

ISSN 0868-6238

ПОСВЯЩАЕТСЯ 100-ЛЕТИЮ ИМПЕРАТОРСКОГО САРАТОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

# ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ



ИЗДАТЕЛЬСТВО  
САРАТОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА



*Выпуск 17*

**2010**

## ПРОБЛЕМЫ ТЕПЛООВОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

В.С.Кошелев, А.С.Шаповалов

Саратовский государственный университет

*Кошелев Василий Сергеевич*, д.т.н., профессор кафедры прикладной физики*Шаповалов Александр Степанович*, д.ф.-м.н., профессор кафедры прикладной физики

Обсуждается развитие и применение методик теплового проектирования электронных приборов на кафедре прикладной физики СГУ

## 1. Актуальность проблемы

Развитие электроники показало, что создание эффективных вакуумных и твердотельных электронных приборов (ЭП) невозможно без их теплофизического и термомеханического проектирования [1-3].

Действительно, современные тенденции миниатюризации электровакуумных приборов (ЭВП), практическая необходимость создания приборов большой мощности в коротковолновом диапазоне длин волн [4-13] приводят к тому, что многие элементы приборов испытывают нагрузки, близкие к предельным. Обеспечение надёжности таких приборов вызывает необходимость их теплового проектирования.

Применительно к маломощным электровакуумным приборам СВЧ эта проблема также актуальна, если их функциональное назначение требует низкого уровня собственных шумов. Как известно [14,15], основным источником собственных шумов ЭВП является катод. Неравномерность распределения температуры вдоль эмитирующей поверхности катода приводит к неоднородности его эмиссионных свойств и плотности распределения скорости эмитируемых электронов (кинетической неоднородности). Эмиссионная и кинетическая неоднородность эмитирующей поверхности, в свою очередь, вызывает повышение уровня спектральной плотности флуктуаций тока и кинетического потенциала электронного пучка на катоде [15]. Кроме того, она приводит к возникновению корреляции флуктуаций тока и кинетического потенциала электронного потока. Отмеченные факторы повышают шумность электронного пучка, что ведёт к росту коэффициента шума усилителей и отношения шума к сигналу генераторов СВЧ.

Многочисленные экспериментальные исследования термокатодов различных типов показывают существенное изменение температуры вдоль поверхности эмиттеров [16], изменение работы выхода [3, 17-21], неоднородность эмиссионной способности (плотности тока эмиссии) вдоль эмитирующей поверхности [3,14,22-25,26-39]. В работах [3,25,40,41] обосновывается динамический характер эмитирующих центров.

Результаты экспериментальных исследований распределения продольных [25,42-48,] и поперечных [25,49-51] скоростей электронов, эмитированных реальными (неоднородными) катодами, свидетельствуют о том, что величина разброса этих скоростей может существенно превышать соответствующую величину для идеального однородного эмиттера.

Данные экспериментального исследования дробовых шумов эффективных термокатодов показывают, что в ряде случаев они могут быть аномально высоки и на 1-2 порядка превышать теоретические значения, определяемые формулой Шоттки [52-55]. Результаты аналогичных исследований низкочастотных шумов эмиттеров приводятся в работах [3,25,56-68].

Совершенно очевидно, что отмеченные неоднородности эмиссионных и шумовых параметров эмиттеров, связаны с технологией создания эмиссионных покрытий катодов, а также с тепловыми эффектами на катоде в его рабочих режимах. Приведённые данные свидетельствуют о том, что проблема эмиссионной и кинетической неоднородности катода достаточно актуальна и одно из важных направлений её решения связано с тепловым проектированием электронных устройств.

Прогресс современной электроники обеспечивается развитием и твердотельного, и вакуумного направлений, так как вакуумные и полупроводниковые приборы по своему параметрическому потенциалу дополняют друг друга [8].

Интенсивное развитие твердотельной техники СВЧ объясняется [6-8] тем, что полупроводниковые приборы обладают целым рядом таких неоспоримых достоинств, как малый вес, габариты, энергопотребление и пр. Однако им присущ и ряд принципиальных недостатков. К наиболее существенным из них относятся дрейф параметров, ограниченность интервала рабочих температур, отсутствие устойчивости к радиационным и температурным воздействиям, малые предельные мощности, трудности в освоении миллиметрового и, тем более, субмиллиметрового диапазонов (что связано с недостаточной теплопроводностью полупроводникового материала, малыми межэлектродными расстояниями и пр.). Вакуумные приборы в значительной степени свободны от этих недостатков. Перечисленные недостатки полупроводниковых приборов в значительной степени связаны с тепловым фактором.

Таким образом, актуальность проблемы теплофизического проектирования характерна и для вакуумного, и для твердотельного направлений современной электроники.

Теплофизическое конструирование охватывает задачи анализа и оптимизации тепловых режимов приборов, а также расчёт термонапряжений и деформаций в элементах и узлах этих приборов. В принципе, это итерационный процесс, и его ускоренное проведение в короткие сроки возможно лишь в рамках систем автоматического проектирования.

Сложность проблемы теплофизического проектирования обусловлена как многообразием и сложностью изделий электронной техники, так и необходимостью решения двумерных, а иногда и трёхмерных уравнений в частных производных для многокомпонентных сред при соответствующих граничных условиях. Самостоятельную и трудную задачу представляет определение параметров граничных условий (плотности теплового потока, коэффициента теплоотдачи, контактного сопротивления, зависимости коэффициента теплопроводности от температуры и т.д.)

При расчёте теплового режима необходимо уметь правильно выбрать теплофизическую модель прибора, применять соответствующие методы решения и реализующие их программы, а также правильно вычислять параметры граничных условий. Построение теплофизической и математической моделей узлов (ЭВП) зависит от типа прибора, поэтому давать здесь гарантированные универсальные рецепты затруднительно. В связи с этим в данной работе основное внимание будет уделено анализу разработанных расчётных методик и реализующих их программ.

Все методики можно разделить на 2 группы.

В первую группу входят специализированные методики и программы, для анализа тепловых и термомеханических режимов конкретных типовых конструкций отдельных узлов.

Вторую группу образуют алгоритмы и программы универсального назначения, которые позволяют исследовать самые разнообразные узлы и устройства.

## 2. Специализированные методики и программы.

### 2.1 Анализ тепловых режимов катодно-подогревательных и катодно-сеточных узлов

Наиболее высокую температуру имеют катодно-подогревательные узлы (КПУ) и катодно-сеточные узлы (КСУ) электронных приборов. В их работе большую роль играет перенос теплоты излучения и теплообмена в зоне контакта отдельных электродов. Известны несколько специализированных методик (программ) для теплового анализа КПУ. Для КПУ генераторных ламп – это методика Эпштейна М.Р. [1], для КПУ, КСУ торцевых катодов СВЧ ЭВП с залитым и незалитым подогревателем – методика, разработанная в СГУ Цымбаловым Г.М., Егоровым А.А. и др. и реализованная в комплексе программ [1,69-71]. В последнем случае вычисляется мощность накала подогревателя, геометрические размеры подогревателя и держателя, тепловой КПД и время готовности.

Найдены критерии оптимизации КПУ, КСУ по экономичности, надёжности и долговечности (поперечная перфорация держателя, оптимальные значения параметров источника питания, числа экранов, оптимальная длина держателя, минимальная разность температур подогревателя и керна катода). Установлено оптимальное значение теплового КПД катодов с различными эмиттерами. Выявлены пути снижения тепловых потерь в КПУ и времени его готовности.

На кафедре прикладной физики СГУ также разработаны [1,2,69-71] методики и реализующие их программы (Цымбалов Г.М., Кошелев В.С. и др.) термомеханического расчёта КПУ, КСУ, электронных пушек, позволяющие:

1. Определить тепловые уходы (в упругой постановке) элементов КПУ, КСУ в стационарном и переходном процессах. Катод моделировался упругой системой, состоящей из цилиндрических оболочек и пластин. Для решения термоупругой задачи использовалась известная теория пластин и оболочек.

2. Решить термомеханические задачи, связанные с оценкой деформации элементов КПУ. Этот фактор существенно определяет надёжность и долговечность узлов. Для КПУ с одно- и многослойными кернами получено решение термомеханической задачи с учётом пластической деформации. Рассмотрен вклад как мгновенной пластической деформации, так и деформации текучести, обусловленной релаксацией напряжений в каждом цикле. Показано, что введение «среза» по периметру керна позволяет существенно уменьшить усилия в крене, вызывающие его деформацию. Таким образом, удалось установить важный фактор, позволяющий решить задачу по разработке долговечных КПУ.

3. Разработать способы целенаправленного регулирования тепловых перемещений в узлах и снижения уровня термонапряжений путём применения двухслойного держателя, многослойного керна, обеспечения оптимального зазора между камерой и держателем, введения продольной перфорации держателя, создания предварительного «отрицательного» напряжённого состояния, подбора оптимальных параметров (толщина керна, держателя, количество точек сварки)

4. Выполнить теоретические исследования по теплообмену в эмиттерах КПУ. При этом учитывались все эффекты распространения лучистой энергии в полупрозрачной среде, а также явление нелинейной теплопроводности при токоотборе с учётом эффектов Джоуля-Ленца и Томсона. Эти исследования явились основой для теоретического расчёта диффузии центров электронной эмиссии и долговечности эмиттеров по эмиссии в стационарном и импульсном режимах работы КПУ.

### 2.2 Анализ тепловых режимов замедляющих систем

Для расчёта замедляющих систем (ЗС) предложено значительное число методик и программ [1]. В НИИ «Волна» выпускниками кафедры Дацковским В.А. и др. разработаны программы для расчёта температурного поля высокочастотного пакета со спиральной ЗС типа «гребёнка», а также ЗС типа «кольцо в ножке». В основу программ положен метод частичных областей.

### 2.3 Тепловой режим устройств вывода энергии

Для исследования тепловых режимов таких устройств были разработаны методики Колосова Ю.А. и программы Шустова М.Д. и др., позволяющие рассчитывать удельную мощность тепловых источников, определить возникающие при этом температурные поля и поля напряжений [1]. Расчёт мощности тепловых источников проводится по методике,

предложенной в известной монографии Силина Р.А., Сазонова В.А.

#### 2.4 Тепловой режим коллекторных узлов

Этому вопросу уделялось большое внимание в различных научных организациях: НИИ «Исток», НИИ «Волна», НИИ «Титан» и др. Например, в работах Дацковского В.А. разработанные программы позволяют определить температурное поле наиболее теплонагруженного поперечного сечения каждого из элементов коллекторного узла, закреплённого круглыми диэлектрическими опорами, с учётом реальных термических сопротивлений контактов коллектор – опора и опора – корпус.

В СГУ Скапцовым А.А. разработана оптимальная методика расчёта коллектора мощного ЭВП с незранированным катодом [1,2]. Равномерное токооседание в коллекторе достигается в отличие от известных способов не подбором углов раствора внутренних конических поверхностей коллектора, а путём создания в коллекторе пучка, параллельного оси коллектора (радиусом большим радиуса пучка вие коллектора) и рассеиванием его на одной из конических поверхностей.

Создание параллельного пучка внутри коллектора осуществляется формированием в коллекторе и на его входе выбросов магнитного поля определённой величины.

#### 2.5 Методики и программы анализа теплового режима твёрдотельных электронных приборов

В области анализа тепловых режимов кристаллов твёрдотельных приборов имеется множество публикаций [1]. Поскольку кристалл таких приборов имеет форму прямоугольного параллелепипеда, широко применяются точные аналитические методы решения задач теплопроводности, например, метод разделения переменных или метод интегральных преобразований.

Для рассмотрения более сложных конструкций были разработаны приближённые методики. Так, в работах Захарова А.А. и Асводуповой Е.И. (НИИ «Исток») развит метод упрощённых эквивалентов [1].

Понятие термических сопротивлений использовалось в работах Г.Н. Дульева и др. для создания тепловой модели полупроводникового прибора, а в работах Закса Д.И. – для исследования тепловых режимов микросхем [1]. В работах Петросянца К.О., Рябова Н.И. для анализа тепловых режимов интегральных схем применён метод конечных разностей.

В работах сотрудников СГУ Новосёлова В.В. и др. дан теплофизический анализ режима работы и условий эксплуатации импульсных излучающих диодов. В результате расчётов получены зависимости температурного поля активной области и мгновенной мощности излучения от времени при различных частотах повторения импульсов накачки и их длительности, при различных значениях температуры окружающей среды.

В зависимости средней мощности излучения от частоты повторения импульсов накачки выявлено наличие максимальных значений средней мощности излучения. Положение экстремума имеет тенден-

цию к сдвигу в сторону меньших частот с ростом фазовой температуры активной области.

Все перечисленные методики и программы являются специализированными, предназначенными для расчёта теплового режима определённой конфигурации того или иного узла в рамках определённой теплофизической модели. Между тем, совершенно очевидно, что при разработке прибора новой конструкции возникает необходимость в сравнительном анализе конструктивных вариантов одного и того же узла. Этой цели можно достичь применением универсальных программ, к рассмотрению которых мы переходим.

### 3. Универсальные программы анализа тепловых режимов

Универсальные программы базируются на численных методах решения краевой задачи теплопроводности. Отличительным признаком прямых численных методов является сведение краевой задачи к задаче решения системы линейных алгебраических уравнений высокого порядка. Будем классифицировать универсальные программы по используемому численному методу.

#### 3.1 Метод конечных разностей

Самой первой по времени разработкой является известная система КСИ – БЭСМ, которая первоначально предназначалась для решения задач электроники, но затем стала широко использоваться для решения разнообразных полевых задач, в частности, задач теплопроводности. Система КСИ – БЭСМ удобна для использования, поскольку в ней предусмотрен широкий набор конкретных схем метода конечных разностей, форм представления результатов и гибкий входной язык для составления заданий на счёт.

В работе Кузьменко Ю.В., Шермергор Т.Д. [1] представлена программа решения двумерных уравнений электростатики или стационарной теплопроводности в прямоугольной области с неоднородными свойствами.

#### 3.2 Метод конечных элементов

В работах Блейваса И.М., Кошелева В.С., Жбанова А.И. и др. [1,72-78] предложены универсальные программы решения двумерной и трёхмерной задач стационарной и нестационарной теплопроводности для узлов ЭВП, основанные на использовании метода конечных элементов (МКЭ). Универсальность программ достигнута представлением топологии расчетной области в виде совокупности выпуклых косоугольных четырёхугольников (блоков), каждый из которых имеет постоянный коэффициент теплопроводности. Используя такое представление, можно проводить расчёт практически любых конструкций. Задавая коэффициент теплопроводности отдельных блоков, можно проводить расчёт температурных полей различных электронных приборов. Вводя промежуточные блоки малой толщины с определённой величиной сопротивления, можно анализировать теплообмен с учётом неидеальных тепловых контактов. В настоящее время область дейст-

вия программ расширена на задачи с внутренними источниками тепла.

Метод конечных элементов применяется для анализа тепловых режимов конструкций разнообразных узлов: сопловых вставок аэродинамических труб, элементов дизельных и реактивных двигателей, муфт маслозаполненных высоковольтных кабелей и дискретных полупроводниковых приборов, для расчёта статических магнитных полей магнитных систем, для исследования термоупругих напряжений в кристаллах полупроводниковых приборов.

Был проведён детальный анализ тепловых режимов микросборок современных быстродействующих ЭВМ в трёхмерной постановке с учётом влияния охлаждающей среды. Рассмотрены также задачи теплопроводности в элементах микросхем. Накопленный опыт применения программ позволяет применять их для исследования технологических задач современной микроэлектроники: процессов диффузии, выращивания кристаллов, лазерного отжига и других актуальных конструкторско-технологических задач, возникающих при разработке ИЭТ.

#### 4. Приближённое решение задачи сопряжённого теплообмена.

Применение в современной технике приборов и устройств с большими плотностями рассеиваемых тепловых потоков делает необходимым их предварительный тепловой расчёт. Сложность определения температурных полей, например, коллекторов мощных ЭВП с жидкостным охлаждением, вызвана необходимостью постановки сопряжённой задачи, т.е. совместного решения уравнений теплопроводности для узла и конвективного уравнения для жидкости. С целью автоматизации подобных расчётов сотрудниками СГУ Жбановым А.И. и др. были разработаны программы решения МКЭ двумерных и трёхмерных задач сопряжённого теплообмена [1,75,78]. В программах сопряжённая постановка заменена многократным итерационным решением задачи теплопроводности, в которой проводится коррекция условий теплообмена в зависимости от температуры стенки канала, его размеров, свойств охлаждающей жидкости. Для этого в программу введены эмпирические формулы для различных режимов течения жидкости, соотношения для определения коэффициента теплоотдачи при пузырьковом и плёночном режимах кипения охладителя, а также толщины плёнок наиболее распространённых охлаждающих жидкостей.

Программы были использованы для расчёта оптимальных в тепловом отношении конструкций коллекторов, систем оребрения при различных режимах охлаждения.

#### 5. Формоизменение элементов ЭП

Ограниченный ресурс ЭП связан как с потерей с течением времени эмиссии катода, так и с формоизменением керна катода и держателей.

Причиной последнего является накопление пластической деформации, приводящее к увеличению диаметра и возрастания стрелы прогиба керна катода. Экспериментальное исследование формоизмене-

ния керна КПУ было проведено Никоновым Б.П. [3]. Теоретическое исследование этого явления было выполнено в СГУ Скапцовым А.А. и Кошелевым В.С. [1,2].

Было показано, что формоизменение элементов ЭП наблюдается как в непрерывном, так и в циклических режимах включения накала. Однако наиболее интенсивно процесс формоизменения идёт в режиме термоциклирования. Описание процесса образования и кинетики накопления от цикла к циклу пластических деформаций должно быть основано на решении задачи пластического деформирования с релаксацией упругих напряжений.

Начальными условиями такой задачи могут являться решения её на предыдущем термоцикле. Так учитывается предыстория деформирования. Начальными условиями для 1-го термоцикла служит решение упругой задачи в вышеизложенной формулировке.

