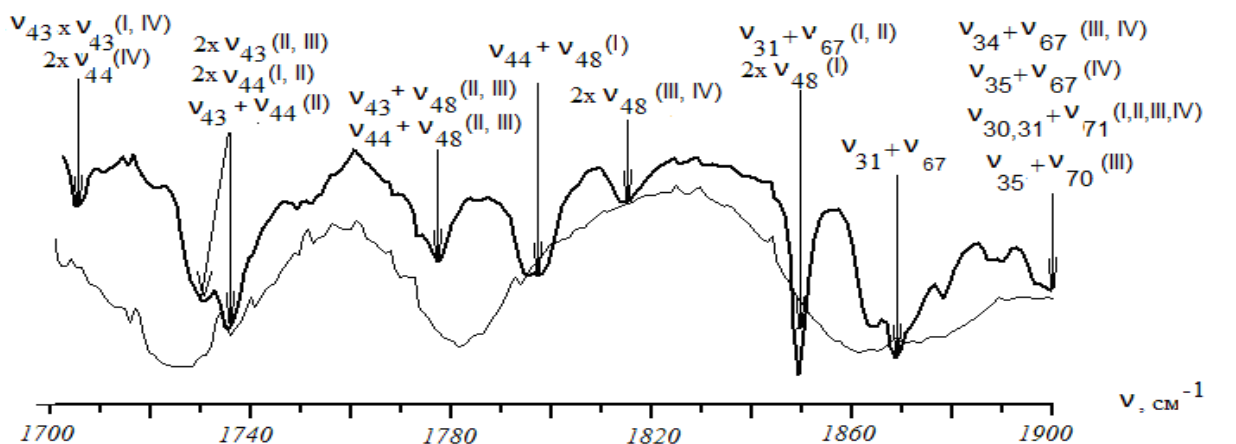


Рис. 4. ИК спектры ТФФ в областях 1700-1900 и 2800-3000 cm^{-1} :
снизу - стабильная, сверху - метастабильная фазы

Таблица 3. Составные частоты и обертоны ИКС ТФФ

ν (I), эксп.	Интерпретация
1705 (о.сл.)	$2 \cdot \nu_{43}$, (I, IV); $2 \cdot \nu_{44}$, (IV)
1735 (сл.)	$2 \cdot \nu_{43}$, (II, III); $2 \cdot \nu_{44}$, (I, II); $\nu_{43} + \nu_{44}$, (II)
1780 (сл.)	$\nu_{43} + \nu_{48}$, (II, III); $\nu_{44} + \nu_{48}$, (II, III)
1796 (сл.)	$\nu_{44} + \nu_{48}$, (I)
1812 (сл.)	$2 \cdot \nu_{48}$, (III, IV)
1850 (сл.)	$2 \cdot \nu_{48}$, (I); $\nu_{31} + \nu_{67}$, (I, II)
1870 (сл.)	$\nu_{34} + \nu_{67}$, (I)
1900 (сл.)	$\nu_{34} + \nu_{67}$, (III, IV); $\nu_{35} + \nu_{67}$, (IV); $\nu_{30,31} + \nu_{71}$, (I, II, III, IV); $\nu_{35} + \nu_{70}$, (III);
2845 (сп.)	$\nu_{72} + \nu_{89}$, (I, II, III, IV);
2874 (о.сл.)	$2 \cdot \nu_{43} + \nu_{67}$, (I, IV); $2 \cdot \nu_{44} + \nu_{67}$, (IV)
2892 (о.сл.)	$2 \cdot \nu_{43} + \nu_{70}$, (IV); $2 \cdot \nu_{44} + \nu_{67}$, (I)
2902 (о.сл.)	$2 \cdot \nu_{43} + \nu_{71}$, (I, IV); $2 \cdot \nu_{44} + \nu_{70}$, (IV);
2920 (сп.)	$2 \cdot \nu_{44} + \nu_{70}$, (I); $2 \cdot \nu_{44} + \nu_{71}$, (IV)
2968 (о.сл.)	$2 \cdot \nu_{82, 83}$, (I, II, III, IV);

Заключение

Остановимся кратко на выводах, следующих из анализа результатов проведённых исследований ИК спектров ТФФ.

Группа атомов PO_3 оказывает небольшое локальное влияние на силовые поля фенильных колец ТФФ. Их фундаментальные колебания характерны по частоте, форме и смещениям, что типично для монозамещённых бензола.

Конформеры I, II, III спектрально различимы. Конформационная подвижность влияет на формирование полос ИКС образца в областях 700–750, 860–880, 1180–1220 см^{-1} , соответствующих колебаниям группы атомов $\text{P}(\text{OC})_3$, являющихся спектрально-структурными признаками ТФФ. В гексагональной и моноклинной ТК модификациях с большей вероятностью реализуется КI, с локальной симметрией фрагмента $\text{P}(\text{OC})_3 - \text{C}_1$.

Установлено наличие в образцах ТФФ комплексов со слабой водородной связью (энергия ~ 1 ккал/моль), что согласуется положениями работ [9, 38]. Образование водородной связи оказывает небольшое влияние на спектрально-структурные признаки ТФФ. Длины связей $\text{P}-\text{O}_4$ и O_4-C уменьшились на 0,016 и 0,006 Å соответственно. Полосы в областях 700–750, 860–880, 1180–1220 см^{-1} трансформируются. Соответствующие им колебания группы атомов $\text{P}(\text{OC})_3$ изменяются по

частоте в пределах 18 см^{-1} и по интенсивностям. Н-связь играет определяющую роль в формировании ИК спектра ТФФ в области 3000–3100 см^{-1} . При комплексообразовании длина связи $\text{C}-\text{H}$ увеличилась на 0,008 Å. В спектре имеет место небольшое уменьшение частоты ν_{97} колебания $q(\text{C}-\text{H})$ КI (на ~ 27 см^{-1}) и увеличение его интенсивности \sim в пять раз. Частоты и интенсивности других колебаний $q(\text{C}-\text{H})$ КI также изменяются, но в меньшей степени. На колебания фенильных колец, проявляющиеся в области 600–1650 см^{-1} ИК спектров ТФФ, водородная связь практически не влияет.

Наличие полос в областях 1730–1900 и 2830–3000 см^{-1} измеренного ИК спектра есть следствие механического ангармонизма колебаний. Их пики соответствуют обертонам и составным колебаниям конформеров I, II, III и димера IV.

Вывод обобщающего характера заключается в том, что образцы ТФФ в жидком, аморфном, "глассиал" состояниях и в ТК модификациях (моноклинной и гексагональной) являются смесью трёх спектрально различных устойчивых конформеров и их комплексов со слабой водородной связью (димеров и, возможно, тримеров), наличие которых формирует ИК спектры.

Библиографический список

1. [Wiedersich J., Kudlic K., Gottwald J., Benini G., Roggatz L., Rosser E.](#) On polyamorphism of triphenyl phosphite // *J. Phys. Chem. B.* – 1997. - V. 101, №30. - P. 5800–5803.
2. [Senker J., Sehnert J., Correll S.](#) Microscopic description of the polyamorphic phases of triphenyl phosphite by means of multidimensional solid-state NMR spectroscopy // *J. Am. Chem. Soc.* - 2005. - V. 127, №1. – P. 337–349.
3. Hedoux A., Guinet Y., Descamps M., Hernandez O., Derollez P., Dianoux A.J., Foulon M., Lefebvre J. A description of the frustration responsible for a polyamorphism situation in triphenyl phosphate // *J. Non-Cryst. Solids.* - 2002. -V.307. - P. 637-643.
4. Hedoux A., Denicourt T., Guinet Y., Carpentier L., Descamps M. Conversion of the glacial state into the crystal in triphenyl phosphate // *Solid State Communications.* – 2002. - V. 122, №7-8. - P. 373-378.
5. [Hernandez O., Hédoux A., Lefebvre J., Guinet Y., Descamps M., Papoular R., Masson O.](#) Ab initio structure determination of triphenyl phosphite by powder synchrotron X-ray diffraction // *J. Appl. Cryst.* - 2002. - V. 35. - P. 212-219.