Анализ кинетики накопления пластической деформации в системе держатель – керн показал, что существуют 3 варианта накопления: вариант ускоренных накоплений (1), вариант равномерного накопления (2) и вариант замедленного накопления (3). В последнем, наиболее интересном случае существует предельно допустимый уровень, по достижении которого прирост пластической деформации практически прекращается – наступает состояние приспособления. Критерием реализации того или другого варианта является разность приращений пластической деформации в элементах системы.

Формоизменение является термоактивационным процессом. Это даёт возможность сформулировать критерий оценки места возможной локализации формоизменения, превышающего допустимый уровень. Если считать, что допустимой величиной формоизменения является величина формоизменения за 1 цикл нагрева до температуры плавления, (что соответствует образованию пластической деформации 1-2%), то число циклов до накопления такой деформации при температуре  $T$  в месте соединения в каждом из элементов можно оценить из критериального уравнения. Из него же можно оценить температуру, при которой следует ожидать формоизменения элементов на 1-2% за  $N$  циклов.

#### 6. Мгновенная и длительная прочность элементов ЭП

Мгновенной прочностью или пределом прочности на разрыв часто пользуются при оценке запаса прочности конструкций ЭП при рабочих режимах эксплуатации. Оказывается, что предел прочности сильно зависит от температуры.

Величина длительной прочности всегда меньше мгновенной прочности. Величина их отношения определяет запас прочности, который характеризует прочность конструкции ЭП. Согласно методической разработке СГУ (Скапцов А.А. др.) запас прочности сильно зависит от температуры, причём существуют 3 выраженных области в этой температурной зависимости, отражающие разные механизмы ползучести металлов под нагрузкой. В интервале температур от комнатной до  $0,4T_{пл}$  ( $T_{пл}$  - температура плавления) ползучесть не опасна, так как легко может

быть предотвращена путём выбора такого конструктивного решения, которое бы обеспечило необходимый запас прочности. В этой области запас прочности гарантирует долговечность металла (до разрушения) 100 тысяч часов.

Более сложной является задача создания конструкции в области  $(0,4-0,7)T_{пл}$ . Запас прочности, необходимый для обеспечения средней долговечности 30-100 тысяч часов непрерывной работы, сильно зависит от рабочих температур. В области температур порядка  $0,5T_{пл}$  средняя долговечность колеблется от 9 до 20 тысяч часов. Получить такой запас прочности для реальных конструкций ЭП достаточно сложно, если учесть, что величина предела прочности резко падает с ростом температуры.

В области диффузионной ползучести при температуре порядка  $0,7T_{пл}$  возможно создание лишь очень простых элементов. Здесь запас прочности не должен быть меньше 100 тысяч часов при  $T=0,8T_{пл}$ . Такой большой запас может быть обеспечен лишь для коротких нитей накала, не испытывающих внешних нагрузок.

Теоретическая модель, удовлетворительно описывающая диффузионную рекристаллизацию материалов ЭП, основана на решении диффузионного уравнения применительно к миграции и поглощению вакансий растущей поверхности трещины в режиме термоциклирования. Можно показать, что при испытании ЭП на циклическую прочность существует оптимальная длительность термоцикла.

#### 7. Планирование ускоренных испытаний ЭП на циклическую долговечность (методика СГУ)

Известно, что ускоренные испытания должны основываться на выборе температур испытаний, превышающих рабочие температуры. Необходимый интервал температур ( $T_{мин}$ ,  $T_{макс}$ ) определяется, исходя из максимального  $N_{макс}$  и минимального числа  $N_{мин}$  циклов, запланированных испытателем. В выделенном таким образом интервале были проведены испытания типовой конструкции КПУ с заполнителем  $Al_2O_3$ . Оказалось, что существует значительный разброс в свойствах материала подогревателя и точности задания и стабилизации температуры испытаний.

Исследования привели к важным практическим выводам:

1. Повышение надёжности при большом значении долговечности достигается лишь при очень большой стабильности температур испытаний, а также использованием материалов с очень малыми разбросами физических свойств от узла к узлу.

2. При существующей на практике точности задания и стабильности температур и свойств материалов ЭП бесперспективными являются попытки точного определения надёжности в области больших долговечностей. Оказывается, что определение долговечности ЭП величиной, равной 10 тысяч циклов, с надёжностью 70% требует затрат времени на испытание в 0,7 года (при длительности цикла, равной 6 мин), а для долговечности в 100 тысяч циклов - длительность испытаний возрастает до 8 лет.

#### 8. Программы расчёта термонапряжений в твёрдотельных приборах

Кристалл является наиболее теплонагруженным элементом полупроводникового прибора. В кристалле тепловой источник, как правило, сильно локализован. Это приводит к большим градиентам температур, а, следовательно, высокому уровню термонапряжений и деформаций. Наличие термонапряжений многопланово сказывается на работе прибора.

В течение длительного времени выполнялось очень мало работ, посвящённых исследованию термомеханического состояния полупроводниковых приборов. Как правило, они были представлены одномерными моделями, совершенно не учитывающими особенности реальных конструкций приборов. Однако позднее в СГУ появились методики исследования двумерных термомеханических моделей [1] (работы Цымбалова Г.М. и Корнеевой Н.В.), позволяющие исследовать термонапряжённое состояние кристаллов приборов с учётом конструктивных и термомеханических параметров.

#### Заключение

В заключение обзора отметим следующее. Дальнейшее развитие теплофизических исследований следует проводить в плане работ, позволяющих определить неидеальность контакта элементов в узлах полупроводниковых приборов, решения самосогласованных задач теплофизики и электрофизики, сопряжённых задач теплообмена (теплопроводности и конвекции, теплопроводности и излучения). Актуально проведение исследований для тонкоплёночных систем, в которых физические параметры существенно зависят от температурного фактора. Следует интенсифицировать экспериментальные исследования по определению теплофизических параметров материалов ИЭТ на малых образцах, а также для тонкоплёночных изделий. Возможность измерения физических параметров поверхностных слоёв позволила бы ускорить исследования по прогнозированию долговечности узлов ИЭТ.

Дальнейшее развитие термомеханических исследований для производства ИЭТ следует проводить с учётом нелинейных эффектов. Необходимы разработки методов решения согласованных задач теплофизики и термоупругости для режимов быстроменяющейся циклической нагрузки. Особое значение это играет для полупроводниковых приборов. Так, например, наличие напряжений в кристалле генераторного диода стимулирует деградационный процесс (размножение дислокаций и увеличение концентрации точечных дефектов в кристалле), а также обуславливает изменение выходных характеристик: вследствие пьезоэлектрических эффектов происходит изменение показателя преломления кристалла, при этом даже изотропная среда становится анизотропной, что приводит к деполяризации лазерного луча, к смещению и раздвоению нелинейного фокуса.

К числу важных направлений теплофизических исследований следует отнести тепловые конструктивно-технологические задачи обеспечения эмисси-

онной и кинетической однородности эмитирующей поверхности катодов маломощных электронных приборов.

Так же перспективными следует считать экспериментальные исследования процессов, сопутствующих взаимодействию энергетических пучков с поверхностью твёрдых тел (работы, проводимые в НИИ «Титан»).

Актуальными следует считать исследования по разработке физических концепций, описывающих

разрушение узлов ЭВП под действием термомеханического фактора и дающих возможность прогнозирования их долговечности.

Важным является также решение проблемы по разработке диалогово-информационно-поисковой системы, позволяющей разработчикам успешно использовать накопленный опыт по тепловому конструированию ИЭТ.

#### Библиографический список

1. Кошелев В.С. Теплофизические процессы в элементах СВЧ-приборов. Саратов. Издательство СГУ. 1980.
2. Кошелев В.С., Скапцов А.А. Термомеханические процессы в ИЭТ. Саратов. Издательство СГУ. 1994.
3. Никонов Б.П. Оксидный катод. М., 1979.
4. Королев А.Н., Зайцев С.А. // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1993.- Вып. 1.- С. 5-11.
5. Ребров С.И., Сазонов В.П. // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1982.- Вып. 12.- С. 5-17.
6. Стабильные низковольтные электровакуумные и полупроводниковые СВЧ-генераторы повышенной мощности. Часть 1. Отражательные клистроны и генератор с тормозящим полем : Обзоры по электронной технике. Серия 1. Электроника СВЧ / Бродуленко И.И., Афанасьев А.И., Андрианова Е.П. и др. - М.: ЦНИИ "Электроника". - 1991. - Вып. 5(1621). - 64с.
7. Стабильные низковольтные электровакуумные и полупроводниковые СВЧ-генераторы повышенной мощности. Часть 2. Низковольтные пролетные, пролетно-отражательные клистроны и полупроводниковые СВЧ-генераторы : Обзоры по электронной технике. Серия 1. СВЧ-техника / Бродуленко И.И., Афанасьев А.И., Андрианова Е.П. и др. - М. : ЦНИИ "Электроника". - 1992. - Вып. 4(1671). - 68с.
8. Бродуленко И.И., Мальцев В.А. Параметры, перспективы развития и применения низковольтных СВЧ - генераторов малой и повышенной мощности // Электронная техника. Серия 1, СВЧ-техника. - 1994.- Вып. 4. - С. 3-7.
9. Алексеенко А.М., Голант М.Б., Григоришин И.Л., Негирев А.А., Сеницын Н.И. Миниатюризация электровакуумных СВЧ, -КВЧ и ВЧ приборов малой мощности // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1990. - Вып. 10. - С. 18-23.
10. Алексеенко А.М., Голант М.Б., Негирев А.А., Хомич В.Б. и др. Проблемы миниатюризации вакуумных генераторных СВЧ-приборов О-типа малой мощности // Электронная техника. Серия 1, СВЧ-техника. - 1993. - Вып. 1.- С. 28-33.
11. Бродуленко И.И., Ковтунов Д.А., Балыко А.К. Энергетический аспект миниатюризации СВЧ-генераторов малой и повышенной мощности // Электронная техника. Серия 1, СВЧ-техника. - 1996.- Вып. 1. - С. 30-34
12. Кальман Г.В., Рубинштейн Ю.И. Современное состояние ламп бегущей волны средней и большой мощности. - В кн. "Итоги науки и техники. Электроника. Том 17." М.: ВИНТИ, 1985. - С. 205-276.
13. Бороденко В.Г., Блейвас И.М., Галдецкий И.В. и др. Развитие теории и проектирования СВЧ электровакуумных приборов (Обзор работ "Истока") // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1995.- Вып. 1.- С. 45-47.
14. Шумы в электронных приборах / Под ред. Л.Д. Смудлина и Г.А. Хауса, пер. с англ. под ред. К.И. Палатова. - М.-Л.: Энергия, 1964, - 484 с.
15. Шаповалов А.С., Голубенцев А.Ф., Денисов Ю.И. Эмиссионные и шумовые свойства неоднородных эмиттеров / Под редакцией профессора В.М. Лопухина. - Саратов.: Издательство Саратовского университета, 1983. - 90 с.
16. Лисс В.В., Эфрос В.Я. // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1971. - Вып. 10. - С. 3-7.
17. Булыгинский Д.Г., Добрецов Л.Н. // ЖТФ. - 1956. - Т. 26, № 6. - С. 1141-1149.
18. Дружинин А.В. // Изв. АН СССР. Сер. физическая. - 1961. - Т. 25, № 6. - С. 730-734.
19. Stanier B.J., Mee C.H.V. // J. Electron. and Control. First Series. - 1964. - Vol. 16, № 5. - P. 545-553.
20. Stanier B.J., Mee C.H.V. // Internat. J. Electron. First Series. - 1965. - Vol. 18, № 5. - P. 401-404.
21. Шишкин Б.В., Спивак Г.В., Пумпурс В.М. // Изв. АН СССР. Сер. физическая. - 1968. - Т. 32, № 7. - С. 1169-1174.
22. Герман Г., Вагнер С. Оксидный катод. - М.-Л.: Гостехиздат, 1949. - 508 с.
23. Херинг К., Никольс М. Термоэлектронная эмиссия. - М.: Изд. ин. лит., 1950. - 196 с.
24. Добрецов Л.Н., Гомоюнова М.В. Эмиссионная электроника. - М.: Наука, 1966. - 564 с.
25. Мойжес Б.Я. Физические процессы в оксидном катоде. - М.: Наука, 1968. - 480 с.
26. Спивак Г.В., Дубинина Е.М., Сбитникова И.С., Прямова И.А., Виноградов Д.П. // Радиотехника и электроника. - 1958. - Т. 3, № 8. - С. 1077-1083.
27. Sandor A. // J. Electron. and Control. First Series. - 1962. - Vol. 13, № 5. - P. 401-416.
28. Richter K., Schmidtman R. // Wiss. Z. Hochschule Elektrotechn. P. menau. - 1962. - Bd. 8, №1. - S. 75-79.
29. Sandor A. // J. Electron. and Control. First Series. - 1963. - Vol. 15, № 1. - P. 3-19.
30. Sandor A. // J. Electron. and Control. First Series. - 1963. - Vol. 15, № 2. - P. 111-129.

31. Sandor A. // *Internat. J. Electron. First Series.* – 1965. – Vol. 18, № 4. – P. 349-368.
32. Jansen C.G.T., Venema A., Weekers Th.H. // *J. Appl. Phys.* – 1966. – Vol. 37, № 6. – P. 2234-2245.
33. Шишкин Б.В., Дубинина Е.М., Мичурина К.А. // *Радиотехника и электроника.* – 1965. – Т. 10, № 7. – С. 1295-1299.
34. Спивак Г.В., Шишкин Б.Б. // *Радиотехника и электроника.* – 1966. – Т. 11, № 10. – С. 1826-1831.
35. Шишкин Б.В., Дубинина Е.М., Мичурина К.А. // *Изв. АН СССР. Сер. физическая.* – 1966. – Т. 30, № 5. – С. 873-876.
36. Красинькова М.В., Мойжес Б.Я. // *ЖТФ.* – 1968. – Т. 38, № 12. – С. 2096-2100.
37. Дружинин А.В., Кондрашенков Ю.А., Некрасов В.И. // *Изв. АН СССР. Сер. Физическая.* – 1969. – Т. 33, № 5. – С. 411-420.
38. Киселёв А.В., Левитин С.М., Ходневич С.П. // *Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ.* – 1974. – Вып. 5. – С. 64-70.
39. Шмелёва Н.И., Никонов Б.П. // *Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ.* – 1977. – Вып. 60. – С. 81-86.
40. Zngang En-Qiu // *Acta Electron. Sin.* – 1985. – Vol. 13, № 5. – P. 25-31.
41. Zngang En-Qiu. // *Int. J. Electron.* – 1984. – Vol. 56, № 4. – P. 457- 465.
42. Булыгинский Д.Г., Добрецов Л.Н. // *ЖТФ.* – 1956. – Т. 26, № 5. – С. 977-984.
43. Янсен С., Лошьес Р. Распределение по скоростям электронов термоэммиттеров, работающих в импульсном режиме. Часть I. Измерительное устройство и техника измерения. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник переводов статей под ред. Л.Н. Добрецова.* – М.-Л.: Госэнергоиздат, 1957. – С. 164-175.
44. Янсен С., Лошьес Р., Компаан К. Распределение по скоростям электронов термоэммиттеров, работающих в импульсном режиме. Часть II. Экспериментальные данные и попытка теоретического объяснения. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник переводов статей под ред. Л.Н. Добрецова.* – М.-Л.: Госэнергоиздат, 1957. – С. 176-191.
45. Янсен С., Лошьес Р., Компаан К. Аномальное распределение энергий электронов, эмиттированных оксидным катодом в импульсном режиме. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник трудов международного конгресса, посвящённого пятидесятилетию открытия оксидного катода / Под ред. Б.М. Царёва.* – М.: Изд. иностр. лит., 1957. – С. 153-161.
46. Луцкий В.Н., Елинсон М.И. // *Радиотехника и электроника.* – 1963. – Т. 8, № 3. – С. 457.
47. Красинькова М.В., Мойжес Б.Я // *ЖТФ.* – 1968. – Т. 38, № 11. – С. 1975-1978.
48. Амирян Т. Аномалии в функции распределения электронов по энергии оксидного катода // XIX -я Всесоюзная конференция по эмиссионной электронике: Тезисы докладов. Секция I,II,VII. Ташкент. 1984. С.146.
49. Klemperer O. // *Proc. Roy. Soc. Series A. Mathematical and Physical Sciences.* – 1947. – Vol. 190, № 1022. – P. 376-393.
50. Moss H. A // *J. Electron. and Control. First Series.* – 1961. – Vol. 11, № 4. – P. 289-295.
51. Hartwig D., Ulmer K. // *Z. Phys.* – 1963. – Bd. 173, № 3. – 294-320.
52. Dalke W., Dlonhy F. A. // *Proc. IRE.* – 1958. – Vol. 46, № 9. – P. 1639-1645.
53. Набоков Ю.И., Авдеев В.Е. // *Изв. АН СССР. Сер. физическая.* – 1960. – Т. 33, № 3. – С. 452-457.
54. Taczanowski A., Derko H., Zbikowski A. // *Praczn. Przemysl. inst. Electron.* – 1960. – Vol. 1, № 1. P. 20-34.
55. Попов А.И., Колпаков Д.Е. // *Электронная техника. Серия 5, Приёмно-усилительные лампы.* – 1971. – Вып. 1. – С. 35-42.
56. Накаи, Инуиси, Тсунг Ше. Связь между электронной эмиссией, проводимостью и шумом оксидных катодов. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник трудов международного конгресса, посвящённого пятидесятилетию открытия оксидного катода / Под ред. Б.М. Царёва.* – М.: Изд. иностр. лит., 1957. – С. 234-242.
57. Дальбер. Шумовой фон оксидного катода. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник трудов международного конгресса, посвящённого пятидесятилетию открытия оксидного катода / Под ред. Б.М. Царёва.* – М.: Изд. иностр. лит., 1957. – С. 243-246.
58. Томменсон. Низкочастотные флуктуации проводимости оксидного катода. – В кн.: *Оксидный катод / Сборник трудов международного конгресса, посвящённого пятидесятилетию открытия оксидного катода / Под ред. Б.М. Царёва.* – М.: Изд. иностр. лит., 1957. – С. 250-256.
59. Dearnaley I. A. // *Thin Solid Films.* – 1959. – Vol. 3, № 3. – P.161-174.
60. Van Vliet K.M., Johnson R.R. // *J. Appl. Phys.* – 1964. – Vol. 35, № 7. – P. 2039-2051.
61. Амирян Р.А. // *Радиотехника и электроника.* – 1969. – Т. 14, № 11. – С. 2036-2041.
62. Клейнер Э.Ю., Амирян Р.А., Воробьёв М.Д. // *Радиотехника и электроника.* – 1969. – Т. 14, № 4. – С. 735-737.
63. Киселёв А.Б., Ходневич С.П. // *Изв. АН СССР. Сер. физическая.* – 1969. – Т. 33, № 3. – С. 458-461.
- 64 Ходневич С.П., Киселёв А.Б. // *Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ.* – 1972.- Вып. 7. - С. 23-32.
65. Воронков И.Е., Ходневич С.П. // *Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ.* – 1973.- Вып. 10. - С. 92-95.
66. Воронков И.Е., Романовский Ю.М., Ходневич С.П. // *Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ.* – 1974.- Вып. 8. - С. 66-76.