6. [Kivelson D., Tarjus G.](#) Apparent polyamorphism and frustration // *J. Non-Cryst. Solids.* - 2002. - V. 307-310. - P.630-636.
7. Senker J., Rossler E. Determination of the local disorder in the polyamorphic phases of triphenyl phosphate // *J. Phys. Chem. B.* - 2002. - V. 106, №31. - P.7592–7595.
8. Golovanov D. G., Lyssenko K. A., Antipin M. Yu., Vygodskii Y. S., Lozinskaya E. I., Shaplov A. S. Long-awaited polymorphic modification of triphenyl phosphite // *CrystEngComm.* - 2005. - V. 7. - P. 465- 468.
9. Mei Q., Ghalsasi P., Benmore C. J., Yarger J.L. The local structure of triphenyl phosphate studied using spallation neutron and high-energy X-ray diffraction // *J. Phys. Chem. B.* - 2004. - V. 108. - P. 20076-20082.
10. Johari G.R., Ferrari C. Calorimetric and dielectric investigations of the phase transformations and glass transition of triphenyl phosphite // *J. Phys. Chem. B.* -1997. - V.101, №49.- P. 10191-10197.
11. [Dvinskich S., Benini G., Senker J., Vogel M., Wiedersich J., Kudlic K., Rosser E.](#) J. Molecular motion in the two amorphous phases of triphenyl phosphite // *Phys. Chem. B.* - 1999. - V. 103, № 10. - P. 1727–1737.
12. Alba-Simionesco Ch., Tarjus G. Experimental evidence of mesoscopic order in the apparently amorphous glacial phase of the fragile glass former triphenylphosphite // *Europhysics Letters.* - 2000. - V. 52, №3. - P. 297-303.
13. Tarjus G., Alba-Simionesco A., Grousson M., Viot P. and Kivelson D. Locally preferred structure and frustration in glass-forming liquids: a clue to polyamorphism? // *J. Phys. Cond. Matter.* - 2003. - V.15, №11. - P.S1077–S1084.
14. Mizukami M., Kobashi K., Hanaya M., Oguni M. J. Presence of two freezing-in processes concerning α -glass transition in the new liquid phase of triphenyl phosphite and its consistency with “cluster structure” and “intracluster rearrangement for α process” models // *Phys. Chem. B.* - 1999. - V.103, №20. - P. 4078-4088.
15. Baran J., Davydova N.A., Drozd, M. Polymorphism of Triphenyl phosphite. // *J. Chem. Phys.* -2014. - V. 140 . 104512 (6).
16. Johari G.R., Ferrari C. Calorimetric and dielectric investigations of the phase transformations and glass transition of triphenyl phosphite // *J. Phys. Chem. B.* - 1997. - V.101, №49. - P. 10191-10197.
17. Hedoux A., Guinet Y., Derollez P., Hernandez O., Paccou L., Descamps M. Micro-structural investigations in the glacial state of triphenyl phosphite // *J. Non-Cryst. Solids.* - 2006. - V.352. № 42-59. - P. 4994-5000.
18. Hedoux A., Denicourt T., Guinet Y., Carpentier L., Descamps M. Conversion of the glacial state into the crystal in triphenyl phosphate // *Solid State Communications.* – 2002. - V. 122, №7-8. - P. 373-378.
19. Ha A., Cohen I., Zhao X., Lee M., Kivelson D. Supercooled liquids and polyamorphism. // *J. Phys. Chem.* – 1996. - V.100. – P.1-4.
20. Alba-Simionesco Ch. and Tarjus G. Experimental evidence of mesoscopic order in the apparently amorphous glacial phase of the fragile glass former triphenyl phosphite. // *Europhys. Lett.* -2000. - V.52. - P.297-303.
21. Tarjus G., Alba-Simionesco Ch., Grousson M., Viot P. and Kivelson D. Locally preferred structure and frustration in glass-forming liquids: a clue to polyamorphism? // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2003. - V. 15.- P.S1077 – S1084.
22. Kivelson D. and Tarjus. G. Apparent polyamorphism and frustration. // *J. Non-Cryst. Solids.* -2002. - V.307–310. - P.630-636.
23. Kivelson S.A., Zhao X., Kivelson D., Fischer T.M. and Knobler C.M. Frustration- limited clusters in liquids. // *J. Chem. Phys.* -1994. - V. 101. – P. 2391-2397.
24. Demirjian B., Dosseh G., Chauty A., Ferrer M.-L., Morineau D., Lawrence C., Takeda K., Kivelson D. and Brow S. Metastable solid phase at the crystalline-amorphous border: the glacial phase of triphenyl phosphite. // *J. Phys. Chem. B.* -2001. - V. 105. – P.2107-2116.
25. Hedoux A., Guinet Y. and Descamps M.. Raman signature of polyamorphism in triphenyl phosphite. // *Phys. Rev. B.* -1998. - V. 58 . – P.31-34
26. Hedoux A., O. Hernandez O., Lefebvre J., Guinet Y. and Descamps M. Mesoscopic description of the glacial state in triphenyl phosphate from x-ray diffraction experiment. // *Phys. Rev. B.* -1999. - V. 60. – P. 609390-9395.
27. Hedoux A., Guinet Y., Descamps M., and Benabou A. Raman scattering investigation of the glaciation process in triphenyl phosphite. // *J. Phys.Chem.* -2000. - V. 104. – P.11774 -11780.
28. Hedoux A., Guinet Y., and Descamps M. Size dependence of the raman spectra in an amorphous-nanocrystalline mixed phase: the glacial state of triphenyl phosphite. // *J. Raman Spectrosc.* -2001. - V. 32. – P.677-688.
29. Hernandez O., Hedoux A., Lefebvre J., Guinet Y., Descamps M., Papoular R. and Masson O. *Ab initio* structure determination of triphenyl phosphite by powder synchrotron X-ray diffraction. // *J. Appl. Cryst.* -2002. - V. 35 . – P.212-219.
30. Hedoux, A. Guinet Y., Foulon M. and Descamps M.. Evidence for transient kinetics of nucleation as responsible for the isothermal transformation of supercooled liquid into the glacial state of triphenyl phosphite. // *J. Chem. Phys.* -2002. - V. 116. – P. 9374 - 9382.
31. Hedoux A., Guinet Y., Derollez P., Hernandez O., Lefort R. and Descamp M.. A contribution to the understanding of the polymorphism situation in triphenyl phosphite. // *Phys. Chem. Chem. Phys.* -2004. - V.6. – P. 6 3192 -3199.
32. Derollez P., Hedoux A., Guinet Y., Lefebvre J., Descamps M., Hernandez O. Micro(nano)structure of the glacial state in triphenyl phosphite (TPP). // *Z. Kristallogr. Suppl.* -2006. - V. 23 . – P. 557-562.
33. Senker J., Rossler E. Triphenyl phosphite: a candidate for liquid polyamorphism // *Chem. Geol.*-2001.-V. 174, №1-3.-P. 143-156.
34. Kurita R. and Tanaka. H. Kinetics of the liquid-liquid transition of triphenyl phosphite. // *Phys. Rev. B.* -2006. - V. 3. – P. 104202 (5).

35. Tanaka H, Kurita R., and Matak. H. Liquid-liquid transition in the molecular triphenyl phosphite. //Phys. Rev. Lett. -2004. -V. 92. – P. 25701 (4).
36. Kurita R., Shinohara Y., Amemiya Y. and Tanaka H. Microscopic structural evolution during the liquid-liquid transition in triphenyl phosphite. J. Phys.: Condens. Matter. -2007. - V. 19. – P. 152101 (8).
37. J. Mosses, C.D. Syme and K.W. Wynne. Order parameter of the liquid-liquid transition in a molecular liquid. //J. Phys. Chem. Lett. -2015. -V. 6. – P. 38-43.
38. Hernandez O., Boucekkine A., and Hedoux A. . Density functional theory study of triphenyl phosphite: molecular flexibility and weak intermolecular hydrogen bonding. //J. Phys. Chem. A. -2007. - V. 111. – P. 6952-6958.
39. Babkov L.M., Baran J., Davydova N.A., Ivlieva I.V., Ponezha E.A., Reznichenko V.Ya. Infrared spectra of triphenyl phosphite and their interpretation on the basis of quantum chemistry calculation // Ukr. J. Phys. - 2016. -V.61, №6.- P. 471-476.
40. Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова, И.В. Ивлиева. ИК спектры трифенилфосфита и их интерпретация на основе молекулярного моделирования // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика.– 2017. - Т.17, вып.1. – С.11-19.
41. Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова, И.В. Ивлиева. Влияние водородной связи на структуру и ИК спектр трифенилфосфита. // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. – 2019. - Т.19, вып.2. –С.132-139.
42. P.J. Stephens, F.J. Devlin, C.F Chabalowski, M.J. Frisch.. Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. //J. Phys. Chem. -1994. -V.98, №45. – P.11623-11627.
43. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter – wave functions and density functionals // Reviews of Modern Physics. - 1999. - Vol. 71, №5. - P. 1253-1266. (Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физ.наук. -2002. - Т.172, №3. - С. 336–348.)
44. Pople J. Nobel Lecture: Quantum chemical models // Reviews of Modern Physics. . - 1999. - Vol. 71, №5. - P. 1267-1274. (Попл Дж.А. Квантово-химические модели // Успехи физ.наук-2002. - Т.172, №3. - С. 349–356.)
45. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Scuseria G.E., Robb M.A., Cheeseman J.R., Montgomery J.A., Vreven Jr.T., Kudin K.N., Burant J.C., Millam J.M., Iyengar S.S., Tomasi J., Barone V., Mennucci B., Cossi M., Scalmani G., Rega N., Petersson G.A., Nakatsuji H., Hada M., Ehara M., Toyota K., Fukuda R., Hasegawa J., Ishida M., Nakajima T., Honda Y., Kitao O., Nakai H., Klene M., Li X., Knox J.E., Hratchian H.P., Cross J.B., Adamo C., Jaramillo J., Gomperts R., Stratmann R.E., Yazyev O., Austin A.J., Cammi R., Pomelli C., Ochterski J.W., Ayala P.Y., Morokuma K., Voth G.A., Salvador P., Dannenberg J.J., Zakrzewski V.G., Dapprich S., Daniels A.D., Strain M.C., Farkas O., Malick D.K., Rabuck A.D., Raghavachari K., Foresman J.B., Ortiz J.V., Cui Q., Baboul A.G., Clifford S., Cioslowski J., Stefanov B.B., Liu G., Liashenko A., Piskorz P., Komaromi I., Martin R.L., Fox D.J., Keith T., Al-Laham M.A., Peng C.Y., Nanayakkara A., Challacombe M., Gill P.M.W., Johnson B., Chen W., Wong W., Gonzalez C. and Pople J.A. Gaussian03, Revision B.03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA. 2003. 302 p.
46. Yoshida H., Ehara A., Matsuura H. Density functional vibrational analysis using wavenumber-linear scale factors // Chem. Phys. Lett. - 2000. - V. 325. №4.-P. 477-483.
47. Yoshida H., Takeda K., Okamura J., Ehara A., Matsuura H. A new approach to vibrational analysis of large molecules by density functional theory: wavenumber-linear scaling method. // J. Phys.Chem. A. - 2002. - V. 106, № 14 -P. 3580-3586.
48. Березин К.В., Нечаев В.В., Кривохижина Т.В. Применение метода линейного масштабирования частот в расчётах нормальных колебаний многоатомных молекул // Оптика и спектроскопия. - 2003. - Т. 94, № 3. - С. 398-401.

STRUCTURAL DYNAMIC MODELS AND INTERPRETATION OF THE IR SPECTRA OF TRIPHENYLPHOSPHITE

L.M. Babkov¹, N.A. Davydova², I.V. Ivlieva(Peretokina)¹

¹Saratov State University

²Institute of Physics NAS of Ukraine, Kyiv

The IR spectra of sample of triphenylphosphite were measured in crystalline (stable and metastable), " glassial", amorphous and liquid states at 12 and 320 K. The structural-dynamic models of three most stable its conformers and a dimer, formed by a hydrogen bond – by the B3LYP / 6-31G (d) method were constructed. The vibrational analysis of the measured spectra were performed. The overtones and composite frequencies are distinguished. A full interpretation of the spectra were given. The presence of spectrally distinguishable conformers, and complexes with a weak hydrogen bond in the sample was established.

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
АРОМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПИРИДИНА И ПИРРОЛА С МОЛЕКУЛАМИ ВОДЫ
НА РАСТВОРИМОСТЬСаратовский национальный исследовательский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского*Тен Галина Николаевна*, д.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики

Проведено исследование влияния ароматической системы гетероциклических азотсодержащих соединений пиридина и пиррола на растворимость. Вычислены комплексы пиридина и пиррола, обладающих разной растворимостью, с молекулами воды и определены параметры водородных мостиков.

Введение. Как известно, растворимость – это способность вещества образовывать с другим веществом (или веществами) гомогенную смесь с дисперсным распределением компонентов. Степень распределения вещества в водном растворе зависит от его гидрофильности или гидрофобности.

Поскольку гидрофильность и гидрофобность являются результатом межмолекулярного взаимодействия вещества с молекулами воды, то, несомненно, одними из самых широко используемых методов их исследования являются спектральные методы. Сильное межмолекулярное взаимодействие вещества с водой как проявление гидрофильности приводит к значительному смещению частот валентных колебаний, участвующих в образовании водородных связей (ВС), и усилению интенсивности соответствующих полос поглощения (см., например, [1-3]). В то же время исследование гидрофобности экспериментальными методами колебательной спектроскопии вызывает трудности, так как они недостаточно информативны из-за их плохой растворимости вещества в воде. В этом случае целесообразно обратиться к квантово-химическим расчётам, которые позволяют теоретически рассмотреть свойства молекул, экспериментальное исследование которых затруднено. Один из наиболее эффективных способов исследования гидрофобности с помощью теоретических расчётов – оценка геометрических параметров водородного мостика (ВМ) [4-6].

Цель данной работы – выяснить роль ароматической системы в проявлении гидрофобных и гидрофильных свойств гетероциклических азотсодержащих систем пиридина и пиррола по параметрам ВМ. Пиридин и пиррол, как известно, имеют разную растворимость в воде, но близкие значения дипольных моментов (для пиридина $\mu=2.18$, для пиррола – 1.90 D).

Расчёты структуры комплексов пиридина и пиррола с молекулами воды были выполнены методом DFT в базисе 6-31g(d,p) по программе Gaussian-09 [7].

Результаты и обсуждение. На рис.1 приведены молекулярные диаграммы комплексов пиридина с 1, 3, 5 и 7 молекулами воды. Согласно выполненному

расчёту, если для комплекса пиридина с одной молекулой воды (рис. 1а) длина связи N...H равна 1.94 Å, а угол 179.2 град, то, судя по изменению этих геометрических параметров для комплекса пиридина с 3-мя и 5-ю молекулами воды, ВС становится сильнее. Длина ВС уменьшается от 1.70 до 1.61 Å, а угол, напротив, увеличивается от 177.9 до 178.4 град (рис. 1б, 1в), что согласуется с общеизвестным фактом высокой растворимости пиридина с водой.

Для учёта взаимодействия воды с ароматической системой к комплексу пиридина с 5-ю молекулами воды были добавлены ещё две молекулы воды, расположенные над и под ароматическим кольцом пиридина (рис. 1г), которые после оптимизации геометрии сместились от ароматической системы в сторону атома азота (рис. 1д). Это привело к некоторому уменьшению ВС: длина связи N...H стала равной 1.84 Å, а угол – 171.9 град. Аналогичные результаты были получены при повторном дополнительном расположении двух молекул воды над и под пиримидиновым кольцом. Надо отметить, что и в этом случае уменьшение параметров ВМ было небольшим в основном связано с уменьшением угла N...HO, но не более, чем на 10 град.

Таким образом, хотя взаимодействие с ароматической системой и приводит к некоторому уменьшению ВС пиридина по сравнению с одной молекулой воды, динамика смещения молекул воды, окружающих ароматическое кольцо пиридина, способствует «затаскиванию» пиридина в водный раствор, определяя тем самым его высокую растворимость.

Совершенно иная картина наблюдается для пиррола. Как и во всех предыдущих случаях, сначала был рассчитан комплекс пиррола с одной молекулой воды. Согласно полученным результатам, длина и угол связи NH...O составили 1.98 Å и 179.9 град, соответственно (рис. 1а). При образовании ВС пиррола с двумя молекулами воды параметры радиальной и угловой составляющих ВМ стали равными 2.07 Å и 149.7 град, т.е. между молекулами воды наблюдается «конкуренция» за образование ВС с пирролом (рис. 1б).