67. Киселёв А.Б., Ходневич С.П. Воронков И.Е., Турсунметов К.А. // Электронная техника. Серия 1, Электроника СВЧ. - 1975.- Вып. 6. - С. 49-58.
68. Воробьев М.Д., Клейнер Э.Ю. // ЖТФ. – 1975. – Т. 45, № 7. – С. 1482-1485.
69. Кошелев В.С., Цымбалов Г.М. //Электронная техника, серия 10. 1970. вып. 2, с. 119.
70. Цымбалов Г.М., Кошелев В.С. //Инженерно-физический журнал. 1971. Т.21, № 4. С. 307.
71. Цымбалов Г.М., Кошелев В.С. //Теплофизика высоких температур. 1972. Т.10, № 3. С. 595.
72. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Кошелев В.С. //Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1984. Вып. 6. С. 68.
73. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Кошелев В.С. //Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1985. Вып. 1. С. 70-71.
74. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Кошелев В.С. //Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1985. Вып. 3. С. 66.
75. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Смирнов А.Е., Хапланова З.И.// Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1986. Вып. 2. С. 67-70.
76. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Прохоров В.В. //Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1986. Вып. 9. С. 69.
77. Ветров В.Б., Жбанов А.И. //Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1987. Вып. 1. С. 12-16.
78. Блейвас И.М., Жбанов А.И., Прохоров В.В., Смирнов А.Е., Хапланова З.И.// Электронная техника, серия «Электроника СВЧ». 1988. Вып. 4. С. 76-77.

#### THE PROBLEMS OF THE THERMAL PROJECTION OF THE ELECTRONIC DEVICES

Koshelev V.S., Shapovalov A.S.

Saratov State University

The development and application of the electronic devices thermal projection at the applied physics department of Saratov State University is discussed.

## КАНОНИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА В ОБЩЕМ КУРСЕ ФИЗИКИ

В.А.Коноваленко, В.В.Машников, А.С.Шаповалов

Саратовский государственный университет

*Коноваленко Варвара Александровна, студентка**Машников Валерий Васильевич, к.ф.-м.н., доцент**Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор*

Рассмотрена методика применения канонического распределения Гиббса к решению некоторых классических задач молекулярной физики и термодинамики.

В статистической физике к исключительно плодотворному постулату относят каноническое распределение Гиббса. Его по праву называют фундаментальным законом статистической физики. Широкому введению этого закона в общий курс классической физики, пожалуй, препятствует недостаточная подготовка студентов младших курсов естественных факультетов по математическим дисциплинам. В то же время для ряда специальностей механико-математического факультета и факультета компьютерных наук и информационных технологий учебным планом предусматривается: «Физика: классическая механика, электродинамика, молекулярная и статистическая физика, физические основы построения ЭВМ». Курс читается в пятом, шестом и седьмом семестрах, после прохождения основных математических дисциплин, включая курс «Теории вероятностей и математической статистики». В этой связи представляется методически оправданным и перспективным использовать некоторые элементы статистического подхода к анализу состояния термодинамических систем. Успехи статистической физики и, в частности, статистической термодинамики во многих ее применениях к проблемам физики, биологии, химии - общеизвестны.

Введение канонического распределения Гиббса неразрывно связано с понятиями фазового пространства и вероятности данного микроскопического состояния системы, т. е. вероятности того, что координаты и импульсы частиц системы имеют определённые значения в фазовом пространстве.

Простейшее фазовое пространство – шестимерное. Положение каждой точки (состояние элемента ансамбля, например, молекулы вещества) определяется геометрическими координатами элемента  $x, y, z$  и его импульсами  $p_x, p_y, p_z$ . Состояние всего ансамбля определяется положением всех  $N$  точек системы.

Для краткости фазовое пространство принято называть  $\mu$  - пространством. Элементарный объём  $\mu$ -пространства —  $d\mu = dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ . Для сложных систем размерность фазового пространства  $i$  может быть больше шести. В этом случае удобно ввести обобщённые координаты и импульсы  $dq_i dp_i$ . Элемент фазового пространства тогда  $d\mu = \prod_i dq_i dp_i$  для краткости чаще всего обозначается как  $d\mu = dq_i dp_i$ .

Фазовый объём обладает свойствами, отличными от свойств геометрического объёма. Общий объём двух систем с объёмами  $V_1$  и  $V_2$ , равен  $V = V_1 + V_2$ , то есть геометрический объём обладает свойством аддитивности. Общий фазовый объём составной системы с фазовыми объёмами подсистем  $d\mu_1$  и  $d\mu_2$  равен произведению фазовых объёмов составляющих эту систему подсистем  $d\mu = d\mu_1 \cdot d\mu_2$ . Это свойство называется мультипликативностью. Это связано с увеличением размерности фазового объёма при сложении нескольких систем.

Элементы теории вероятностей вводятся в курсе молекулярной физики, поэтому обратим лишь внимание на некоторые важные свойства (плотности) функции распределения.

Точки фазового пространства, изображающие состояние элементов термодинамической системы, будут заполнять  $\mu$ -пространство с некоторой плотностью:

$$\omega(q_i, p_i) = \frac{dN}{Nd\mu} \quad (1)$$

Функция  $f(q_i, p_i)$ , дифференциал которой  $df(q_i, p_i) = \omega(q_i, p_i) dq_i dp_i$ , называется функцией распределения случайной величины по её значениям или просто функцией распределения. **Первое** свойство функции распределения вытекает из её определения и называется нормировкой:

$$\int \omega(q_i, p_i) dq_i dp_i = 1 \quad (2)$$

Этот интеграл по всему фазовому пространству определяет вероятность того, что система находится в одной из точек фазового пространства, что реализуется с вероятностью, равной единице.

**Второе** важное свойство функции распределения было доказано Лиувиллем и заключается в следующем: *плотность распределения вероятностей в фазовом пространстве  $\omega(q_i, p_i)$  зависит только от значения энергии, а не от значения обобщённых координат в отдельности (обобщённые координаты меняются во времени)*.

Это означает, что в стационарном состоянии  $\omega(q_i, p_i)$  не зависит от времени и в любой точке фазового пространства постоянна.

Математически это свойство позволяет записать равенство:

$$\frac{d\omega}{dt} = 0 = \sum_i \left( \frac{\partial \omega}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial \omega}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right) \quad (3)$$

Плотность вероятности зависит только от таких соотношений своих переменных  $(q_i, p_i)$ , которые позволяют сохранить  $\omega(q_i, p_i)$  в процессе движения

системы вдоль фазовой траектории. Такие соотношения в физике называют интегралами движения. Итак, *плотность вероятности зависит только от интегралов движения.*

**Третье** свойство это мультипликативность функции плотности распределения.

Пусть имеем некоторую термодинамическую систему, которую мысленно разделим на две подсистемы. Найдём вероятность того, что общая система находится в таком состоянии, что первая подсистема находится в заданной точке  $Z_{i1}$  в элементе своего фазового пространства  $-d\mu_1$ , а вторая - в точке  $Z_{i2}$  в элементе своего фазового пространства  $d\mu_2$ . Для случая, когда движение частиц в обеих подсистемах независимы друг от друга, можно написать эту вероятность в виде:  $\omega(z_{i1}, z_{i2})d\mu_1 d\mu_2 = \omega(z_{i1})d\mu_1 \omega(z_{i2})d\mu_2$  (4)

Здесь  $z_{in}$ -  $i$ -е координаты  $q_i, p_i$   $n$ -ой подсистемы. Соотношение (4) вытекает непосредственно из теории вероятности как правило умножения вероятностей.

Наконец, осталось сделать ещё один шаг для введения канонического распределения Гиббса – определить интегралы движения (или полную энергию системы по Лиувиллю).

В курсе механики используются несколько переменных величин в качестве обобщённых координат, комбинация которых (в соответствии с законами механики) даёт искомые интегралы движения. В классической статистической физике чаще всего используются переменные Гамильтона: обобщённые координаты и сопряжённые с ними импульсы. Функция обобщённых координат и импульсов  $H(q_1...q_n, p_1...p_n)=H(z_i)$ , имеющая смысл полной энергии системы в уравнениях движения Гамильтона имеет вид:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

$$\frac{dp_i}{dt} = - \frac{\partial H}{\partial q_i}$$

При заданных начальных значениях обобщённых координат и импульсов, решение системы уравнений (5), (6) позволяет получить скорость изменения всех обобщённых координат и импульсов и их значения в любой момент времени. Эти уравнения задают определённое движение термодинамической системы в фазовом пространстве. Наибольший интерес представляет исследование поведения плотности функции распределения вероятности, через которую не трудно найти вероятность нахождения исследуемой системы в заданном объёме фазового пространства, и, следовательно, параметры состояния системы.

**Если плотность распределения вероятностей в фазовом пространстве  $\omega(z)$  является функцией обобщённых координат и импульсов  $(z)$  не иначе, как через функцию Гамильтона, то имеет место соотношение:**

$$\omega(z) = Const \cdot \exp\left(-\frac{H(z)}{kT}\right)$$
 (7)

Это каноническое распределение Гиббса, здесь  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$ -некоторый равновесный параметр, постоянная  $Const$  находится из условия нормировки (2).

Если термодинамическая система может быть представлена несколькими подсистемами, так что Гамильтониан  $H(z)=\sum H_n(z_n)$ , то распределение Гиббса можно записать для каждой из подсистем:

$$\omega(Z_1) = C_1 \cdot \exp\left(-\frac{H_1(Z_1)}{kT_1}\right)$$
 (8)

$$\omega(Z_2) = C_2 \cdot \exp\left(-\frac{H_2(Z_2)}{kT_2}\right)$$
 и так далее.

Если системы взаимодействуют, то в равновесном состоянии  $T_1 \rightarrow T; T_2 \rightarrow T$

$$\omega(Z_{1,2}) = C \cdot \exp\left(-\frac{H_1(Z_1)+H_2(Z_2)}{kT}\right)$$
 (9)

Ниже будет показано, что  $T$  имеет смысл абсолютной температуры в равновесном состоянии.

Найдём функции Гамильтона для простых систем.

### 1. Идеальный газ.

1.1. Рассмотрим энергетическое состояние молекулы идеального газа, имеющее обобщённые координаты  $r$  и импульс  $p$ . В уравнении Гамильтона (5):

$$\frac{dr}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \rightarrow \frac{dp}{dt} = \frac{\partial H}{\partial r} = \frac{pdp}{m}$$

Интегрируя последнее равенство, находим:

$$H = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

1.2. Пусть молекула находится в поле сил тяжести:  $F = \gamma \frac{Mm}{r^2}$ . Уравнение Гамильтона

(5) для данного случая примет вид  $\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial H}{\partial r}$ .

Но первая производная от импульса по времени есть сила по второму закону Ньютона. При этом импульс молекулы идеального газа не зависит от координаты, тогда:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = F = \gamma \frac{Mm}{r^2} = - \frac{\partial H}{\partial r} \rightarrow \partial H = \gamma Mm \frac{dr}{r^2}$$

Интегрирование от  $R$  до  $r$ , где  $R$ - радиус Земли даёт:  $H(r) = \gamma Mm \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R}\right) \approx mgZ = U(Z)$

Для небольших высот от поверхности Земли  $Z=r-R$  и  $R \gg Z$  получим:  $H(r)=mgZ= U(Z)$ - потенциальной энергии молекулы в поле сил тяготения Земли для изотермической атмосферы ( $T= Const$ ).

1.3. Полагая, что идеальный газ, находящийся в силовом поле с потенциальной энергией  $U(z)$ , образует термодинамическую систему, которую можно условно разбить на две независимые подсистемы с Гамильтонианами  $H_1(p)=p^2/2m$  и  $H_2(Z)= U(Z) = mgZ$ , можно записать закон распределения плотности вероятностей в форме (8) или (9).

$$\omega(p, Z) = C \exp\left(-\frac{p^2}{2mkT} - \frac{mgZ}{kT}\right)$$
 (10)

Это распределение Максвелла-Больцмана. Полагая отсутствие силовых полей и переходя в пространство скоростей, где  $H(v)=mv^2/2$ , нетрудно получить закон распределения по модулям скоростей Максвелла в традиционной форме:

$$F(v) = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv$$

При интегрировании для нахождения постоянной  $C$  в качестве элементарного объёма пространства скоростей взят объём шарового слоя  $d\mu=4\pi v^2 dv$

2. Равновесные процессы. Температура.

Энтропия.

Пусть изолированная термодинамическая система  $A^*$  находится в состоянии с энергией  $E^*$ . Это состояние равновероятно реализуется  $G_{общ}$  способами. Разобьём условно систему  $A^*$  на две подсистемы  $A$  и  $A_1$ , таких, что гамильтонианы систем связаны соотношением:  $H^* = H + H_1$ . Положим далее, что внешние силовые поля отсутствуют и элементы подсистем не взаимодействуют между собой, но могут обмениваться энергией. Для изолированной системы  $A^*$  выполняется закон сохранения энергии: сумма энергий подсистем равна энергии сложной системы:  $E^* = E + E_1$ . Пусть число доступных состояний  $G(E)$  и  $G_1(E_1)$  подсистем  $A$  и  $A_1$  соответствует случаям, когда их энергии лежат, соответственно, в интервалах  $E, E + \delta E$  и  $E_1, E_1 + \delta E_1$ . Найдём вероятность того, что из общего числа состояний  $G_{общ}$  системы  $A^*$  часть  $G^*(E)$  соответствует состоянию подсистемы  $A$  с энергией  $E$ . По определению

$$\rho(E) = G(E) / G_{общ} = C G(E),$$

$$\rho^*(E) = \frac{G^*(E)}{G_{общ}} = C G^*(E) \tag{11}$$

то есть вероятность пропорциональна числу доступных состояний.

В то же время каждое из состояний  $G(E)$  подсистемы  $A$  с энергией  $E$  можно комбинировать с любым доступным состоянием подсистемы  $A_1$  с энергией  $E_1$ . Тогда полное число доступных состояний системы  $A^*$ , в которых энергия подсистемы  $A$  равна  $E$ , будет выражаться произведением:

$$G^*(E) = G(E) G_1(E_1) = G(E) G_1(E^* - E) \tag{12}$$

(так как произведение вероятностей пропорционально произведению числа доступных состояний). С учётом (12) соотношение (11) примет вид:

$$\rho^*(E) = C G(E) G_1(E^* - E) \tag{13}$$

Воспользуемся каноническим распределением Гиббса и связью вероятности с плотностью вероятностей

$$d\rho^*(E) = \omega^*(E) dE, \tag{14}$$

где  $\omega^*(E)$  - плотность вероятностей.

$$\begin{aligned} \omega^*(E) &= C \exp\left\{-\frac{H^*(E^*)}{kT^*}\right\} = \\ &= C \exp\left\{-\frac{E}{kT}\right\} \exp\left\{-\frac{E_1}{kT_1}\right\} \end{aligned} \tag{15}$$

Интегрируя (14), с учётом (15) и  $E_1 = E^* - E$ , получим искомую вероятность:

$$\rho^* = D \exp\left\{-E\left(\frac{1}{kT_1} - \frac{1}{kT}\right)\right\} \tag{16}$$

Здесь  $D$  - некоторый параметр, который переходит в постоянную величину в равновесном состоянии системы  $A^*$ .

Найдём условия перехода системы  $A^*$  и её подсистем в равновесное состояние.

Равновесное состояние системы характеризуется максимальной вероятностью или максимальным числом доступных состояний. Для нахождения условий равновесного перехода исследуем функцию распределения вероятностей на максимум:

$$\frac{d\rho^*(E)}{dE} = 0$$

Заметим, что производная от логарифма

вероятности по энергии  $\frac{d(\ln\rho)}{dE} = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dE}$ , равна нулю в тех же точках, что и производная от вероятности.

Так как  $D$  не зависит от энергии, то

$$\frac{d(\ln\rho^*)}{dE} = 0 = \frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_1} \tag{17}$$

Равенство (17) показывает, что равновесное состояние системы  $A^*$  наступит тогда и только тогда, когда параметры  $T$  и  $T_1$  подсистем  $A$  и  $A_1$  станут равными соответствующему параметру  $T^*$  системы  $A^*$ . Этот параметр - абсолютная температура.

Поскольку абсолютная температура всегда только положительная величина, то в процессе перехода в равновесное состояние должно выполняться условие  $T \leq T_1$ .