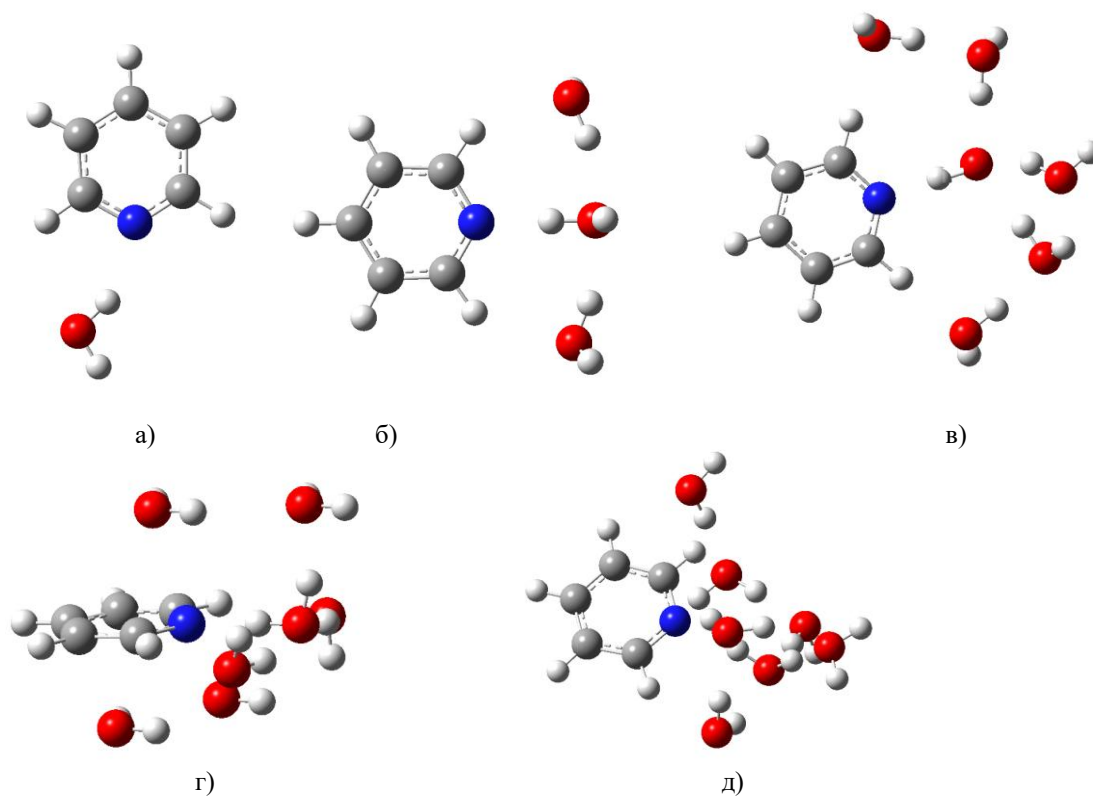


Рис.1 Молекулярные диаграммы комплексов пиридина с 1(а), 3(б), 5(в) и 7(г, д) молекулами воды

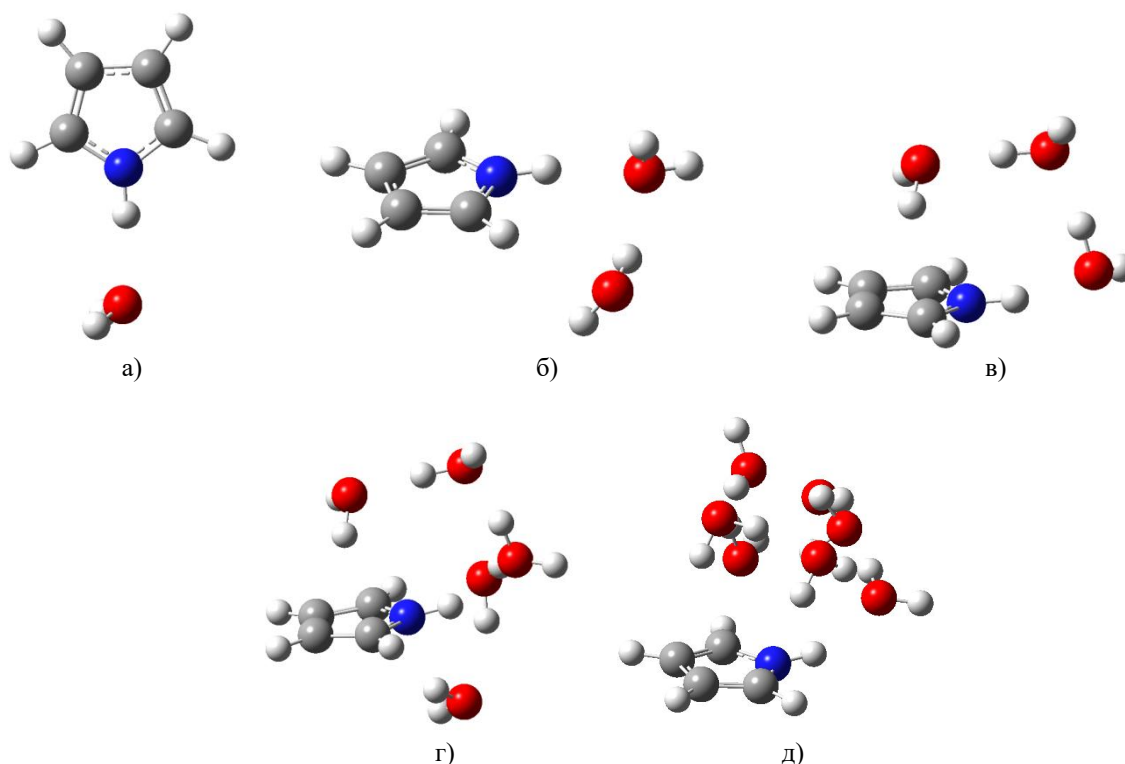


Рис.2 Молекулярные диаграммы комплексов пиррола с 1(а), 2(б), 3(в), 5(г) и 7(д) молекулами воды

При этом дальнейшее присоединение молекул воды показывает, что каждая последующая молекула воды вытесняет предыдущую молекулу воды в область над ароматическим кольцом (рис. 1в, г, д).

Таким образом, сильное взаимодействие с ароматической системой приводит не только к ослаблению ВС NH...O, но и к возможности её быстрого разрыва. Можно сказать, что образование ВС NH...O между молекулами воды и пирролом

возможно, но эта водородная связь неустойчива и кратковременна, учитывая, что молекулы воды находятся в постоянном движении.

Выводы. Таким образом, взаимодействие молекул воды с ароматическим кольцом гетероциклических азотсодержащих соединений происходит разным способом и приводит к разным результатам:

1. Для пиридина взаимодействие с молекулами воды характеризуется способностью пиридина к образованию сильной ВС NH...O. Более того,

характер перемещения молекул воды, взаимодействующих с ароматическим кольцом пиридина, способствует высокой подвижности пиридина в воде, обеспечивая ему высокую растворимость.

2. Для пиррола характерно сильное взаимодействие молекул воды с ароматическим кольцом, которое приводит к ослаблению или разрыву ВС NH...O, образующейся между водой и пирролом, поэтому растворимость пиррола в воде незначительна.

Библиографический список

1. Пиментелл Дж., Мак-Клеллан О. Водородная связь. – М.: Мир, 1964. 462 с.
2. Jeffrey G.A., Saenger W. Hydrogen Bonding in Biological Structures. – Berlin, Germany: Springer, 1991. 569 p.
3. Г.Н. Тен, В.И. Баранов. Влияние воды на структуру, колебательные и электронно-колебательные спектры индола и скатола. – Учебное пособие. Саратов, Изд-во: «Саратовский источник», 2014 г, 90 с.
4. Ефимов Ю.Я. О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды: простейшие модели потенциала Н-связи // Журнал структурной химии. 2008. Т. 49. С. 265–273.
5. Тен Г.Н., Яковлева А.А., Бурова Т.Г., Березин В.И., Баранов В.И. Моделирование колебательных спектров водного раствора индола. // Журнал прикладной спектроскопии. 2010. Т.77, № 4. С. 542-549.
6. Тен Г.Н., Яковлева А.А., Березин В.И., Баранов В.И. Влияние межмолекулярного взаимодействия на структуру и ИК спектры скатола. // Журнал прикладной спектроскопии. 2012. Т. 79, № 2. С. 189-199.
7. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2009.

THE EFFECT OF THE INTERACTION OF THE AROMATIC SYSTEM OF PYRIDINE AND PYRROLE WITH WATER MOLECULES ON SOLUBILITY

G.N. Ten

Saratov State University

The influence of the aromatic system of heterocyclic nitrogen-containing compounds of pyridine and pyrrole on solubility has been studied. Pyridine and pyrrole complexes with different solubility with water molecules were calculated and the parameters of hydrogen bridges were determined.

ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ЕСТЕСТВЕННОЙ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ НА ТЕПЛООБМЕН В ГОРИЗОНТАЛЬНЫХ КАНАЛАХ С ВНУТРЕННИМ ОРЕБРЕНИЕМ

И. А. Ермолаев

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

Ермолаев Игорь Анатольевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры радиотехники и электродинамики

На основе результатов численного моделирования методом конечных элементов естественной тепловой конвекции в горизонтальном канале квадратного сечения с двумя симметричными внутренними рёбрами получены соотношения, описывающие средний тепловой поток через область для рёбер различных относительных размеров.

В [1] исследовалась естественная термогравитационная конвекция воздуха в частично перегороденных квадратных областях, подогреваемых снизу равномерным, постоянным тепловым потоком. Подобная задача возникает в частности при конвективных течениях в каналах микротеплообменников с внутренним оребрением [2].

Для двух одинаковых симметричных горизонтальных ребер в серединах боковых сторон получены возможные режимы конвекции. На Рис. 1 показаны режимы течения для ребер размером $h/H=0.1$, где H – сторона области, h – длина ребра: теплопроводный режим (а); одновихревой (b);

двухвихревой несимметричный (с); двухвихревой симметричный, с горизонтальным расположением вихрей (d). Течения возникают кризисно, в результате потери устойчивости либо равновесия, либо того или иного конвективного режима. Интенсивность естественной конвекции описывалась безразмерным критерием Грасгофа Gr .

Решалась двумерная нестационарная система уравнений Буссинеска в безразмерных переменных «вихрь скорости – функция тока – температура». Использовался метод конечных элементов Галеркина с линейными треугольными конечными элементами, явная схема по времени, метод установления.

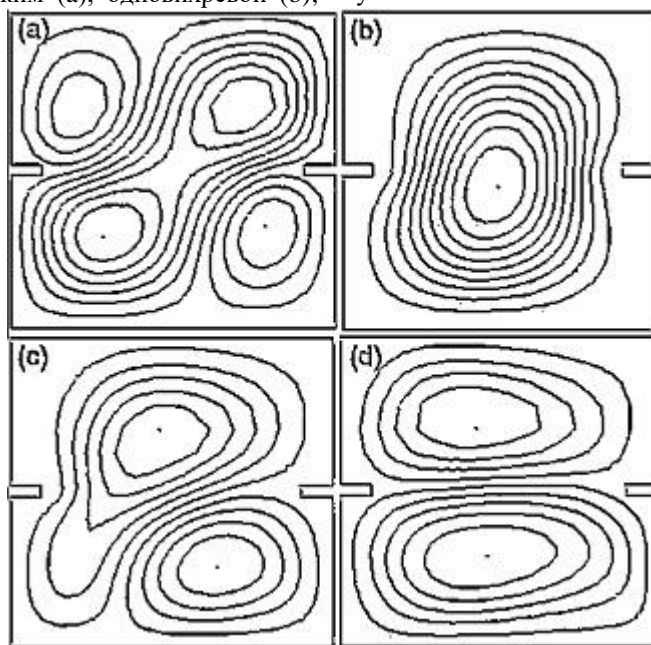


Рис. 1. Линии тока при $h/H=0.1$: $Gr=2 \cdot 10^3$ (a), $Gr=10^4$ (b), $Gr=2 \cdot 10^5$ (c), $Gr=10^6$ (d)

Важной величиной, описывающей конвективный теплообмен, является критерий Нуссельта (безразмерный коэффициент теплоотдачи) Nu . Зависимость числа Нуссельта от интенсивности конвекции, записанная в виде $Nu=C \cdot Gr^m$, является наиболее удобной для инженерного использования, где C , m – вычисляемые константы. Местное число Нуссельта при заданном на границе тепловом потоке может быть вычислено как отношение перепада температур в отсутствии конвекции к перепаду температур при её существовании для фиксированной точки границы. Для вычисления среднего значения критерия Нуссельта, величины местных чисел Nu усредняются по выбранной границе.

Однако, для получения указанных формул необходима линеаризация полученных данных в виде $lg Nu = a lg Gr + b$. На Рис. 2 представлены изменения среднего числа Нуссельта с ростом интенсивности конвекции для различных относительных размеров рёбер, как зависимости $lgNu(lgGr)$. А также линейные аппроксимации этих зависимостей, полученные методом наименьших квадратов (показаны пунктиром). Кроме того, экстраполяция $lgNu(lgGr)$ на ноль позволяет оценить величины критических значений чисел Грасгофа Gr^* , соответствующих кризисному возникновению течений.

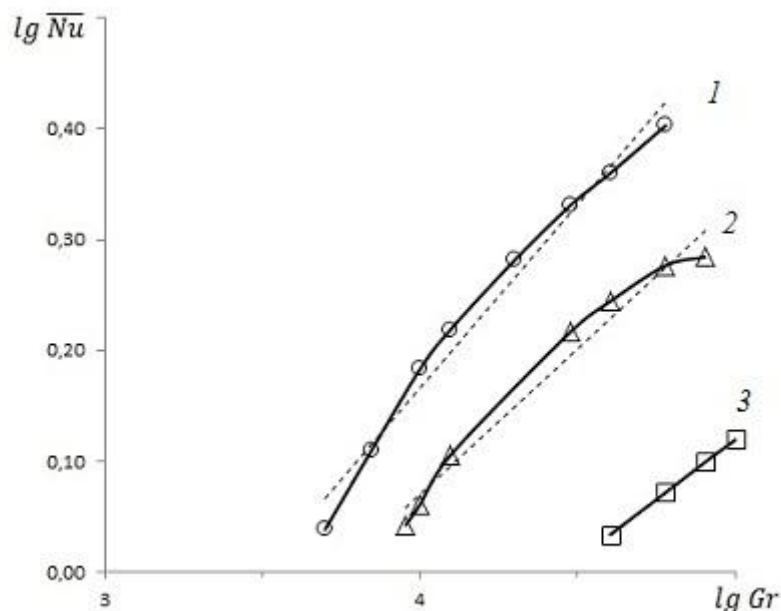


Рис. 2 Зависимость среднего числа Нуссельта от интенсивности естественной конвекции для одновихревого течения: 1 – $h/H=0$; 2 – $h/H=0.1$; 3 – $h/H=0.2$.

Соотношения (1) – (3) являются результатами аппроксимации и экстраполяции.

$$\lg \overline{Nu} = 0.331 \cdot \lg Gr - 1.156; \quad \overline{Nu} = 0.069 \cdot Gr^{0.331}; \quad Gr^* = 3.133 \cdot 10^3; \quad \left(\frac{h}{H} = 0; Gr \leq 10^5\right); \quad (1)$$

$$\lg \overline{Nu} = 0.265 \cdot \lg Gr - 0.988; \quad \overline{Nu} = 0.103 \cdot Gr^{0.264}; \quad Gr^* = 5.445 \cdot 10^3; \quad \left(\frac{h}{H} = 0.1; Gr \leq 10^5\right); \quad (2)$$

$$\lg \overline{Nu} = 0.216 \cdot \lg Gr - 0.961; \quad \overline{Nu} = 0.109 \cdot Gr^{0.216}; \quad Gr^* = 2.792 \cdot 10^4; \quad \left(\frac{h}{H} = 0.2; Gr \leq 10^5\right); \quad (3)$$

Следует отметить, что внутренние рёбра, естественной конвекцией (Рис.2). А также приводят интенсифицируя теплообмен, связанный с к возникновению многотовихревых режимов течения, вынужденным, горизонтальным течением в канале, ещё более снижающих вертикальный теплоперенос. существенно снижает вертикальный теплоперенос

Библиографический список

1. Ермолаев И. А. Естественная термогравитационная конвекция в подогреваемой снизу частично перегороденной квадратной области // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59. №4. С. 571.
2. Дзюбенко Б.В. и др. Интенсификация тепло- и массообмена на макро-, микро- и наномасштабах. – М.: ФГУП «ЦНИИАТОМИНФОРМ», 2008, 532 с.

ESTIMATES OF THE EFFECT OF NATURAL THERMAL CONVECTION ON HEAT TRANSFER IN HORIZONTAL CHANNELS WITH INTERNAL FINING

I.A. Ermolaev

Saratov State University

Based on the results of numerical simulation by the finite element method of natural thermal convection in a horizontal channel of a square section with two symmetrical internal ribs, relations are obtained that describe the average heat flow through the region for ribs of various relative sizes.

К УЧЕБНИКАМ ПОСТРОЖЕ!