Введём некоторую функцию, которая могла бы указывать направление передачи энергии в равновесном процессе. Прологарифмируем (13) и приравняем нулю производную по энергии.

$$\frac{d(\ln\rho^*)}{dE} = \frac{d(\ln G(E))}{dE} - \frac{d(\ln G_1(E_1))}{dE_1} = 0 = \frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_1} \tag{18}$$

При выводе (18) учтено, что

$$\frac{dE_1}{dE} = \frac{d(E^* - E)}{dE} = (-1)$$

Выделим из соотношений (18) равенство:

$$\frac{d\{\ln G(E)\}}{dE} - \frac{d\{\ln G_1(E_1)\}}{dE_1} = \frac{1}{kT} - \frac{1}{kT_1}$$

Преобразуем последнее выражение к виду:

$$d\{\ln G(E)\} - d\{\ln G_1(E_1)\} = \frac{dE}{T} - \frac{dE_1}{T_1} \tag{19}$$

Для анализируемой термодинамической системы правая часть представляет собой разность приведённых теплот, которыми обмениваются подсистемы  $A$  и  $A_1$ . Левая часть должна быть равна по определению классической молекулярной физики разности дифференциалов энтропий этих подсистем -  $S = k \ln G$ . Это и есть статистическое определение энтропии термодинамической системы, введённое Л. Больцманом. Теперь (19) можно переписать в виде:

$$dS - dS_1 = \frac{dE}{T} - \frac{dE_1}{T_1}. \quad (20)$$

Полагая, что по-прежнему  $T_1 > T$ , в левой части тогда  $dS > dS_1$ , то есть подсистема  $A$  получает тепло, а подсистема  $A_1$  его отдаёт: в изолированной системе поток тепловой энергии направлен от подсистемы с большей температурой к подсистеме с более низкой температурой. Исходя из аддитивности энтропии,

равенство (20) позволяет утверждать, что энтропия изолированной термодинамической системы не убывает:  $d(S-S_1) \geq 0$

Последнее соотношение представляет собой формулировку второго начала термодинамики через изменение энтропии.

#### Библиографический список

1. Матвеев А.Н. Молекулярная физика. М., 1981.
2. Рейф Ф. Статистическая физика. Берклеевский курс физики. Том V. М., 1972.
3. Стратонович Р.Л., Полякова М.С. Элементы молекулярной физики, термодинамики и статистической физики. Изд. МГУ, 1981.
4. Киттель И., Введение в физику твёрдого тела., Гостехиздат, 1957.
5. Ашкрофт Н., Мермин Н., Физика твёрдого тела., Изд. « Мир», М., 1979.
6. Спроул Р., Современная физика., Изд. Физ.мат. лит., М., 1961.

### CANONICAL DISTRIBUTION OF GIBBS IN THE GENERAL COURSE OF PHYSICS

V.A.Konovalenko, V.V.Mashnikov, A.S.Shapovalov

Saratov State University

The technique of application of canonical distribution of Gibbs to the decision of some classical problems of molecular physics and thermodynamics is considered.

УДК 536.751

### КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ КАК ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ ГИББСА ДЛЯ ЗАКРЫТЫХ СИСТЕМ

А.Ф. Крылов, Г.Н. Тен

Саратовский государственный университет

Крылов Александр Фёдорович, к.ф.-м.н., доцент

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., доцент

Показана возможность введения квазиклассического приближения на основе согласования результатов расчёта свободной энергии в каноническом распределении, полученном для классических частиц в статистической механике Гиббса, с результатами экспериментальных исследований свойств одноатомных газов.

Статистическая физика традиционно рассматривает системы, состоящие из очень большого числа частиц, движение которых подчиняется законам классической или квантовой механики, что позволяет данный раздел теоретической физики излагать в два этапа – как классическую статистическую физику и как квантовую [1,2]. Одной из причин такой последовательности изложения основ статистической физики является исторический характер развития формального аппарата статистической механики, основы которой были представлены Дж. В. Гиббсом в 1901 г., т.е. задолго до появления современной квантовой теории [3]. Другим возможным способом изложения основ статистической физики является квазиклассическое приближение, позволяющее учитывать как особенности квантовых систем, так и наглядные представления классической механики [4]. Цель данной работы – показать возможность введения квазиклассического приближения на основе статистической механики Гиббса.

Каноническое распределение для закрытых систем Гиббса может быть записано как

$$d\alpha(q, p) = e^{-\frac{\psi - H(q, p)}{\theta}} dq dp.$$

При этом параметр  $\theta$  пропорционален абсолютной температуре, а  $\psi$  имеет смысл термодинамической функции состояния  $F$ , т.е. свободной энергии Гиббса-Гельмгольца, которая в общем случае рассчитывается с точностью до некоторой постоянной величины  $B$ : или  $F = \psi + B\theta$ .

Поскольку для одноатомного идеального газа свободную энергию можно вычислить по формуле  $F = -\theta \ln(V^N (2\pi m \theta)^{3N/2} + B\theta)$ , то величина давления  $p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{NkT}{V}$ . Сравнение с законом

Клапейрона-Менделеева  $pV = RT$  позволяет предположить, что константа  $B = 0$ , что и было предложено Гиббсом в своё время для классических частиц. В общем случае, как впоследствии было указано в работах Я.П. Терлецкого,  $B \neq 0$  [5].

Найдём выражение для  $B$  в случае классических частиц. Для этого рассчитаем термодинамический

потенциал Гиббса  $G=F+PV$ . Учитывая выражение для  $F$ , получим

$$G = -kTN \ln(kN) - \frac{5}{2} kTN \ln T + kTN \ln P - kTN \frac{3}{2} \ln(2\pi mk) + kTB + kTN$$

Поскольку  $(\frac{\partial G}{\partial N})_{T,P} = \frac{G}{N}$ , то  $kT \frac{\partial B}{\partial N} = kT \frac{B}{N} + kT$  или

$$\frac{dB}{dN} = \frac{B}{N} + 1.$$

Таким образом,  $B=N \ln N - Na$ , где  $a$  — постоянная, не зависящая от  $N$ . Или, используя формулу Стирлинга, получим  $B=\ln N! + Nb$ , ( $b=N - Na$ ).

Значение  $B$  может быть определено путём сопоставления вычисленных значений макропараметров системы с результатами экспериментальных исследований, полученных, например, Заккура и Тетроде [5]:

$$S = kN \ln \left[ \frac{V}{N} \left( \frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{\frac{3N}{2}} \right] + \frac{5Nk}{2}.$$

Данная формула применима для расчёта энтропии в квазиклассическом приближении. Поскольку  $S = -(\frac{\partial F}{\partial T})_V$ , то для одного моля

одноатомного газа формула Заккура-Тетроде согласуется с вычисленным значением энтропии, если  $b=h^3$ . В общем случае постоянная  $B=\ln(N!h^5)$  или  $F=\psi+\theta \ln(N!h^5)$ , где  $s$  — число механических степеней рассматриваемой системы.

Таким образом, уточнение постоянной в выражении для свободной энергии позволяет использовать каноническое распределение Гиббса для закрытых систем как для классических, так и квантовых частиц в случае квазиклассического приближения.

### Библиографический список

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч.1. М., 1976.
2. Базаров И.П., Геворкян Э.В., Николаев П.Н. Термодинамика и статистическая физика. М., 1986.
3. Гиббс Дж. В. Основные принципы статистической механики. Гостехиздат, 1946.
4. Левич В.Г. Введение в статистическую физику. М., 1954.
5. Терлецкий Я.П. Статистическая физика. М., 1994.
6. Sackur O. // Ann. Phys. 1913. V. 40. P. 67.
7. Tetrode M. // Ann. Phys. 1912. V. 38. P. 434.

### SEMICLASSICAL APPROXIMATION AS A SPECIAL CASE OF GIBBS' STATISTICAL MECHANICS FOR CLOSED SYSTEMS

A.F.Krylov, G.N.Ten  
Saratov State University

The possibility of introducing the semiclassical approximation based on matching of the results of calculation of free energy in the canonical distribution obtained for a classical particle in Gibbs' statistical mechanics with the results of experimental studies of the properties of monatomic gases.

УДК 532.533

### О ЧАСТНЫХ СЛУЧАЯХ УРАВНЕНИЯ БЕРНУЛЛИ

А.С. Шаповалов, И.А. Шаповалова

Саратовский государственный университет

*Шаповалов Александр Степанович*, д.ф.-м.н., профессор кафедры прикладной физики  
*Шаповалова Ирина Александровна*, сотрудник ОМФ НИИЕН СГУ

Обсуждается методическая возможность и целесообразность изложения в курсах общей физики различных частных случаев уравнения Бернулли. Рассмотренные частные случаи соответствуют потоку несжимаемой идеальной жидкости, изотермическому движению сжимаемого идеального газа, адиабатическому движению сжимаемого идеального газа.

Знания механики жидкости и газа необходимы при решении многих фундаментальных и прикладных задач современной техники и естествознания [1-3]. Поэтому изучению законов механики жидкости и газа в рамках курса общей физики придаётся большое значение. Одним из важнейших положений этого раздела курса является уравнение Бернулли, и его обсуждению совершенно обоснованно уделяется серьёзное внимание [4-24]. Однако, как показывает анализ многих отечественных [4-19] и зарубежных [20-24] учебных пособий по курсу общей физики, изданных в разные

годы, уравнение Бернулли в них, как правило, записывается лишь для случая стационарного движения несжимаемой сплошной среды в поле силы тяжести [4-24]. Исключение составляет лишь учебник [24], в котором указанный закон приводится в более общем виде. Однако обсуждение и примеры применения этого закона, как и в других учебных пособиях, приводятся здесь только для несжимаемой среды.

Предположение о несжимаемости жидкости на практике выполняется довольно часто, хотя в ряде задач таких, как гидравлический удар в трубах,



взрывные течения воды и др., воду нельзя считать несжимаемой даже при давлениях менее 300 атм.. Что же касается газа, то его сжимаемостью можно пренебрегать лишь при скоростях движения менее 70-80 м/с [2]. Кроме того, на практике нередко приходится рассматривать движение жидкости при наличии силовых дополнительных полей, например, поля центробежных сил инерции. В связи с этим для более полного представления о материале по этой теме представляется целесообразным введение в лекционные курсы или в тематику практических занятий, по крайней мере, для студентов физических факультетов, дополнительных сведений о виде трёхчлена Бернулли в общем и различных частных случаях. В данной работе предлагаются минимальные дополнительные сведения по этому вопросу.

Как уже говорилось, обычно уравнение Бернулли приводится для стационарного движения идеальной (отсутствуют силы внутреннего трения) несжимаемой жидкости или газа в поле силы тяжести в виде

$$p + \frac{\rho v^2}{2} + \rho gz = B = const, \quad (1)$$

где  $p$  – давление в жидкости или газе,  $\rho$  – плотность среды,  $v$  – скорость текущей жидкости или газа,  $z$  – высота расположения частиц относительно плоскости отсчёта (обычно это плоскость  $z = 0$ , в которой потенциальная энергия принимается равной нулю),  $B$  – постоянная Бернулли. Постоянная  $B$  неизменна вдоль одной и той же линии тока. При переходе к другой линии тока она может меняться.

Приведённое равенство соответствует одному из частных случаев баротропного движения среды, когда  $\rho = const$ . В общем случае баротропным называется такой процесс, при котором плотность среды зависит только от давления:  $\rho = \rho(p)$  [1,2]. Наряду с движением несжимаемой среды к баротропным процессам относятся также изотермическое и адиабатическое движение идеального газа, который является сжимаемой средой.

Для линии тока идеальной жидкости (или газа), движущейся стационарно и баротропно в поле объёмных сил трёхчлен Бернулли записывается так [1,2]:

$$\frac{v^2}{2} + P + \Pi = B = const, \quad (2)$$

где

$$P(p) = \int_{p_0}^p \frac{dp}{\rho(p)} \quad (3)$$

Здесь  $P(p)$ - функция давления [1] (функция Громеки [2]),  $p_0$ (и соответствующие  $\rho_0, v_0$ ) - значения указанных параметров, отвечающие некоторой произвольной точке линии тока,  $\Pi$  – потенциал поля объёмных сил [1] (потенциальная энергия единицы массы). Обоснование уравнения (2) имеется не только в учебных пособиях по

механике жидкости и газа для студентов старших курсов [1,2]. Простой и короткий вывод этого уравнения можно найти и в учебном пособии по курсу общей физики [24]. (Авторы пособий [1,2] называют его интегралом или теоремой Бернулли, а автор [24] - уравнением Сен-Венана.)

Уравнение (2) справедливо и для сжимаемой, и для несжимаемой среды. Если среда несжимаема, а поле объёмных сил является полем силы тяжести, то

$$P(p) = \frac{p - p_0}{\rho} = \frac{p}{\rho} + const, \quad (4)$$

$$\Pi = gz. \quad (5)$$

Подстановка (4),(5) в уравнение (2) приводит к выражению  $\frac{v^2}{2} + \frac{p}{\rho} + gz = const$ , из которого следует известное уравнение (1).

Воспользуемся уравнением (2) для анализа баротропного течения сжимаемой среды. Типичной сжимаемой средой является газ.

Рассмотрим изотермическое течение идеального газа в поле сил тяжести. Так как идеальный газ подчиняется закону Клапейрона-Менделеева, то

$$\frac{p}{\rho} = \frac{RT}{\mu} = const, \quad (6)$$

где  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – абсолютная температура,  $\mu$  – масса киломоля газа. При изотермическом процессе величина давления зависит только от плотности газа. Следовательно, рассматриваемый процесс баротропный, для которого справедливо уравнение (2). Согласно (3) для такого течения функция Громеки будет равна

$$P(p) = \frac{p_0}{\rho_0} \ln \frac{p}{p_0}, \quad (7)$$

Подстановка (5) и (7) в (2) приводит к уравнению Бернулли в виде

$$\frac{v^2}{2} + \frac{p_0}{\rho_0} \ln \frac{p}{p_0} + gz = const. \quad (8)$$

Полученный результат допускает различные формы записи. Так, например, его форму можно изменить, выразив отношение  $p/\rho_0$  через абсолютную температуру газа. Другая форма записи может быть получена путём исключения из левой части (8) постоянных  $p_0$  и  $\rho_0$ . Действительно, второе слагаемое в левой части равенства (7) можно записать так:

$$\frac{p_0}{\rho_0} \ln \frac{p}{p_0} = \frac{p_0}{\rho_0} \ln p + const. \quad (9)$$

Учитывая, что согласно (6) отношение давления идеального газа к его плотности сохраняется и

$$\frac{p_0}{\rho_0} = \frac{p}{\rho},$$

соотношение (9) можно записать в виде

$$\frac{p_0}{\rho_0} \ln \frac{p}{p_0} = \frac{p}{\rho} \ln p + const,$$

а уравнение (8) Бернулли представить следующим образом:

$$\frac{v^2}{2} + \frac{p}{\rho} \ln p + gz = const. \quad (10)$$

Аналогичным образом рассмотрим адиабатическое течение идеального газа в поле силы тяжести. Если движение идеального газа в поле силы тяжести является адиабатическим, то параметры состояния подчиняются уравнению Пуассона

$$pV^\gamma = const, \quad (11)$$

где  $V$  – объём данной массы газа,  $\gamma = c_p/c_v$  – отношение удельных теплоёмкостей газа при постоянном давлении  $c_p$  и постоянном объёме  $c_v$ . В этом случае

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \frac{p_0}{\rho_0^\gamma} = const \quad (12)$$

Из (12) следует, что этот процесс тоже является баротропным, а функция давления  $P(p)$ , рассчитанная в соответствии с (7), имеет вид

$$P(p) = -\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0}{\rho_0} \left[ 1 - \left( \frac{p}{p_0} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right]. \quad (13)$$

Подстановка (5) и (13) в уравнение (2) приводит к следующему выражению для трёхчлена Бернулли при адиабатическом движении:

$$\frac{v^2}{2} - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0}{\rho_0} \left[ 1 - \left( \frac{p}{p_0} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right] + gz = const. \quad (14)$$

В рассматриваемом случае, так же, как и в предыдущем, уравнение Бернулли (14) легко преобразовать к такому виду, когда его левая часть не будет содержать постоянных  $p_0$  и  $\rho_0$ . Действительно, второе слагаемое в левой части (14) можно записать так:

$$-\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0}{\rho_0} \left[ 1 - \left( \frac{p}{p_0} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right] = const + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0^{1/\gamma}}{\rho_0} p^{1-(1/\gamma)}. \quad (15)$$

Согласно (12)

$$\frac{p_0^{1/\gamma}}{\rho_0} = \frac{p^{1/\gamma}}{\rho}. \quad (16)$$

Следовательно, с учётом (16) выражение (15) можно представить в виде

$$-\frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p_0}{\rho_0} \left[ 1 - \left( \frac{p}{p_0} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \right] = const + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p}{\rho},$$

а уравнение (14) записать так:

$$\frac{v^2}{2} + \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{p}{\rho} + gz = const. \quad (17)$$

Таким образом, в виде (2) уравнение Бернулли справедливо и для сжимаемой, и для несжимаемой среды, а в отдельных частных случаях может быть представлено выражениями (1),(8),(10),(14),(17). Аналогичным образом можно получить выражения для закона Бернулли в различных полях объёмных сил, в частности в поле центробежных сил инерции [1].

### Библиографический список

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М., 1970.
2. Патрашев А.Н., Кивако Л.А., Гожий С.И. Прикладная гидромеханика. М., 1970.
3. Альтшуль А.Д., Животовский Л.С., Иванов Л.П. Гидравлика и аэродинамика. М., 1987.
4. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Том I. Механика. М., 1974.
5. Савельев И.В. Курс общей физики. Том I. Механика. Молекулярная физика. М., 1977.
6. Фриш С.Э. и Тиморева А.В. Курс общей физики. Том I. Физические основы механики. Молекулярная физика. Колебания и волны. М., 2007.
7. Стрелков С.П. Механика. М., 1975.
8. Хайкин С.Э. Физические основы механики. М., 1971.
9. Гершензон Е.М., Малов Н.Н. Курс общей физики. Механика. М., 1979.
10. Александров Н.В., Яшкин А.Я. Курс общей физики. Механика. М., 1978.
11. Архангельский М.М. Курс физики. Механика. М., 1975.
12. Рымкевич П.А. Курс физики. М., 1975
13. Сущинский М.М. Курс физики. Том 1. Физические основы механики. Молекулярная физика и термодинамика. М., 1973.
14. Геворкян Р.Г., Шепель В.В. Курс общей физики. М., 1972.
15. Зисман Г.А. и Тодес О.М. Курс общей физики. Том I. Механика, молекулярная физика, колебания и волны. М. 1969
16. Шубин А.С. Курс общей физики. М., 1969.
17. Поройков И.В. Краткий курс лекций по физике. М., 1965.
18. Яворский Б.М., Детлаф А.А., Милковская Л.Б., Сергеев Г.П. Курс физики. Том 1. М., 1963.
19. Путилов К.А. Курс физики. Том I. Механика. Акустика. Молекулярная физика. Термодинамика. М., 1963.
20. Serway R.A., Jewett J.W. Principles of Physics. A Calculus-Based Text. Vol. I. USA, 2002
21. Halliday D., Resnick R., Walker J. Fundamentals of Physics. USA, 1997
22. Поль Р.В. Механика, акустика и учение о теплоте. М., 1971.
23. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т.7. Физика сплошных сред. М., 1966
24. Россель Ж. Общая физика. М., 1964.



## ABOUT THE SPECIAL CASES OF BERNOULLI'S EQUATION

A.S. Shapovalov, I.A. Shapovalova

Saratov State University

The methodical possibility and expedient of exposition of the different special cases of Bernoulli's equation in the general physics courses are discussed. The examined special cases correspond to a flow of the non-compressible ideal fluid, the isothermal flow of the compressible ideal gas, the adiabatic flow of the compressible ideal gas.

УДК. 530.1; 159.9.015

## ФИЗИКА И ПСИХОЛОГИЯ В ПИСЬМАХ ФИЗИКОВ

М.А. Старшов

Саратовский государственный университет

*Старшов Михаил Александрович, доцент*

Некоторые примеры эпистолярного наследия известных физиков помогают оценить, насколько письма учёных полезны для преподавания физики, а также анализа общих проблем творческой деятельности.

*Самая прекрасная поэма - это история создания поэмы*

Мощное развитие физики за последние несколько столетий обязано своими успехами и достижениями участием в этом процессе большого числа выдающихся учёных, среди которых несомненно было несколько гениев. И это развитие шло неравномерно, порой трагически, недаром физику когда-то назвали драмой идей, а по всем этим причинам должен остаться важный и богатый след в эпистолярном общении её творцов, как с обычными людьми, так и друг с другом. Письма многих физиков разбросаны по мемуарной и биографической литературе, а попытки собрать хотя бы наиболее важные из них «под одним переплётом» пока, видимо, ещё не было. Когда-нибудь этот пробел будет заполнен, поскольку их значение для преподавания физики невозможно переоценить, многое они могут дать для психологических исследований.

На рубеже XVIII и XIX веков происходило принципиальное изменение всей структуры и содержания физики, что привело к её превращению в современную науку. И важнейшую роль сыграл в этом процессе итальянский профессор Алессандро Вольта (1745 - 1827). Свои ключевые открытия он сделал «не по правилам», в довольно зрелом возрасте, около пятидесяти лет. Сначала он просто пошёл навстречу коллегам по университету, попросившим объяснить им смысл и значение недавно опубликованных трудов другого итальянца, при том совсем не физика, а физиолога и анатома Луиджи Гальвани, работавшего в другом университете. В своей первой лекции Вольта вполне поддержал Гальвани, но уже во второй лекции через неделю выдвинул собственные идеи, опровергавшие предшественника.

Крупнейший результат, достигнутый Вольта, нашёл отражение в его письме президенту Лондонского Королевского общества Джозефу Бэнксу 20 марта 1800 года, и с этим письмом связаны этические и психологические проблемы, до того в науке, кажется, не встречавшиеся.

«После долгого молчания, в котором я и не пытаюсь оправдаться, имею удовольствие сообщить Вам, синьор, а через Ваше посредство и Королевскому обществу о некоторых поразительных результатах, полученных мною... Главный из этих результатов, содержащий в себе почти все

остальные, это создание прибора, который по своим действиям, т.е. по сотрясению, испытываемому рукой и т.п., сходен с лейденской банкой или, ещё лучше, со слабо заряженной электрической батареей, но который, однако, действует непрерывно, т.е. его заряд после каждого разряда восстанавливается сам собой; одним словом, этот прибор создаёт неуничтожаемый заряд, даёт непрерывный импульс электрическому флюиду».

По своему значению и последствиям созданное Вольта устройство можно сравнить разве что с ядерным реактором, заработавшим почти через полтора столетия.

Письмо же Вольта вызвало события как раз на границе физики, этики и психологии. Вместо немедленного представления письма учёного на заседании Королевского общества, которое в Англии заменяет академию наук, т.е. объединяет самых авторитетных учёных всех специальностей, президент общества ознакомил с его содержанием только одного человека, который в очень короткий срок не только повторил опыты Вольта, но и провёл важное, совершенно новое, исследование, разложив на составляющие обычную воду, используя придуманный Вольта источник постоянного тока. Следовательно, таким образом у Вольта был украден шанс открыть электролиз воды.

Бэнкс зачитал письмо А. Вольта только три месяца спустя, на заседании Королевского общества в июне 1800 года, тогда как появление газа из капельки воды при касании её проводниками от вольтова источника тока заметил уже 2 мая некий Никольсон, никак более историей физики не отмечаемый, даже имени его найти не удаётся. (естественно, здесь есть некоторое преувеличение. Можно узнать, что жил этот химик, физик и инженер в 1753-1815 годах, и придумал несколько измерительных приборов, носящих в Англии его имя).

Любопытно, что в письме немецкого физика Риттера своему молодому последователю Г.Х. Эрстеду в канун наступающего XIX века было высказано предсказание: в 1820 году будет сделано выдающееся научное открытие. И автором именно такого открытия стал как раз Эрстед, и событие это резко ускорило развитие науки об электричестве!

В дальнейшем развитии этой ветви физики самую заметную роль играли двое учёных совсем различного склада – Майкл Фарадей и Андре Мари Ампер. Их обширная переписка свидетельствует о том, что они всё знали о работах друг друга, но совершенно не влияли один на другого. Кажется, им было гораздо важнее высказаться перед равным соратником, чем взять что-нибудь на вооружение для самого себя. Конечно, сыграло здесь роль их различное амплуа, поскольку один был чистым теоретиком, тогда как другой – экспериментатором от природы. Психологически сближало их лишь стремление к индивидуальной работе в научном исследовании. Трудно сказать, приобрела ли от такого странного соревнования какую-то выгоду физика.

Для более достоверного представления о создании теории атома каждому физика следовало бы знать ключевое письмо Эрнеста Резерфорда его гениальному - и одному из самых любимых – ученику, датчанину Нильсу Бору, отправленное по странному совпадению тоже 20 марта, только в 1913 году. Вот что там обсуждается: «Дорогой доктор Бор! Я получил в полной сохранности Вашу работу и прочел ее с большим интересом, но мне хотелось бы еще раз тщательно просмотреть ее, когда у меня будет больше времени. Ваши мысли относительно причин возникновения спектра водорода остроумны и представляются хорошо продуманными, однако сочетание идей Планка со старой механикой создает значительные трудности для понимания того, что же все-таки является основой такого рассмотрения. Я обнаружил серьезное затруднение в связи с Вашей гипотезой, в которой Вы, без сомнения, полностью отдаете себе отчет; оно состоит в следующем: как может знать электрон, с какой частотой он должен колебаться, когда он переходит из одного стационарного состояния в другое? Мне кажется, что вы вынуждены предположить, что электрон знает заблаговременно, где он собирается остановиться».

В этом небольшом тексте заключено столько настоящей физики, что просто голова кружится! И всё-таки наиболее важным для понимания как самой идеи Бора, так и подлинного пути развития всей современной физики, представляется ОТСУТСТВИЕ в этом письме, в этой самой первой реакции крупнейшего знатока классической физики на выдвинутую совсем молодым учёным невероятную гипотезу, одного слова – этим словом «ОРБИТА» целое столетие небрежные авторы и читатели пересказов работы Н. Бора упрекают Бора, когда сами приписывают ему потихоньку допущение орбит электрона в атоме!

На самом деле Н. Бор начинает свою самую первую статью, ту самую, которую читал Э. Резерфорд, с доказательства, что движение заряженной частицы по круговой, и вообще замкнутой траектории, НЕВОЗМОЖНО по всем законам классической физики. И только потом, выдвинув свои два постулата, Бор опробовал их на планетарной МОДЕЛИ атома, к которой из точного

и красивого опыта Гейгера и Марсдена, тоже учеников и сотрудников Резерфорда, пришёл сам Резерфорд двумя годами раньше.

После этого Бор постепенно выдавливал слово орбита из своих работ и выступлений, пока, наконец, в Нобелевской лекции не обошёлся совсем без него.

И ещё более изумляет в письме Резерфорда его неспособность понять вероятностный характер внутриатомных процессов с человеческой точки зрения. Ведь именно эксперимент по рассеянию альфа-частиц на тончайших металлических плёнках, поставленный по идее Резерфорда и им же точно истолкованный ввёл, в сущности, впервые, те самые вероятностные представления! Мы же сегодня, включая источник излучения и наблюдая его спектр, имеем дело с огромным числом излучающих свет атомов. Каждый электрон не должен ничего знать заблаговременно адрес перехода из одного состояния в какое-нибудь другое, он его просто совершает, а вероятность всех таких процессов мы также просто видим по яркости всех спектральных линий.

Это очень интересно психологически, как трудно совершается переход к новым идеям в науке, в данном примере это очень явно видно, хотя несомненно справедливо и для любой другой науки.

Как это не удивительно, в истории сохранилось ещё одно письмо Нильса Бора, отправленное опять же 20 марта, на этот раз в 1933 году, в ответ на письмо Петра Леонидовича Капицы о барельефном портрете Резерфорда, только что представленном публике на новом здании Мондовской лаборатории в Кембридже. Бор пишет: «...Даже если я недостаточно компетентен, чтобы дать верную оценку в этих вопросах, то у меня достаточно опыта, чтобы понять, насколько возможно судить о произведении искусства по фотографии, не видя это произведение в его окружении. Если принять во внимание эти оговорки, то барельеф Резерфорда кажется мне превосходным, будучи одновременно глубоким по мысли и величественным... Я надеюсь, что он останется на своем месте многие годы свидетелем хорошей работы, которая, как мы все знаем, будет проводиться в Вашей новой лаборатории...».

Разве мог этот мудрый человек предвидеть, что уже на будущий год каприз великого вождя отнимет у Капицы возможность вернуться в Кембридж после отпуска в СССР, а вынужденная разлука с любимым учеником и соратником отнимет у Резерфорда несколько лет жизни... Резерфорд был единственным зарубежным учёным, с которым Капица переписывался в напряженное время строительства своего института в Москве, оставшись здесь не по своей воле, и регулярно, раз в пару месяцев, получал от него письма с подробным описанием жизни в Кембриджской лаборатории, осиротевшей без Петра Леонидовича. Последнее письмо отправлено 9 октября 1937 года, ровно за десять дней до смерти великого физика и наставника многих и многих учёных.

Любопытное совпадение хода мысли двух замечательных физиков об их отношении к физике произошло тоже в письмах. В одном из писем Альберта Эйнштейна 1924 года Макс Борну он как бы шутливо замечает, что если бы ему пришлось отказаться от строгой причинности в физике и в природе, то он «предпочёл бы стать сапожником или служащим в игорном доме, чем физиком». А весной следующего года другой выдающийся физик и будущий лауреат Нобелевской премии Вольфганг Паули в одном из писем грустно констатировал: «...физика слишком трудна для меня, и я жалею, что не сделался комиком в кино или кем-нибудь в этом роде, лишь бы никогда ничего не слышать больше о физике». До получения им Нобелевской премии оставалось два десятка лет.

Смертельная вражда двух великих учёных, Роберта Гука и Исаака Ньютона, вероятно, с одного письма и началась: в письме Ньютону в 1680 г Гук сообщает об отказе от своего предположения, высказанного шестью годами ранее, что «действие сил притяжения настолько больше, насколько ближе к центру притяжения тела, на которые они действуют».

Вместо такой зависимости Гук предполагает теперь обратную пропорциональность силы квадрату расстояния. А через несколько лет Ньютон публикует точно такой закон тяготения в своей знаменитой книге «Математические начала натуральной философии» (1686), и Гука там вообще не упоминает. Есть такая легенда, что Ньютон, став президентом Королевского общества, распорядился уничтожить все портреты Гука, и якобы по этой причине мы никогда не узнаем, как выглядел этот выдающийся человек.

Любопытное отношение к науке некоторых учёных подметил в одном из своих писем Иоганну Кеплеру великий Галилей. Построив не первую в истории науки зрительную трубу, Галилей первым догадался направить её на звёздное небо и в первый же вечер начал делать необыкновенные открытия. И вот письмо: «Когда я через мою трубу хотел показать профессорам флорентийской гимназии спутников Юпитера, то они отказались посмотреть и на них и на трубу. Эти люди думают, что истину следует искать не в природе, а в сличении текстов».

Правда, в книге Ю.А. Белого о Кеплере приводится другой вариант этого письма, или другой перевод: «Посмеёмся, мой Кеплер, великой глупости людской. Что сказать тебе о первых философях здешней гимназии, которые с каким-то упорством аспиды, несмотря на тысячекратное приглашение, не хотели даже взглянуть ни на планеты, ни на Луну, ни на телескоп. Поистине, как у того нет ушей, так и у этих глаза закрыты для света истины».

Кстати, от просьбы того же Кеплера прислать ему на время эту трубу Галилей довольно ловко увернулся, под предлогом, что лучший свой телескоп он подарил герцогу Тосканскому. Кеплер

же придумал иную принципиально трубу, как раз того типа, по которому сегодня делается подавляющее число биноклей, но реально сделать её он не сумел. А галилеевский принцип остался только в театральных биноклях.

По крайней мере однажды письмо сыграло решающую роль в споре о приоритете. На заседании Парижской Академии наук 24 декабря 1877 г доклад горного инженера Кальете о получении им жидкого кислорода был встречен бурными аплодисментами, но их остановил секретарь академии Дюма, сообщив о телеграмме из Женевы – физик Рауль Пикте сообщает о таком же достижении, сделанном 22 декабря. Выдержав театральную паузу, Дюма продолжает: «Итак, у нас есть все основания приписать господину Пикте честь первого оживления кислорода...но, господа, 3 декабря в Академию пришёл господин Сен-Клер Девиля, который получил частное письмо от своего друга, господина Кальете. В письме говорилось, что господин Кальете смог превратить кислород в жидкость и подробности этого достижения. Полагая, что письмо имеет большое научное значение, г-н Девиля просил меня заверить письмо гербовой печатью и хранить как важный документ. Вот это письмо, господа!»

Велика роль письменного общения учёных в начальный период развития современной науки, когда ещё не были придуманы научные журналы. Тогда их заменял такой самоотверженный француз Мерсенн (1588-1648), который как бы координировал исследовательскую деятельность в Европе, получая письма от одних учёных, и пересылая сообщения о них многим другим. Часто он не просто пересказывал чужие письма, но сопровождал их своими комментариями. Он помогал в издании ряда важных научных трудов, да и сам переводил их на французский язык, например, «Механику» Галилея. Благодаря такому общительному характеру Марена Мерсенна вокруг него группировались молодые учёные, которые спустя несколько лет после смерти Мерсенна образовали Парижскую академию наук. С именем Мерсенна связано одно любопытное совпадение в эпистолярном наследии выдающихся учёных – в истории сохранилось письмо Рене Декарта Мерсенну с размышлениями о финансировании научных исследований, датированное точно днём рождения Исаака Ньютона, 4 января 1643г.

Сейчас письмами обмениваются разве что очень близкие учёные, появление Интернета создало возможности совместной работы исследователей, живущих и работающих не то что в разных лабораториях, но и на разных континентах. Однако, оставшиеся письма физиков старого времени позволяют гораздо полнее ощутить вкус науки, чем позволяют сделать это любые учебники или научные статьи.

## PHYSICS AND PSYCHOLOGY IN THE PHYSICS' LETTERS

M. Starshov

Saratov State University

Some examples of epistolar legacy of the famous scientists are shown the great aids for physic education and psychological investigation.

УДК 530.1(075.8)

**О МЕТОДИКЕ И РЕЗУЛЬТАТАХ  
ПРИМЕНЕНИЯ АЭРОДИНАМИЧЕСКОГО СТЕНДА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ  
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДАВЛЕНИЯ ВДОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ ТЕЛ**

В.А. Овчинников, А.С. Шаповалов

Саратовский государственный университет

*Овчинников Вячеслав Александрович*, инженер кафедры прикладной физики*Шаповалов Александр Степанович*, д.ф.-м.н., профессор кафедры прикладной физики

Представлены методика и результаты измерения распределения давления вдоль поверхности цилиндра и крылового профиля, обтекаемых плоским потоком воздуха.

Предлагаемая работа является продолжением публикации [1], посвящённой методике и особенностям применения универсального лабораторного аэродинамического стенда ТМЖ-1м [2] в учебном процессе. Прилагаемое к стенду «Руководство к использованию в учебном процессе» является весьма кратким и предназначено для преподавателей. Как пишут авторы «Руководства» [3], «оно не имеет целью дать исчерпывающие инструкции к методике проведения занятий, но содержит лишь краткое описание постановки типовых лабораторных задач». В связи с этим в [3] отсутствует информация об ожидаемых результатах, особенностях применения стенда, ограничениях, вызванных его конструкцией, адаптации стенда к реальному учебному процессу и т.д. В данной работе подобные вопросы рассматриваются на примере выполнения лабораторной работы по измерению распределения давления вдоль поверхности тел, обдуваемых плоским потоком воздуха. В качестве исследуемых тел используются цилиндр и крыловой профиль. Это фигуры, на которых можно наглядно демонстрировать закономерности обтекания тел плоским потоком. Основой такой демонстрации и анализа физических явлений являются диаграммы распределения давления на поверхности моделей указанных фигур.