Н.Б. Ковылов,

Ковылов Николай Борисович, к.т.н.,

бывший главный конструктор известной электронной аппаратуры

В работе на конкретном примере показано, как печатная продукция может ввести читателей в существенные ошибки.

Несколько лет назад меня заинтересовал доклад старшеклассника из престижного лицея, представленный им на весенней конференции в СГУ «Нелинейные дни для молодых» и положительно оцененный жюри. Не имея доступа к тексту доклада, я поискал сведения о сути доложенного в сетях и понял, что в журналах «Техника молодежи» и «Наука и жизнь» писали о катерах, якобы приводимых в движение МГД-устройствами. Удалось найти и учебное пособие, назвавшее идею этого технического решения для плавающих средств «МГД движителем»[3]. Пазлы начали складываться. Причина, приведшая докладчика к распространению теоретических ошибок, заключена в терминах, примененных в опубликованных первоисточниках. Попробуем разобраться..

Движитель – это элемент механической конструкции для передачи механической энергии от двигателя с целью изменения физических механизмов взаимодействия машины с окружающей средой.

Двигатель – это машина, преобразующая энергию рабочего агента (топливо) в механическую энергию. При этом топливом может быть горючее вещество, электродинамические процессы, химические и биологические реакции. Так, ведущее колесо автомобиля служит движителем. Через элементы конструкции на его ось передается вращающий момент от двигателя. Силы сцепления

колеса с дорогой вызывают противодействующую силу, передающуюся через детали подвески всей массе машины и, следовательно, происходит ее движение.

Возникает правомерное удивление: многочисленные задачки для средней школы приводят в условиях движения автомобилей под уклон или в гору значения коэффициента трения колес о дорогу?! А что, при нулевом трении колесо способно влиять на параметры движения?

Похожая ситуация во взаимодействии с внешней средой складывается при анализе гребных колес пароходов или гусеничных машин. Из сказанного следует, что в полноприводном автомобиле все колеса служат движителями, в остальных – только ведущие

А вот движителем в реактивном самолете или ракете служит насос, который за счет сгорания топлива вырабатывает достаточное количество газов, выбрасываемых из замкнутого объема через сопла во внешнюю среду и создающих реактивную силу тяги в нужном направлении.

Вернемся теперь к началу статьи. Автор доклада на «нелинейных днях» обосновывает конструкцию предложенного макета движителя явно заимствованными из официального вузовского учебника теоретическими «положениями», нелепость которых ясна из приводимого скриншота упомянутого учебника.

при движении проводника с током в постоянном магнитном поле со стороны последнего на проводник действует сила (сила Ампера), равная

$$F = I[\vec{l}\vec{B}],$$

где I сила тока;

l - вектор, численно равный длине проводника и направленный в ту же сторону, что и вектор $j = I/S$ плотности тока, проходящего по проводнику сечением S ;

B - силовая характеристика магнитного поля, называемая вектором магнитной индукции.

Направление силы F при взаимной перпендикулярности l и B определяется правилом левой руки.

Если в качестве проводника электрического тока рассматривать морскую воду, то силы Ампера, возникающие в результате взаимодействия тока, пропускаемого через воду, с постоянным магнитным полем будут ускорять протекающую через поле массу m воды, вызывая непрерывное приращение скорости W_a потока. Такое приращение в соответствии с теорией идеального гидроактивного движителя обуславливает появление силы тяги

$$P_e = mW_a,$$

преодолевающей силу R сопротивления движению судна.

УДК 629.12.073
ББК 39.42-01
Е 601

Утверждено ученым советом Дальневосточного государственного технического рыбохозяйственного университета

Рецензенты:

к. т. н., заместитель начальника ДВГМА по научной работе
Огай С.А.;

к. т. н., профессор кафедры механики твердого деформируемого тела
ДВГТУ Субботницкий В.В.;

к. т. н., доцент, заведующий кафедрой «Электрооборудование и автоматика судов» Дальневосточного государственного технического рыбохозяйственного университета Молочков В. Я.

ББК 39.42-01

Е 601 Емельянов Н. Ф. Судовые магнитогиродинамические (МГД) движители: Уч. пос. Владивосток: Дальрыбвтуз, 2000, 23 с.

В приведенных материалах термин «сила Ампера» использовать нельзя, так как он применим к взаимодействию **проводников** с током и магнитного поля. В рассматриваемом случае следует применять выражение для силы Лоренца, действующей на каждый отдельно взятый ион. Это взаимодействие хорошо известно специалистам по электровакуумным приборам с протяженными электронными потоками и их магнитной фокусировкой. В скрещенных электрических и магнитных полях траектория иона – это спираль вокруг вектора линейной скорости электростатического взаимодействия, и изменения параметров всего потока ионизированной жидкости можно достичь только в замкнутом объеме, например, в кастрюле. И то при условии, что жидкость содержит только ионы одного знака заряда (анионы или катионы).

Когда уже после доклада этот очень креативный старшеклассник изготовил модель своего катера и испытал его в тазу с водой, он обнаружил слабое движение и сильный нагрев воды, что и следовало ожидать. КПД не превышал одного процента !!!

Библиографический список

1. С. Ю. Маламанов. Электродинамический водомет. Журнал «Квант», №6, 2020. С.30-31.
2. Смолин, Г. К. МГД-Насос-Дозатор: монография / Г. К. Смолин, С. В. Федорова ; Рос. гос. проф.-пед. ун-т. - Екатеринбург : Издательство РГППУ, 2003. - 128 с
3. Емельянов Н.Ф. Судовые магнитогиродинамические движители. Уч.пособие. Владивосток. Дальрыбвтуз. 2000.
4. Ковылов Н.Б. О терминах и определениях. Известия ВУЗов. Прикладная нелинейная динамика. Том 22, №4, 2014, Саратов.

BE ATTENTIVE TO TEXTBOOKS!

N.B. Kovylov
Saratov

In the paper, a specific example shows how printed materials can lead readers into significant errors.

В совсем недавнем журнале «Квант» [1] автор статьи и комментатор к ней подтвердили ожидание отрицательного эффекта от использования морской воды в МГД разработках.

В то же время МГД эффекты в насосах проводящих ток жидких металлов (или их расплавов) применяются в металлургии [2]. Нечто похожее и описано в популярных журналах. Кстати, в 50е годы в СССР выпускалась металлическая модель моторной лодки с водометным приводом: крохотный котелок с водой нагревается огарком свечи, выделяющийся при закипании пар возросшим давлением вытесняет содержимое котла через патрубок (сопло) наружу в сторону кормы, а лодка получает импульс движения. Резкое снижение давления приводит к заполнению котла забортной водой и процесс циклически повторяется. Кстати игрушка издавала звук, похожий на реальный стрекот моторной лодки (вот бы сейчас в такую поиграть с детьми).

ВМЕСТО ЭПИЛОГА

Так официальный вузовский учебник ввел школьного учителя в досаднейшую ошибку... Базовые законы общей физики при переиздании многих учебников не всегда удачно редактируются, а границы их применимости во многих случаях, как и в рассмотренном случае, не оговорены. Мой опыт разработки и внедрения физических измерительных приборов показал острую необходимость вспомнить важную роль, которую сыграл во времена СССР Комитет стандартов, который требовал и при разработках, и при обучении специалистов соблюдения стандартного набора процедур, необходимых и достаточных для предотвращения ошибочных технических решений со всеми вытекающими последствиями. Давайте посмотрим на современные учебники с точки зрения базовых физических законов и терминологии.

СПИСОК АВТОРОВ

Аникин Валерий Михайлович	д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой общей, теоретической и компьютерной физики, заслуженный работник высшей школы РФ	Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского (далее –СГУ)
Бабков Лев Михайлович	д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Глухова Ольга Евгеньевна	д.ф.-м.н., заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики	СГУ
Давыдова Надежда Александровна	д.ф.-м.н., ст.н.с., в.н.с.,	Институт физики НАН Украины, Киев
Дербов Владимир Леонардович	д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Ермолаев Игорь Анатольевич	д.ф.-м.н., профессор кафедры радиотехники и электродинамики	СГУ
Ивлиева(Перетокина) Ирина Валерьевна	инженер кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Инкин Максим Глебович,	аспирант Института физики СГУ	СГУ
Карагодов Никита Алексеевич	студент 4-го курса бакалавриата института физики СГУ	СГУ
Николай Борисович Ковылов	Канд. технич. наук	
Машников Валерий Васильевич	к.ф.-м.н., доцент кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Насанова Эльмира Максимовна	Студентка Института физики	СГУ
Нюнько Николай Евгеньевич	к.ф.-м.н., доцент, инженер кафедры общей теоретической и компьютерной физики	СГУ
Санков Константин Викторович	Начальник ОКСТИ	АО ВНИИПИ Газдобыча, Саратов
Слепченков Михаил Михайлович	к.ф.-м.н.,доцент кафедры радиотехники и электродинамики	СГУ
Старшов Михаил Александрович	Зав УИЛ кафедры общей теоретической и компьютерной физики	СГУ
Тен Галина Николаевна	д.ф.-м.н., доцент кафедры радиотехники и электродинамики	СГУ
Чурочкин Дмитрий Викторович	к.ф.-м.н., доцент кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Чурочкина Светлана Викторовна	к.ф.-м.н., доцент кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Шаповалов Александр Степанович	д.ф.-м.н., профессор кафедры общей, теоретической и компьютерной физики	СГУ
Шаповалов Александр Степанович мл	Бакалавр	

СОДЕРЖАНИЕ

ОБРАЗОВАНИЕ

В.М. Аникин	ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ АНАЛОГИИ В ТЕОРИИ ДЕТЕРМИНИРОВАННОГО ХАОСА	3
О.Е. Глухова, М.М. Слепченков,	РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ УГЛЕРОДНЫХ НАНОПЛЕНOK: ПОЛУКЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД	5
А.С. Шаповалов, В.В. Машников, А.С. Шаповалов мл	МЕТОДИЧЕСКОЕ УПРОЩЕНИЕ РАСЧЁТА СПЕКТРА ДРОБОВОГО ШУМА С УЧЁТОМ ПРОЛЁТНЫХ ЭФФЕКТОВ	8
А.С. Шаповалов, В.В. Машников, А.С. Шаповалов мл	МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ТЕОРИИ ФЛУКТУАЦИЙ СИГНАЛА МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ	10
В.Л. Дербов, Н.А. Карагодов	ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИГРОВЫХ СИСТЕМ UNITY И SOURCE ДЛЯ АНИМАЦИОННОГО СОПРОВОЖДЕНИЯ КУРСА ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ	14
М.А. Старшов	СИСТЕМНЫЙ КОНТРОЛЬ ЗНАНИЙ И ОБРАТНАЯ СВЯЗЬ	19
М.А. Старшов	В АРСЕНАЛ ЛЕКТОРА, СТУДЕНТУ ДЛЯ РАЗМИНКИ	23

ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМ

А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл	ОСОБЕННОСТИ ЭФФЕКТА ПОДАВЛЕНИЯ АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА НА ЛИНЕЙНОМ НЕОДНОРОДНОМ ПОТЕНЦИАЛЬНОМ БАРЬЕРЕ	26
А.С. Шаповалов, В.В. Машников, М.Г. Инкин, А.С. Шаповалов мл	СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭФФЕКТА ПОДАВЛЕНИЯ АНОМАЛЬНОГО ДРОБОВОГО ШУМА ЛИНЕЙНОГО НЕОДНОРОДНОГО ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА	29

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Д.В. Чурочкин, С.В. Чурочкина, Э.М. Насанова	О ПАРАДОКСЕ ДРУГА ВИГНЕРА В ЯЩИКЕ	33
Н.Е. Ньюнко, К.В. Санков	ДВУМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ О ЯМАХ СЛОЖНОЙ ФОРМЫ С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ, ПАРАЛЛЕЛЬНЫМИ ОСЯМ КООРДИНАТ	37
Н.Е. Ньюнко, К.В. Санков	НЕКОТОРЫЕ ДВУМЕРНЫЕ ЗАДАЧИ О СВОБОДНОЙ ЧАСТИЦЕ В КОСОУГОЛЬНЫХ БЕСКОНЕЧНЫХ ЯМАХ	39

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ

Г.Н. Тен	КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ 2-ГИДРОКСИ,4-ОКСО ТАУТОМЕРА УРАЦИЛА	41
Л.М. Бабков, Н.А. Давыдова, И.В. Ивлиева(Перетокина)	СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК СПЕКТРОВ ТРИФЕНИЛФОСФИТА	44

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Г.Н. Тен	ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АРОМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПИРИДИНА И ПИРРОЛА С МОЛЕКУЛАМИ ВОДЫ НА РАСТВОРИМОСТЬ	59
----------	--	----

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

И.А. Ермолаев	ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ ЕСТЕСТВЕННОЙ ТЕПЛОВОЙ КОНВЕКЦИИ НА ТЕПЛООБМЕН В ГОРИЗОНТАЛЬНЫЙ КАНАЛАХ С ВНУТРЕННИМ ОРЕБРЕНИЕМ	62
---------------	---	----

ДИСКУССИЯ

Н.Б. КОВЫЛОВ	К УЧЕБНИКАМ ПОСТРОЖЕ!	64
--------------	-----------------------	----

АВТОРЫ

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

В конце номера

CONTENTS

EDUCATION

V. M. Anikin	THERMODYNAMIC ANALOGIES IN THE THEORY OF DETERMINISTIC CHAOS	3
O.E.Glukhova, M.M.Slepchenkov	CALCULATION OF THE ABSORPTION COEFFICIENT OF CARBON NANOFILMS: A SEMI-CLASSICAL APPROACH	5
A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, A.S. Shapovalov Jr	METHODICAL SIMPLIFICATION OF THE SHOT NOISE SPECTRUM CALCULATION TAKING INTO ACCOUNT TRANSIT EFFECTS	8
A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, A.S. Shapovalov Jr	METHODICAL ASPECTS OF THE THEORY OF SIGNAL FLUCTUATIONS OF A MULTI-DIODE MICROWAVE GENERATOR	10
V.L. Derbov, N.A. Karagodov	USING UNITY AND SOURCE GAME SOFTWARE FOR ANIMATION SUPPORT OF THE TRAINING COURSE IN THEORETICAL MECHANICS	14
M. Starshov	SYSTEMIC KNOWLEDGE CONTROL AND FEEDBACK	19
M. Starshov	TO THE LECTOR'S ARSENAL, TO THE STUDENT FOR WARM-UP	23

ELECTROMAGNETISM

A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, M.G. Inkin, A.S. Shapovalov Jr	SOME FEATURES OF THE EFFECT OF SUPPRESSING OF THE ANOMALOUS SHOT NOISE ON LINEAR INHOMOGENEOUS POTENTIAL BARRIER	26
A.S. Shapovalov, V.V. Mashnikov, M.G. Inkin, A.S. Shapovalov Jr	SPECTRAL CHARACTERISTICS OF THE SUPPRESSION EFFECT OF ANOMALOUS SHOT NOISE OF THE LINEAR HETEROGENEOUS POTENTIAL BARRIER	29

THEORETICAL PHYSICS

D. Churochkin, S. Churochkina E. Nasanova	ON WIGNER'S FRIEND PARADOX IN A BOX	33
N.E. Nyun`co, K.V. Sankov	TWO-DIMENSIONAL PROBLEMS ABOUT PITS OF COMPLEX SHAPE WITH INFINITE WALLS PARALLEL TO THE COORDINATE AXES	37
N.E. Nyun`co, K.V. Sankov	SOME TWO-DIMENSIONAL PROBLEMS OF QUANTUM MECHANICS FOR A PARTICLE IN A POTENTIAL WELL OF COMPLEX SHAPE WITH INFINITE WALLS PARALLEL TO THE COORDINATE AXES.	39

OPTICS AND SPECTROSCOPY

G.N. Ten	VIBRATIONAL SPECTRA OF 2-HYDROXY,4-OXO-TAUTOMER OF URACIL	41
L.M. Babkov, N.A. Davydova, I.V. Ivlieva(Peretokina)	STRUCTURAL DYNAMIC MODELS AND INTERPRETATION OF THE IR SPECTRA OF TRIPHENYLPHOSPHITE	44

PHYSICAL CHEMISTRY

G.N. Ten	THE EFFECT OF THE INTERACTION OF THE AROMATIC SYSTEM OF PYRIDINE AND PYRROLE WITH WATER MOLECULES ON SOLUBILITY	59
----------	---	----

ENGINEERING

I.A. Ermolaev	ESTIMATES OF THE EFFECT OF NATURAL THERMAL CONVECTION ON HEAT TRANSFER IN HORIZONTAL CHANNELS WITH INTERNAL FINING	62
---------------	--	----

DISCUSSION

N.B. Kovylov	BE ATTENTIVE TO TEXTBOOKS!	64
--------------	----------------------------	----

LIST OF THE AUTHORS

66

CONTENTS IN RUSSIAN

67

CONTENTS

68

«... А Мегрэ тем временем выбивал трубку о каблук, **вытряхивая золу на ковёр...**»

СИМЕНОН Ж. Весь Мегрэ. Т.7., С.174. (это он в квартире адвоката Дандюрана).