Как показали предварительные измерения, имеющийся на кафедре прикладной физики Саратовского государственного университета аэродинамический стенд ТМЖ-1м может быть использован для экспериментального исследования распределения давления вдоль поверхности круглого цилиндра и крылового профиля, обтекаемых плоским потоком воздуха. С этой целью аэродинамический стенд ТМЖ-1м оснащен специальными воздушными приемниками (модуль №5 и модуль №6).

Модуль №5 представляет собой прямоугольный канал длиной 1547 мм, сечением (20×200) мм, выполненный из оргстекла, имеющий на входе сужающее сопло с гидродинамической трубкой (зондом), которая служит для измерения скорости потока в канале. В центральной части канала помещен круглый цилиндр диаметром 30 мм и высотой, равной высоте канала, который с помощью

специального механизма поворачивается на 360°. Давления в точках поверхности цилиндра измеряются микроанометром ММН – 2400 (входит в комплект стенда) [2].

Результаты измерения распределения давления вдоль поверхности тела можно представить различными способами [3,4]. Так в [3] рекомендуется использование способа, который наиболее часто применяется в технике измерений. Для описания распределения давления вводится в рассмотрение безразмерный коэффициент давления

$\bar{P}_i$ , который определяется выражением

$$\bar{P}_i = 2 \frac{P_i - P_{нв}}{\rho v_{нв}^2}, \quad (1)$$

где  $P_i$  - давление в некоторой точке на поверхности тела (точке отбора),  $P_{нв}$  – давление в невозмущённом потоке (давление в начальном сечении канала или в точке, достаточно удалённой от места расположения исследуемой модели),  $\rho$  – плотность воздуха,  $v_{нв}$  - скорость невозмущённого потока.

Для наглядности распределение давления изображается на векторных диаграммах. На полярной диаграмме коэффициент давления изображается стрелкой, проведённой вдоль нормали к поверхности модели в точке отбора. Длина стрелки пропорциональна модулю коэффициента. Безразмерный коэффициент давления – это алгебраическая величина. Если он положителен (измеренное давление воздуха на исследуемую модель является избыточным по сравнению с давлением в невозмущённом потоке), то стрелка направлена к точке отбора. Если коэффициент давления отрицателен (измеренное давление является недостаточным по сравнению с давлением в невозмущённом потоке), он изображается стрелкой, направленной от поверхности модели.

Другим видом диаграммы коэффициента давления является диаграмма, на которой значения указанного коэффициента откладываются по перпендикуляру к хорде исследуемой модели. (Под хордой понимается отрезок, соединяющий две наиболее удалённые точки, лежащие на передней и задней кромках профиля исследуемой модели [4])

Показания используемого в работе микроманометра дают разность давлений в двух точках отбора. Поэтому, в принципе, величину числителя  $P_i - P_{нв}$  выражения (1), можно измерить непосредственным образом. Однако такой порядок измерений не совсем удобен, так как величина  $P_i - P_{нв}$  в процессе измерений может менять знак, что заставляет непрерывно отслеживать правильность подключения точек отбора к входным штуцерам микроманометра.

Более простой порядок исследований предполагает измерение разности атмосферного давления  $P_a$  и давления  $P_i$  в некоторой точке поверхности модели, обтекаемой воздушным потоком. В любой точке отбора и при любой скорости потока показания микроманометра  $P_{mi}$ , дающие разность  $P_a - P_i$ , не могут быть отрицательными, то есть  $P_{mi} = |P_{mi}|$ . Это облегчает работу с микроманометром. Величина  $P_i$  при этом определяется простым выражением

$$P_i = P_a - |P_{mi}|. \quad (2)$$

Точно так же давление  $P_{нв}$  в невозмущённой точке потока можно представить в виде разности

$$P_{нв} = P_a - |P_{мнв}|, \quad (3)$$

где  $|P_{мнв}|$  - показание (неотрицательное) микроманометра в невозмущённой точке потока. Подстановка (2) и (3) в (1) приводит к следующей связи коэффициента давления с показаниями микроманометра:

$$\bar{P}_i = 2 \frac{|P_{мнв}| - |P_{mi}|}{\rho v_{нв}^2}. \quad (4)$$

Из выражения (4) следует упрощённый метод описания распределения давления вдоль поверхности. Действительно, при заданной скорости потока величины  $|P_{мнв}|$  и  $\rho \frac{v_{нв}^2}{2}$  являются

известными константами, а величина коэффициента давления  $\bar{P}_i$  пропорциональна показанию микроманометра  $|P_{mi}|$  в соответствующей точке отбора, взятому с обратным знаком. Следовательно, распределение давления можно характеризовать с помощью полярной диаграммы, на которой длина стрелок пропорциональна величине  $|P_{mi}|$ .

Поскольку величина  $-|P_{mi}|$  вносит отрицательный вклад в коэффициент давления  $\bar{P}_i$ , стрелки должны быть направлены от соответствующей точки отбора на поверхности тела (модели). Вид такой диаграммы, естественно, будет отличаться от вида диаграммы для коэффициента давления.

Однако, учитывая то, что значения  $|P_{мнв}|$  и  $\rho v_{нв}^2/2$  известны, такая упрощённая диаграмма даёт представления о распределении давления вдоль поверхности. Тем более, что в случае необходимости на основе диаграммы для  $P_{mi}$  нетрудно построить диаграмму для коэффициента давления  $\bar{P}_i$ . Для этого достаточно к величине

$-|P_{mi}|$  прибавить величину  $|P_{мнв}|$  и разделить полученную разность на величину  $\rho v_{нв}^2/2$

Ещё одним видом упрощённой наглядной интерпретации результатов является построение полярной диаграммы для значений  $|P_{мнв}| - |P_i|$ . В этом случае изображаемая величина пропорциональна коэффициенту давления, поэтому диаграммы для  $|P_{мнв}| - |P_i|$  и для  $\bar{P}_i$  с точностью до масштабных коэффициентов совпадают. Построение таких упрощённых диаграмм будет проиллюстрировано ниже.

На рисунках 1а,б,в. показаны экспериментальные полярные диаграммы распределения давления  $P_{mi}$  на поверхности цилиндра, обтекаемого плоским воздушным потоком.

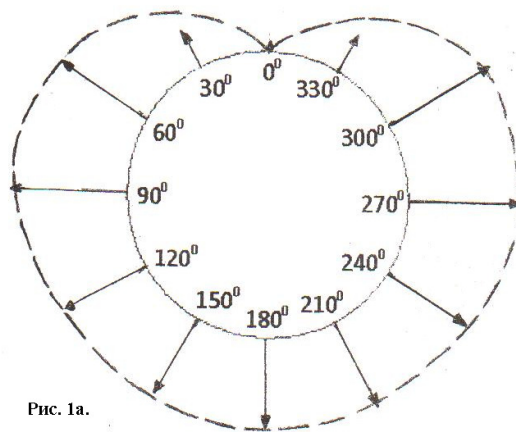


Рис. 1а.

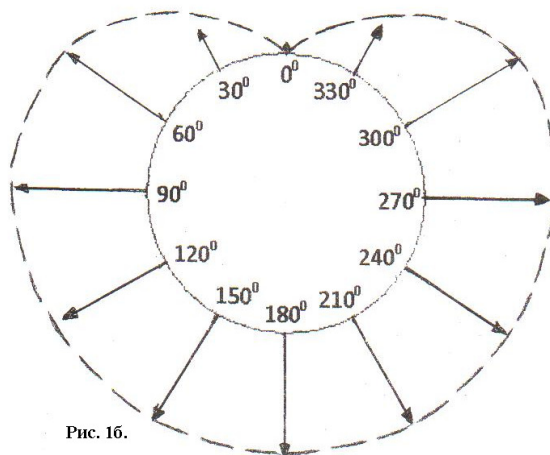


Рис. 1б.

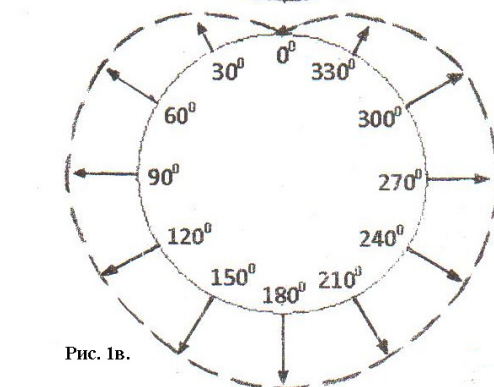


Рис. 1в.

Как говорилось выше, такие диаграммы характеризуют распределение давления в рамках упрощённой методики, но на их основе нетрудно построить соответствующие диаграммы для коэффициента давления, которые отвечают общепринятой методике представления конечных результатов. На диаграммах рис.1 значения  $|P_{mi}|$  в выбранном масштабе изображены стрелками, лежащими на соответствующих нормалях к поверхности цилиндра и направленными от поверхности. Это означает, что давление на цилиндр является недостаточным по сравнению с атмосферным. Диаграммы построены по данным измерений, проведённых при трех значениях скорости потока (рис. 1а - скорость потока 29,4 м/с, рис. 1б - скорость потока 16,1 м/с, рис.1в - скорость потока 7,2 м/с)

На диаграммах рис. 2 а, б, в в выбранном масштабе отложена разность значений  $P_i - P_{ив}$ . Как уже говорилось, эти диаграммы с точностью до масштабных коэффициентов совпадают с диаграммами для коэффициента давления. В области, где разность  $P_i - P_{ив}$  положительна (область избыточных по сравнению с  $P_{ив}$  давлений), стрелки направлены к поверхности цилиндра. В области, где разность  $P_i - P_{ив}$  отрицательна (область недостаточных по сравнению с  $P_{ив}$  давлений), стрелки направлены от поверхности цилиндра.

Приведённые на рис. 2 экспериментальные диаграммы по своему виду совпадают с аналогичными диаграммами для бесконечного (в осевом направлении) цилиндра, которые представлены в многочисленных учебных пособиях [5,6]. Это свидетельствует о достоверности полученных результатов, о возможности применения стенда для решения подобных задач, о корректности применения используемой установки для моделирования процесса обтекания бесконечного цилиндра, корректности методики измерений и обработки результатов.

Для исследования распределения давления на поверхности крылового профиля применялся модуль №6. Его конструкция идентична конструкции модуля №5, но в центральной части канала помещен крыловой профиль высотой, равной высоте канала. Как и в предыдущем случае, с помощью специального механизма профиль может поворачиваться на 360°. Измерение давлений в точках отбора на поверхности крыла проводились аналогичным способом.

На рисунке 3 приведены экспериментальные полярные диаграммы распределения давлений  $P_{mi}$  (показаний микроанометра) на поверхности крылового профиля, обтекаемого плоским потоком со скоростью 23,8 м/с. Диаграммы соответствуют упрощённой методике представления результатов исследования. Измерения распределения давления на поверхности крылового профиля проводились при «нулевом» и двух отрицательных углах атаки: «малом» ( $3^\circ - 5^\circ$ ) и «большом» ( $15^\circ - 20^\circ$ ).

Как следует из указанных диаграмм, давление на элементы крыла является недостаточным (по сравнению с атмосферным давлением). Представление результатов для положительных углов атаки, а также соответствующих полярных диаграмм для  $P_i - P_{ив}$  и  $\bar{P}_i$  планируется сделать в последующих работах.

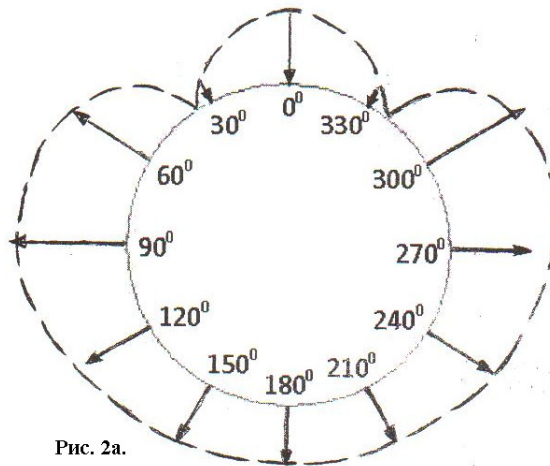


Рис. 2а.

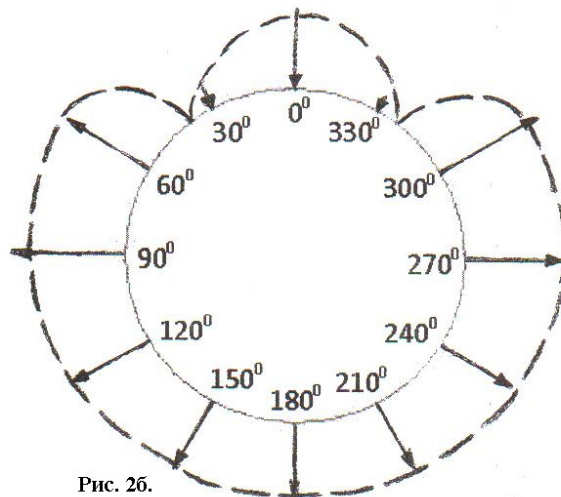


Рис. 2б.

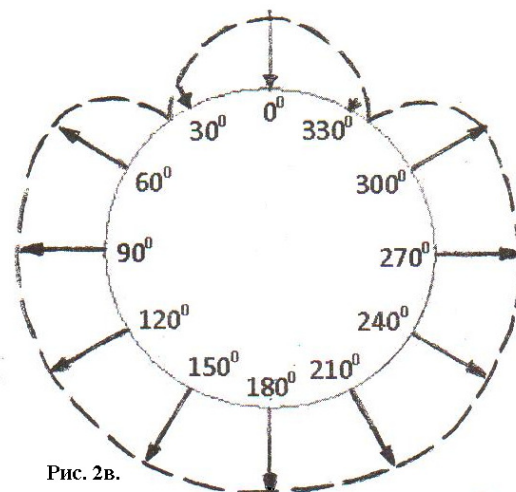
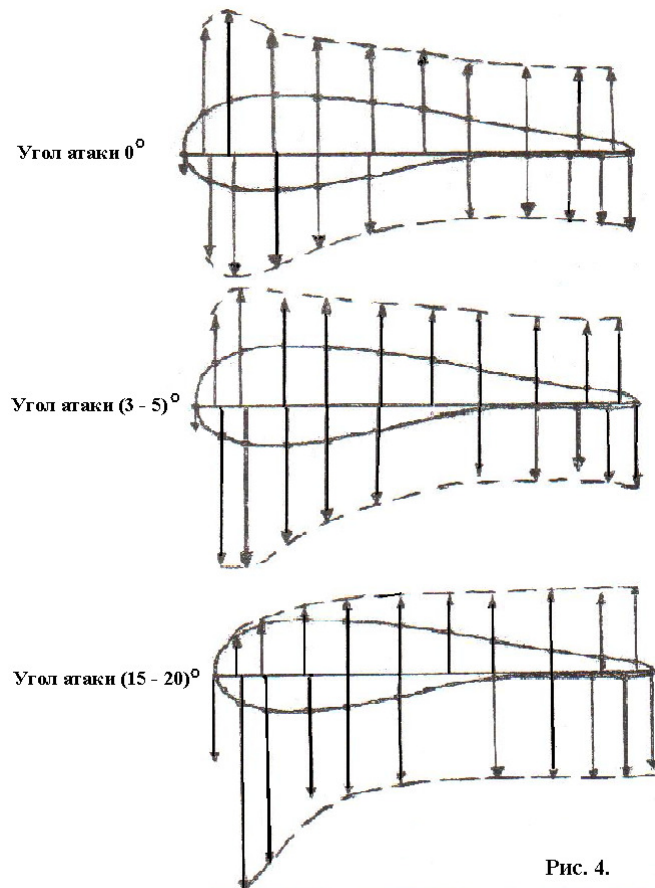
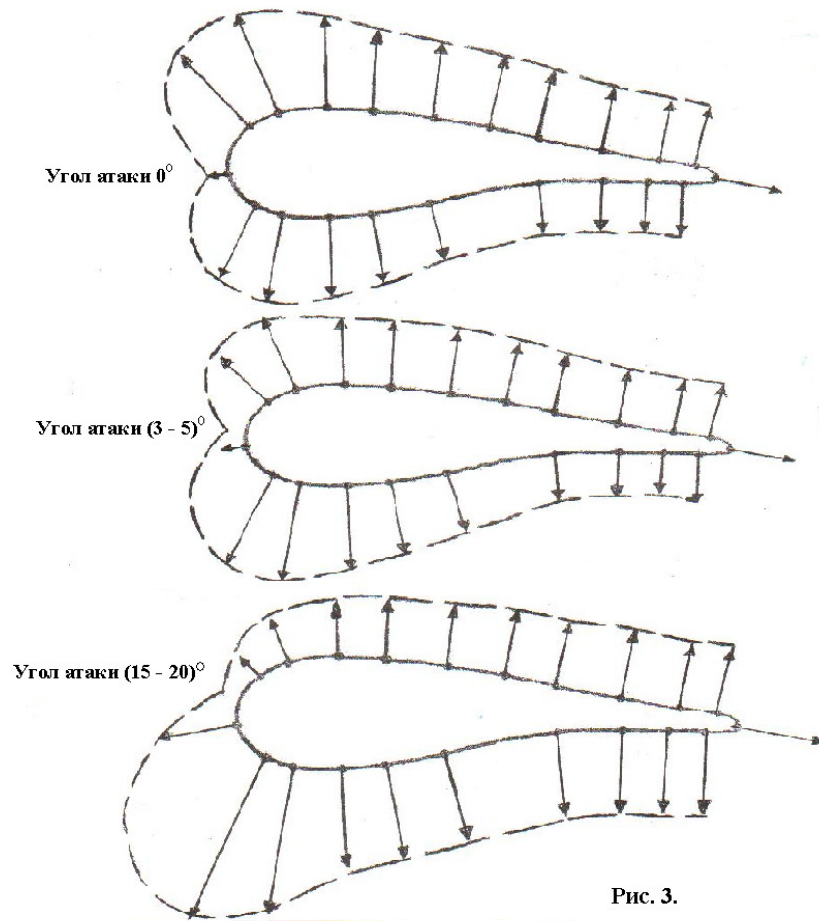


Рис. 2в.

На рисунке 4 результаты измерения представлены в виде координатной диаграммы, на которой за ось абсцисс принимается хорда профиля. Значения  $P_{mi}$  в выбранном масштабе отложены на координатных диаграммах перпендикулярно хорде профиля.





По результатам, представленным на диаграммах рис. 3 и 4, можно сделать следующие замечания об ограничениях использования модели крыла и воздушного канала. Для объективной оценки распределения давления по поверхности модели реального крыла число точек отбора в районе передней кромки профиля является недостаточным. Кроме того, характер полученного распределения давления вблизи задней кромки крыла позволяет предположить, что поперечные размеры воздушного канала недостаточно велики по сравнению с поперечным размером модели крыла. Таким образом, при корректном обсуждении и объяснении представленных результатов следует иметь в виду, что они соответствуют обтеканию воздушным потоком тела конкретного профиля (подобного профилю реального крыла) в воздушном канале ограниченных размеров.

В рамках учебного лабораторного практикума интерес представляют исследования распределения давления вдоль поверхности тел любой формы, находящихся в любых воздушных каналах. Поэтому представленные результаты представляют практический интерес, а сделанные замечания следует отнести к категории методических.

Вопрос о достоверности полученных результатов не следует смешивать (отождествлять) с вопросом о том или ином соответствии исследованной модели, находящейся в данном ограниченном воздушном канале, и реального крыла, движущегося в неограниченной воздушной среде. Последний вопрос относится к проблеме корректного моделирования реальных объектов. В рамках этой проблемы проведённая работа интересна тем, что позволяет дать определённые практические рекомендации.

Очевидно, что в комплекс лабораторных работ практикума по аэродинамике, предназначенного для сопровождения теоретического курса, должны входить лабораторные работы по исследованию обтекания тел воздушными потоками. Представленные результаты экспериментов показывают, что с учётом сделанных методических замечаний исследованные модули могут быть использованы в учебном процессе.

Авторы выражают глубокую благодарность профессору Шиндяпину Г.П. за интерес к работе и многочисленные консультации.

#### Библиографический список

1. Овчинников В.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2009. Вып. 16.
2. Стенд аэродинамический универсальный (модернизированный) ТМЖ 1М. Паспорт ТМЖ 1М ПС. Российское научно-производственное объединение «Роснаучприбор». Акционерное общество «Интос». М., 1997.
3. Емцев Б.Т., Филатов С.В. Руководство к использованию в учебном процессе универсального лабораторного аэродинамического стенда ТМЖ-1м. Российское научно-производственное объединение «Роснаучприбор». Акционерное общество «Интос». Московский энергетический институт (технический университет). М., 2001.
4. Кутин С.Н., Коробко В.И. Методическое пособие к лабораторному практикуму по аэромеханике. Саратов. Издательство Саратовского университета, 1972.
5. Хайкин С.Э. Физические основы механики. М., 1971.
6. Гершензон Е.М., Малов Н.Н. Курс общей физики. Механика. М., 1979.

#### ABOUT A METHOD AND RESULTS OF THE AERODYNAMICS RACK APPLICATION FOR MEASURING OF THE PRESSURE DISTRIBUTION ALONG THE SURFACE OF THE BODIES

V.A. Ovchinnikov, A.S. Shapovalov  
Saratov State University

It is presented the method and results of measuring of pressure distribution along the surface of cylinder and wing profile, streamlined by the flat air flow.



## ОБУЧЕНИЕ МОНОЛОГИЧЕСКОМУ ВЫСКАЗЫВАНИЮ НА АНГЛИЙСКОМ ЯЗЫКЕ ПРИ ПОМОЩИ ВЕРБАЛЬНЫХ ОПОР

И.А. Шаповалова

МОУ «СОШ №31» Кировского района г. Саратова

*Шаповалова Ирина Александровна, учитель английского языка высшей категории*

Вербальные опоры играют важную роль в обучении устному высказыванию. В статье представлены эффективные опоры, их классификация и значения.

Один из эффективных методических приёмов обучения учащихся монологическому высказыванию на иностранном языке основан на использовании так называемых вербальных опор [1]. Прежде всего, нужно определить, что это такое и какие виды опор целесообразно применять при обучении иностранным языкам.

Понятие «опора» в методике преподавания преподносится по-разному. В некоторых работах она определяется как стимул, побуждение к действию. Например, Царькова В.Б. [1] определяет функцию опор следующим образом: «вызвать ассоциации с жизненным опытом учащихся и студентов и с тем, что возможно (в силу языковой подготовленности) в их речевом опыте». Задачи опор исследователь видит в сообщении определённой информации. Опоры могут быть развёрнутыми и сжатыми. Скорее всего, информация сама по себе является лишь импульсом к размышлению, а задача преподавателя - корректно управлять возникающей в связи с услышанным или увиденным массой ассоциаций.

Часто вербальные опоры называются ориентирами речевой деятельности, которые ограничивают зоны поиска и способствуют развёртыванию мысли в определённом направлении [2].

В литературе даются и такие определения опор: «Опора - это модель программы высказывания, в которой должна быть заложена возможность вариативного использования средств её выражения на основе осознания способов выполнения речевых действий по порождению высказывания» [3]. «Опоры - это пунктирная линия, приводящая к задуманному высказыванию и носящая распределённый в соответствии с логикой предстоящего высказывания характер» [4].

Итак, приведённые определения акцентируют внимание на том, что опоры представляют собой последовательность вербальных ориентиров, которые побуждают обучаемых сконцентрировать своё внимание на существенном.

Представители различных направлений предлагают разный арсенал опор: от инициалов слов до текстов - образцов. Обычно предлагается следующая классификация опор:

1. По способу презентации материала:

**вербальные** - микротекст (визуальный, зрительный), текст (визуальный, зрительный), план (схематический, полный), слова как смысловые вехи, лозунг, поговорка, подпись;

**изобразительные** - кинофильм, диафильм, разнообразные видеоматериалы, серия рисунков, фотографий, таблица, схема, символика, плакат.

2. По способу управления речевой деятельностью: **содержательные** опоры (отвечающие на вопрос: Кто? Что? Где? Когда?) **смысловые** (отвечающие на вопрос: Зачем? Почему? и т. д.) [1].

Также большой интерес представляет собой и классификация вербальных опор, которые соотносятся с определёнными речевыми формами. К ним относятся:

1. «Структурный скелет», основой которого является логическая схема, присущая той или иной форме монолога или диалога. Эта схема определяет последовательность предложений, не подсказывая их языковое оформление. Она служит для прогнозирования содержания, плана высказывания, лексического наполнения, грамматическо-лексического оформления.

2. Логико-смысловая схема, задаваемая определённой последовательностью вопросительных слов (например: Who? When? Where?)

3. Структурная схема, которая отражает не только логическое и синтаксическое строение высказывания, но и его морфологические особенности (адресованность действия, совместность производимого действия).

4. План в виде тезисов и вопросов.

5. Опоры на зачин и концовку [5].

Все опоры описанных видов позволяют программировать речевой замысел, общее направление, а также предметное содержание и план высказывания. Они способствуют логичному построению высказывания, обеспечивают его качественную и количественную полноту.

Многие сторонники активного метода обучения используют опоры - предложения в качестве плана сообщения при отсутствии текста - образца. Они считают, что вместе с опорами необходимо предлагать учащимся и студентам разнообразные правила, ориентирующие как в лексике, так и в грамматике.

Представители структурно-функционального направления используют структурные схемы для высказывания одного предложения, а далее - логико-смысловые схемы, которые определяют композицию целого текста. Могут применяться также и алгоритмы: их цель - обучать высказыванию на основе текста, развивать умения трансформации, переработки информации и связи её с прошлым жизненным опытом [3].

Очень интересным представляется использование в качестве комбинированной опоры

коллажа. Коллаж способен привлечь внимание к объекту для рассмотрения названного объекта с различных сторон.

По форме и содержанию коллаж - это средство зрительной наглядности, представляющее собой образное, схематически фиксированное с помощью языковых и экстралингвистических средств отображение некоторой части предметного содержания, объединённого ключевым ядерным понятием. Вокруг этого ключевого понятия группируется разнообразная информация, например, названия текстов, рисунки, фотоматериалы, слова, фразы, предложения и т. д. Коллаж с помощью закодированной в нём информации направлен на возникновение у учащихся и студентов комплекса ассоциаций, связанных с тем или иным ядерным понятием. Связь между компонентами обозначается стрелками, цветом, цифрами [6].

Коллаж может представлять собой фабулу текста, ход событий, смысловую опору для пересказа. Приём коллажирования позволяет соединить вербальную, графическую и изобразительную наглядность, глубже проникнуть в тему, развивает творческое мышление, не давая готового ответа, но предлагая возможность планировать содержание высказывания самостоятельно. За счёт комбинирования различных цветов и насыщенности тона можно подчеркнуть значимость одних компонентов над другими, показать их тематические связи [7].

При всём многообразии вербальных опор они должны отвечать ряду требований, обусловленных как общедидактическими, так и методическими принципами обучения иностранным языкам.

Опоры должны быть построены с учётом параметров монологического высказывания. Эти параметры должны быть типичными для иноязычного монолога, следовательно, данным параметрам следует обучать в процессе формирования иноязычных монологических умений.

Особенно важным для построения вербальных опор является принцип доступности и наглядности. Внимание должно быть сконцентрировано на наиболее значимых компонентах будущего высказывания. Например, курсив, цветовое выделение, подчёркивание являются средствами привлечения внимания к компонентам иноязычного материала.

Вербальные опоры помогают не только организовать «поле восприятия», но и дают обучаемым свободу для собственной интерпретации ситуации в зависимости от соответствующего уровня знаний и степени владения языком.

#### Библиографический список

1. Царькова В.Б. Речевые упражнения в английском языке. М., 1980.
2. Кунин В. И. Обучение монологическому высказыванию на основе ЛСС. Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата педагогических наук. Минск. 1976.
3. Попова Э.И. Обучение монологическому высказыванию. Диссертация на соискание учёной степени кандидата педагогических наук. Ленинград. 1985.
4. Рабинович Ф.М. // Иностранные языки в школе. 1986. №5. С.35-40.
5. Нестерова Н.Б. // Иностранные языки в школе. 1982. №5. С.26-31.

Применение опор приносит и индивидуализацию учебный процесс.

Все описанные выше опоры являются опорами, которые обучаемые получают в готовом виде. Их подбирает или создаёт преподаватель. Однако, наряду с объективными опорами в процессе обучения важно стимулирование использования и субъективных опор. Это опоры, которые составляют сами учащиеся для своих высказываний. Создаётся ситуация, в которой «учащийся сам управляет семантикой своего высказывания через элементы формы» [4].

Использование опор позволяет существенно интенсифицировать как процесс обучения иностранному языку, так и процесс овладения иностранным языком. Постепенное снятие опор способствует повышению самостоятельности обучаемых в иноязычной речевой деятельности.

Обучение монологическому высказыванию предусматривает обучение и самому способу «формирования мысли» [8]. Самое главное в решении этой проблемы заключается в том, чтобы добиться автоматизма в использовании языковых средств. Особую важность приобретает постепенное формирование умений самостоятельного монологического высказывания.

Считается, что в процессе формирования любых речевых умений должно быть два этапа: подготовительного и непосредственно речевого.

На подготовительном этапе необходимо сформировать фонетические и лексико-грамматические навыки и тренировать обучаемых в составлении отдельных компонентов монологического высказывания.

Речевой этап обеспечивает формирование собственно монологических высказываний. Этот вид деятельности предполагает, что обучаемые строят самостоятельные высказывания, опираясь на модель текста - образца. В этом случае текст-образец выступает в качестве наиболее развёрнутой опоры, которая в последствии качественно меняется другими опорами. К этому времени у обучаемых должны быть сформированы внутренние опоры, обеспечивающие переход от опорного высказывания к самостоятельному. Стимулом к говорению будет мысленное содержание, которое должно стать внутренней наглядностью [9].

В заключение отметим, что на завершающей стадии формирования речевого умения «вербальным опорам не место, так как их применение здесь будет воспитывать у учащихся речевое иждивенчество, тормозить формирование качества самостоятельности и развития иноязычного умения в целом» [1].

6. Нефёдова М.А. // Иностранные языки в школе. 1993. №2. С.15-18.
7. Гречёва Н.П. // Иностранные языки в школе. 1991. №1. С.26-30.
8. Мильруд Р.П. // Иностранные языки в школе. 1985. №2. С.29-34.
9. Прокофьева В.Л. // Иностранные языки в школе. 1990. №5. С.41-45.

### TEACHING OF ORAL MONOLOGUE STATEMENTS WITH THE HELP OF VERBAL SUPPORTS

I.A.Shapovalova

Saratov secondary school №31

Verbal supports play an important role in teaching of oral statements. It is presented effective supports, their different classifications and their meanings.

УДК 530

### УРАВНЕНИЕ ТЕПЛООВОГО БАЛАНСА (или что такое теплота)

А.А. Князев

Саратовский государственный университет

*Князев Александр Александрович, доцент факультета нелинейных процессов*

Обсуждается физический смысл понятия теплоты. Утверждается, что в распространенных учебниках элементарного и общего курсов физики это понятие дано либо нечетко, либо с обращением к тавтологиям. Автор анализирует первое начало термодинамики, сопоставляя его с теоремой об изменении кинетической энергии системы. В результате утверждается, что теплота есть не что иное, как работа неконсервативных сил микроскопического движения в системе. По сути, это работа электромагнитных полей излучения атомов, составляющих тело. Приводятся примеры возможного устранения нечеткости изложения в таких темах лекционных курсов как "уравнение теплового баланса", "электродвижущая сила", "силы взаимодействия атомов и молекул" и т.п.

**Введение.** Разберем следующую задачу: имеются три тела одинаковой теплоемкости, нагретые до разных температур. Если первое тело привести в тепловой контакт со вторым телом, то устанавливается температура  $T_1$ . Если первое тело привести в с третьим телом, то устанавливается температура  $T_2$ . Если же в контакт привести второе и третье тела, то устанавливается температура  $T_3$ . Какой будет установившаяся температура при тепловом контакте всех трех тел?

**Решение:**

1. Традиционный способ, предлагаемый школой. Запишем уравнения теплового баланса для всех трех изначальных процессов:  $C \cdot (t_1 - T_1) = C \cdot (T_1 - t_2)$  и т.д. далее, для процесса контакта всех трех тел получим:

$C \cdot (t_1 - T_1) + C \cdot (t_2 - T) = C \cdot (T - t_3)$ . Решая эти системы уравнений, получаем ответ  $T = (T_1 + T_2 + T_3) / 3$ .

2. Вторым способом используют представления о первом начале термодинамики. Так, для изохорных процессов в формуле  $\Delta Q = \Delta U = C \Delta t$ , величина  $C \Delta t$  – изменение внутренней энергии системы. Значит, величина  $C \cdot t$  есть не что иное, как сама внутренняя энергия системы  $U$  (строго – в абсолютной шкале температур). В нашей задаче при контакте тел в системе не совершается изменений теплоты ( $\Delta Q = 0$ ), и ее внутренняя энергия до и после контакта сохраняется ( $\Delta U_{12} = 0$ ). Так, что для первого процесса:  $2C \cdot T_1 - (C \cdot t_1 + C \cdot t_2) = C \cdot (T - t_3)$ .

Аналогично, при контакте первого тела с третьим:  $2C \cdot T_2 - (C \cdot t_1 + C \cdot t_3) = 0$ .

При контакте второго тела с третьим:  $2C \cdot T_3 - (C \cdot t_2 + C \cdot t_3) = 0$ .

*При контакте всех трех тел:  $3C \cdot T - (C \cdot t_1 + C \cdot t_2 + C \cdot t_3) = 0$ , где  $T$  – искомая температура.*

*Сложим первые три равенства:  $t_1 + t_2 + t_3 = T_1 + T_2 + T_3$ . Подставляя это равенство в последнее из исходных уравнений, получаем тот же ответ.*

Эта задача очень похожа на известную, с которой начинают изучение понятия теплоты в младших классах – о нахождении установившейся температуры при смешивании горячей и холодной воды, то есть двух тел. Однако для преподавателя между этими двумя решениями существенная разница. Она в том, что второй способ рассуждения останется непротиворечивым и при разборе ее и в высшей школе. Тогда как первый основан на определении количества теплоты как величины  $\Delta Q = C \cdot (t_{hot} - t_{cold})$ , которое, хотя формально здесь и допустимо, но по физической сути неверно.

**1. Постановка вопроса.** В самом деле, по этой формуле количество теплоты, действительно, можно рассчитывать при определенных условиях, но это – не определение теплоты, вопреки тому, что написано во многих учебниках. Ведь, не успев еще заучить такое определение, ученики младших классов узнают, что есть, оказывается, и другие определения для теплоты:  $\Delta Q = \lambda m$  – для процесса плавления,  $\Delta Q = r m$  – для процесса парообразования и испарения, и даже  $\Delta Q = q m$  – для процесса сгорания. Далее в школе говорится о процессах теплообмена: он проходит тремя способами, причем без физического объяснения сути этих процессов, просто говоря об обмене теплотой. Впрочем, все это можно заучить – до той поры, пока в старших классах, вместе с теорией процессов в идеальных газах не приходит первое начало термодинамики, где теперь уже приводится верное соотношение:  $\Delta Q$

$= \Delta Q + \Delta A$ . Теперь, после некоторого замешательства, школьник узнает, что оказывается, все приведенные выше формулы (и другие, не написанные здесь<sup>1</sup>) относились не к количеству теплоты, а только к первому слагаемому – изменению внутренней энергии системы. А есть еще работа, производимая в системе. Но ведь изменение внутренней потенциальной энергии – это тоже работа? Естественно возникают два вопроса: первый – какой смысл имеет каждая из трех величин  $\Delta Q$ ,  $\Delta U$  и  $\Delta A$ ; второй – о какой же еще работе идет речь в величине  $\Delta A$ ? И теперь, ко времени сдачи ЕГЭ, уже ни один из выпускников не сможет толком сказать, что же такое количество теплоты (а может быть, его и не спросят).