Учительская газета, №28 от 12 июля 2022:

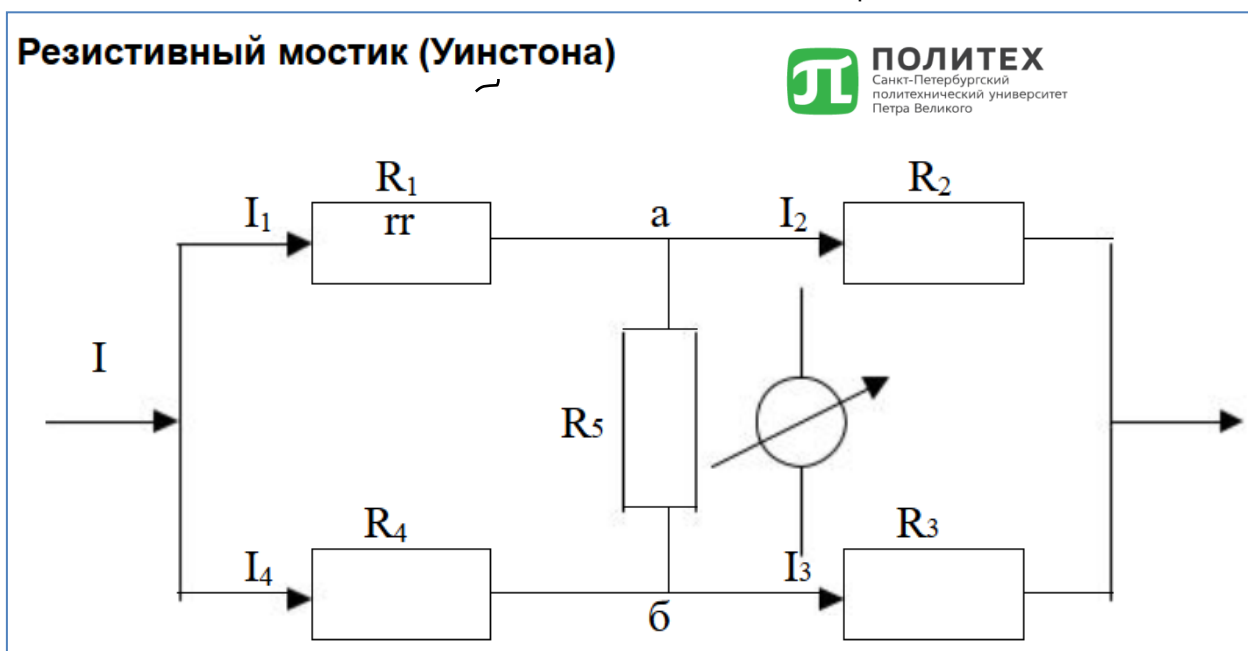
«... Но вернемся к МКС, на которой собран целый «экипаж» игрушек. Оказывается, у космонавтов есть традиция перед каждым полетом брать с собой мягкие игрушки-талисманы. Это, во-первых, память о доме, родных и близких, во-вторых, отличный индикатор невесомости. Когда корабль выходит на целевую орбиту и гравитация перестает действовать, игрушка уже больше не тянется вниз к Земле. Она начинает парить в невесомости».

Андрей СЁМКЕ, учитель физики и астрономии, председатель клуба «Учитель года Кубани», специалист ИРО Краснодарского края, заслуженный учитель Кубани, лауреат премий Януша Корчака и «Династия»

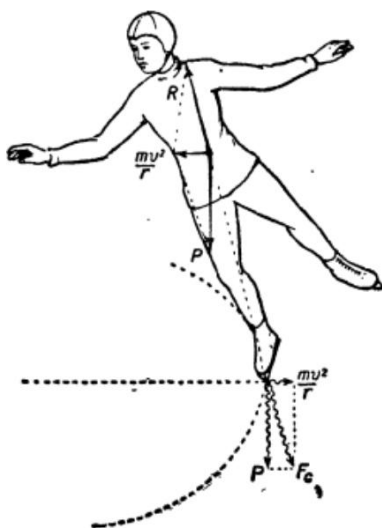
«Гравитация отсутствует, ведь космонавт в свободном падении...»

ЧЕРЕПАЩУК АМ., академик. Лекция в МГУ по астрономии о "Темной материи и черных дырах"

Не «Литейный», и не Аничков, конечно, но тоже красив!

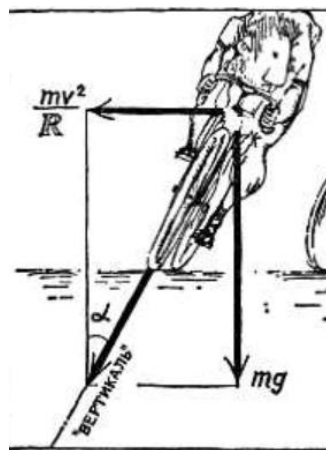
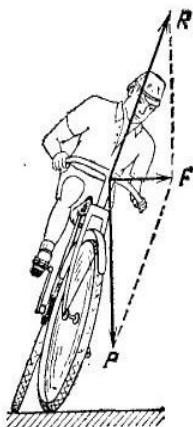


СанктПетербургский технический университет, лектор Мальхазов С. Е.



<https://studfile.net/preview/397187/page:32/>

Это из учебника К.А. Путилова. А вот о том же два академика:



Посмотрим самый свежий вариант Д. Ивашкиной в журнале «Физика в школе». Если упадёт, беспилотника не жалко:

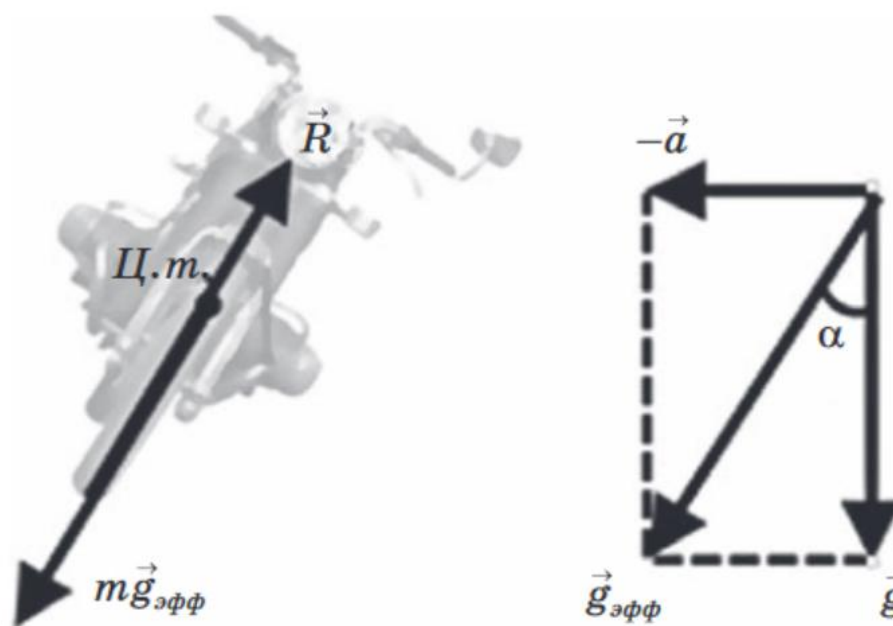


Рис. 13. Эффективное ускорение свободного падения и равновесие под действием двух сил

Кажется, есть подозрение, что все четверо не смогли правильно объяснить опасную ситуацию на повороте.

Химия и жизнь, 1985, №1 Календарь:

310 лет назад, в 1675...

Датский астроном О. Рёмер (1644—1710), наблюдая затмения спутников Юпитера, сумел определить скорость света. Его результат (около 320 тыс. км/ч) лишь незначительно отклоняется от современного.

Хотя метр как единица длины был предложен во Франции 31 марта 1791 года. Да и сам Ремер измерял совсем другое...

И снова Мегре расследует преступление, «...вытряхивая **пепел из трубки прямо на ковёр...**»

СИМЕНОН Ж. Весь Мегрэ. Т.7, С.349 – в квартире подозреваемой дамочки.