Правда, если посмотреть многие учебники высшей школы, то ответ на этот вопрос можно не обнаружить и там. В термодинамике, науке феноменологической (основанной на четырех постулатах (началах), косвенно подтверждаемых на практике), все три величины, входящие в современную запись первого начала, признаются первично существующими, без обсуждения их физического смысла. Эти постулаты позволяют термодинамике, зародившейся еще в середине XIX века, оставаться "королевой наук" о макропроцессах – пожалуй, единственной областью современного знания, в которой эксперимент играет первичную роль<sup>2</sup>. Однако уже к концу XIX века общность этих постулатов оказалась под сомнением. Ученые начали разбираться в физической интерпретации термодинамических величин. Некоторые ответы можно найти при изучении, например, статистической физики, электродинамики, теоретической физики. Но ведь до них добирается лишь часть тех студентов, которые продолжают обучение на специальных факультетах. Тогда как в современном общем курсе физики строгого разграничения между термодинамикой и статистической физикой практически нет.

Что же пишут о теплоте учебники вполне уважаемых авторов?

"Энергия, переданная телу окружающей средой в результате теплообмена, называется количеством теплоты, или просто теплотой, полученной в таком процессе /Курсив мой – А.Князев/. Изменение

внутренней энергии тела во время теплообмена, в сущности, обусловлено также работой каких-то внешних сил. Но это не есть макроскопическая работа, связанная с изменением внешних макроскопических параметров. Она является микроскопической работой, то есть складывается из работ, производимых молекулярными силами, с которыми на молекулы и атомы тела действуют молекулы и атомы окружающей среды..."[6].

Первая фраза этого фрагмента повторяется и, например, в справочнике О.Ф. Кабардина [1], однако, здесь этот фрагмент предваряется еще одним определением: "Процесс передачи энергии от одного тела к другому без совершения работы называется *теплообменом или теплопередачей* /А.К./. Теплообмен происходит между телами, имеющими разную температуру". Это неясно – ведь изменение энергии всегда связано с работой сил. А вот силы бывают разные.

Правда, в пособии Ю.А. Селезнева [2] немного говорится о работе непотенциальных сил при производстве теплоты (стр.247...256), однако затем объяснение снова запутывается.

И далее так во многих учебниках – зачем перечислять всех (кого-то и пропустишь). Уже ясно: теплота определяется через энергию и наоборот. В некоторых (даже очень хороших) книгах авторы вообще уходят от определения теплоты, обращаясь к термодинамике, без четкого пояснения, а, по сути, с теми же, отмеченными автором тавтологиями. Как видно, все сказанное никак не проясняет сущности вопроса. Это остается незамеченным, пока не приведено в сопоставление. Однако мнение, за которым стоит крупный авторитет, часто и надолго оказывает гипнотизирующее влияние.

**2. Что такое теплота?** Давайте, однако, посмотрим, так ли уж сложен вопрос, если вернуться к первоначалам. Уже несколько лет прошло со времени выхода статьи автора "О понятии энергии..." [3]. К сожалению автор не получил в свой адрес ни одного отклика. Зато слова Лорана Антуана Лавуазье (1787 г.) подтверждаются и сейчас: "Ошибочные суждения... не затрагивают ни нашего существования, ни нашего благополучия. Никакой физической интерес не принуждает нас исправлять их; наоборот, воображение постоянно увлекает нас за пределы истины... Предположения, передаваемые из поколения в поколение, приобретают все большее значение благодаря авторитету тех, кто к ним присоединился. ...В конце концов, мы стали рассуждать не иначе как на основе приобретенных нами дурных привычек..."

В той статье (немного напомню) говорилось о понятии энергии с позиций классической динамики. С достаточно подробным выводом была приведена и теорема об изменении кинетической энергии системы. Вот сейчас нам этого будет здесь вполне достаточно. Начнем с записи теоремы об изменении кинетической энергии  $W_c$ :

$$W_{c2} + W_{c1} = A_{\text{всех сил}} = \sum A_{\text{консервативных сил}} + \sum A_{\text{диссипативных сил}}$$

<sup>1</sup> Например, формулы для изменения внутренней энергии магнетиков, диэлектриков, реальных газов.

<sup>2</sup> Что касается широко распространенного мнения о том, что опыт – критерий истины, то это верно лишь для философии так называемого джастификационизма (justify - оправдывать), доминирующего со времен Галилея и Ньютона до, примерно, середины XX-го века. С развитием безусловного отказа от наглядности в современных теориях, со времени зарождения квантовой механики и далее теории элементарных частиц, эта философия перестала быть господствующей – на смену пришла конкуренция теорий, которые непротиворечиво отвечают на большее число вопросов, в том числе и экспериментальных данных. Однако в рамках данной статьи обсуждение современной философии явно неуместно.

С учетом того, что работа консервативных сил может быть представлена разностью потенциальных энергий  $W_p$ , а работа диссипативных (неконсервативных) сил не может быть так представлена<sup>3</sup>, формула приобретает вид:

$$(W_{c2} + W_{p2}) - (W_{c1} + W_{p1}) = \sum A_{\text{диссипативных сил}}$$

или  $\Delta E = \sum A_{\text{диссипативных сил}}$

Величина  $\Delta E$  представляет сумму изменения макроскопической кинетической энергии системы и взятую с обратным знаком работу консервативных сил, например электростатических. Иными словами  $E = W_c + W_p$  – энергия системы.

Понятие диссипативных (иначе – неконсервативных) сил не ново даже для школьных курсов. "Силы трения неконсервативны" – это название подраздела в параграфе 6.11 книги "Физика. Механика", под ред. Г.Я. Мякишева [4]. Здесь прямо говорится, что "работа этих сил не связана с изменением потенциальной энергии системы... Работа сил трения зависит от формы пути и не определяется лишь начальным и конечным положениями тела". Не говорится лишь о том, что причиной сил трения являются фундаментальные силы, но неконсервативность определяется лишь некоторыми из них. К сожалению, этот термин больше не используется в этом учебнике и висит, как деревянное ружье на сцене.

Продолжим. Используя представление об атомарном строении тел, каждое из слагаемых можно разделить на макроскопические, относящиеся к телам системы в целом, и на микроскопические, описывающие внутреннее строение вещества:

$$\Delta E_{\text{макроскопич}} + \Delta E_{\text{микроскопич}} = A_{\text{диссипативн. макроскопич}} + A_{\text{диссипативн. микроскопич}}$$

Если изменения макроскопической энергии не происходит, а энергию микроскопических движений и взаимодействий назвать внутренней и обозначить как  $U$ , то запись может иметь вид:

$$\Delta U_{\text{микроскопич}} = A_{\text{диссипативн. макроскопич}} + A_{\text{диссипативн. микроскопич}}$$

Или, для бесконечно малых изменений:  $\Delta Q_{\text{микроскопич}} = \Delta U_{\text{микроскопич}} + \Delta A_{\text{системы. микроскопич}}$  где новое обозначение  $\Delta Q_{\text{микроскопич}}$  здесь заменило ту самую  $\Delta Q_{\text{диссипативн. микроскопич}}$ !

В последней записи учтены исторически общепринятые, не имеющие особой важности нюансы: вместо работы внешних диссипативных сил над системой введена работа системы против этих сил, а слагаемые в записи изменили свои места. В дальнейшем будем следовать именно этой записи, опуская пояснительные индексы:  $\Delta Q = \Delta U + \Delta A$ .

Вот, собственно, и все. Можно лишь добавить, что по необходимости в слагаемое  $\Delta A$  можно

перенести работу любых сил, даже консервативных, если это удобнее для конкретной задачи. Таким образом, если работа консервативных сил учтена в изменении внутренней энергии, то теплота есть, по сути, работа микроскопических диссипативных сил. Теперь все встает на свои места: при контакте двух тел с различными значениями средней кинетической энергии оба тела выравнивают температуры (средние кинетические энергии атомов) за счет микроскопических столкновений атомов и молекул. Если имеет место еще и перестройка атомных связей с изменением потенциальных энергий (работа консервативных сил), то могут происходить переходы из одного агрегатного состояния в другое. А вот совершение работы диссипативными силами – это и есть процесс теплообмена.

В разговорах о теплоте и теплообмене речь идет именно о диссипативных силах – это, конечно довольно тонкий момент, однако, логика здесь именно такая и попытка упростить ее только запутывает дело. Именно это опрощение и доминирует сейчас в учебниках. Достаточно понятное объяснение обязательно должно быть сформулировано, просто этим сейчас мало занимаются.

**3. Диссипативные (неконсервативные) силы.** Что же представляют собой диссипативные микроскопические силы? Из фундаментальных это в основном<sup>4</sup> электродинамические силы взаимодействия атомов, а их действие проявляется как электромагнитное излучение. Силы вихревого поля могут совершать работу по замкнутому контуру – для них не существует понятия потенциала и потенциальной энергии<sup>5</sup>. Такие поля в атомной теории управляют взаимодействием атомов при химических реакциях и фазовых превращениях<sup>6</sup> (на квантовом языке говорят о процессах обмена фотонами при энергетических переходах – то есть, по сути, о работе тех же вихревых полей при изменении внутренней энергии).

И здесь снова требуются отдельные пояснения. Они касаются непотенциальности химических сил.

<sup>4</sup> Ядерные силы, насколько это понятно автору, тоже не потенциальные, они обладают насыщением и проч.

<sup>5</sup> Впрочем, в некоторых задачах можно сконструировать функции, формально представимые полным дифференциалом даже в полях непотенциальных сил. Такие функции также принято называть потенциалами (векторный потенциал, потенциал Герца – в электродинамике, центробежный потенциал – в полуклассической теории молекул). Насколько обоснованы такие названия – вопрос дополнительного обсуждения.

<sup>6</sup> Те же, так называемые, "электродвижущие" силы в макроскопическом масштабе работают в электродвигателях двигателях и в генераторах, но там они организованы иначе, чем в химических процессах – свободные электроны движутся коллективно – создавая ток в проводнике. При этом тепловое (микроскопическое) движение сохраняется и иногда является мешающим.

<sup>3</sup> В ньютоновской механике можно обойтись без понятия потенциальной энергии, и без классификации сил. Но тогда и первые интегралы уравнения движения будут сложнее в интерпретации. Однако есть и другие механики.

Часто в учебниках просто утверждается, что в химических реакциях участвуют силы межатомного взаимодействия, имеющие комбинированную природу. Говорят, что частично эти силы имеют электростатическое происхождение (притяжение, взаимный поворот и деформация электронных оболочек молекул), а частично обязаны действию квантового эффекта (так называемые, дисперсионные силы). Школьникам и студентам толком понять что-либо из сказанного практически невозможно. Особенно, что касается квантовых сил. Между тем, квантовая механика не предлагает никаких новых фундаментальных взаимодействий в дополнение к четырем известным. Если не принимать во внимание силы ядерных взаимодействий, практически не участвующие в химии атомов и молекул (в отличие от ядерной химии), то и здесь остаются только электродинамические силы.

Как помочь преподавателю в поисках доступного объяснения для механизма взаимодействия молекул и атомов? Например, нетрудно показать на лекции или на семинаре, что сила взаимодействия двух "мягких" (деформируемых) диполей обратно пропорциональна седьмой степени расстояния между ними. По сути, это простая классическая модель объяснения силы притяжения между атомами. Другая часть силы, которая отвечает за отталкивание на малых расстояниях, обеспечивая устойчивость структуры, не имеет строгой классической модели. Между тем очевидно, что для этого необходимо привлекать неконсервативные электродинамические силы – явление самоиндукции (например, эти же эффекты действуют в явлении диамагнетизма). Для первичного представления можно представить, что орбита движения электрона вокруг ядра, помещенного во внешнее магнитное поле или в поле соседнего атома, начала покачиваться или деформироваться. В силу явления самоиндукции атом породит новое поле, направленное против внешнего, и, соответственно, отталкивающую силу. Очевидно, что это лишь качественное понимание процесса. Последовательное описание, действительно, может вестись только в квантовом представлении. Во-первых, электрон при соответствующей энергии находится в ограниченном пространстве атома, и поэтому в его движении проявляется резонансное поведение – квантование энергетических состояний [5]. Во-вторых, в микромасштабах вероятностное поведение микрочастиц проявляется доминирующим образом (в отличие от макромира, где его влияние слабо) – орбитали приходят на смену орбитам. Это очень важно, ведь классическими моделями невозможно описать, например, эффект туннелирования частиц. Но взаимодействие по-прежнему остается электромагнитным и это строго отражено в квантовом уравнении движения (Шредингера) – при записи гамильтониана.

В итоге в атомных взаимодействиях именно электродинамические силы вызывают изменения электронных конфигураций, которые управляют и механизмом химических реакций и тепловыми процессами. Так, излучение ИК-диапазона с частотами порядка  $10^9 \dots 10^{15} \text{Гц}$ , в бытовых представлениях воспринимается как поток тепла – да это и есть тепло. В классических теориях излучения черного тела, берущих начало, от Г.Кирхгофа и В.Вина уже напрямую говорилось о связи излучения со вторым началом термодинамики. А вывод закона Стефана-Больцмана с привлечением цикла Карно для излучения, есть во многих учебниках.

Работа химических сил проявляется и в гальванических элементах (э.д.с.), когда наблюдается растворение одного из электродов и доставка его ионов к другому электроду. Здесь, кроме прочего, проявляется действие закона возрастания энтропии, изменяющего состояние большого ансамбля атомов от менее вероятного к более вероятному, разрушающему систему. Так, необратимый износ электрода ограничивает срок службы элемента.

Понимание природы теплоты проясняет смысл известных способов теплообмена: кондуктивный, конвективный и лучистый – ясно, что эта терминология чисто техническая, она лишь указывает на способы расчета переноса излучения (диффузия или прямое распространение) в различных условиях. Становится понятной некорректность невнятных бытовых представлений о накоплении тепла (или холода). Теплота, как и работа макроскопических диссипативных сил (например, трения), не запасается, а совершается (производится). А вот запасается или сохраняется только кинетическая и потенциальная энергия. Теплоемкость – также явно неудачный термин, сохранившийся от представлений о теплороде<sup>7</sup>, хотя иногда еще очень удобный. Не зря же одним из самых сложных для студентов является вопрос о функциях состояния: энергия или энтропия являются функциями состояния и могут быть представлены полным дифференциалом, а количество теплоты – нет.

Возвращаясь к разобранной задаче, скажем, что, строго говоря, уравнение, которое традиционно называют уравнением теплового баланса, нужно называть, если уж так хочется, уравнением сохранения внутренней энергии замкнутой системы. Как видим, теплота здесь практически не совершается – тела обмениваются лишь кинетической энергией молекул или же в них совершается работа потенциальных сил, при

<sup>7</sup> Вот, еще один пример живучести неверных для нового времени представлений – ведь соотношения для теплорода по виду остались теми же. Так же, как соотношения Лоренца, Пуанкаре, Кауфмана в релятивизме: формальные записи остались, а каким сильным оказался эффект при правильном толковании уже известного!

агрегатных переходах и роль излучения мала. Иное дело, когда (в других задачах) включается нагреватель – теперь его излучением совершается теплота, идущая затем на изменение внутренней энергии системы или на совершение макроскопической работы (например, перемещение поршня). Так и следует говорить с самого начала знакомства с физикой. Нужно только самим привыкнуть к терминологии – это сначала не очень легко, зато потом все становится естественным, без натяжек.

Таким образом, количество теплоты и является работой неконсервативных сил при излучении. Следуя логике, термин "энергия излучения" тоже оказывается недостаточным корректным и эти вопросы иногда подмечаются студентами на лекциях. Подобно терминам "энергия магнитного, электрического поля", эти энергии определяются по работам источников, которые затрачиваются на создание поля: статического или вихревого. Для последнего понятие потенциала возможно лишь в формализме так называемого векторного потенциала. Признавая поле одной из форм материи, необходимо развить более четкую, непротиворечивую терминологию, берущую начало все-таки от механики. Тем более, когда понятия классической физики переносятся в квантовую теорию квазичастиц (фотон и др.).

**Заключение.** При последовательной политике образования часть этих неточностей и других архаизмов можно изжить за время нескольких поколений. А некоторые еще останутся, ожидая рациональной интерпретации, поскольку многие явления взаимосвязаны. Если сравнить даже те учебники начала XX-го века, через которые прошел автор, с современными учебниками, то прогресс виден. Ученикам и студентам не стало сложнее – им почти все равно, в каких терминах они начинают усваивать систему знаний, и если ее пронизывает логическая ясность, то научные знания становятся

только привлекательнее. Дело здесь лишь в неравнодушии, профессионализме и настойчивости именно преподавательского сообщества. От ученых и инженеров этих изменений ждать практически бессмысленно – они могут участвовать в обсуждении, однако вряд ли будут инициаторами. В повседневной работе ученые (особенно прикладники) чрезвычайно консервативны, привыкают к любой терминологии, к любой системе единиц измерения, и поэтому практически не заботятся о глобальной аккуратности, пока она не затрагивает конкретную область занятий каждого из них. Слэнг идет именно от профессионалов и от дилетантов. Это не мешает ни тем, ни другим, пока они находятся в своей среде. Подобно тому, как многим сейчас не мешает слабое владение нормативным русским языком – мы еще понимаем общий смысл сказанного, хотя нам уже не до эстетических нюансов речи. Диссонанс возникает при попадании этих людей в смешанную среду, когда становится необходимым понимание людьми друг друга. Подчас ученый не может даже в общих чертах объяснить суть занятий, ссылаясь на сложность или скатываясь к примитивам. А слушатели порой и не пытаются понять, доверяя авторитету и полагая, что барьером является именно сложность. Здесь проявляются и формы воспитания, и уровень образования, и глубина суждений по вопросам, не связанным с профессиональным занятием – все то, что называют уровнем культуры. Преподавателям приходится выстраивать логику знаний, как раз и формируя уровень культуры, – как для себя, так и во имя будущих поколений и будущих знаний. Очевидно, что это понимание приходит не в первый год преподавания, однако оно совершенно необходимо. Иначе, через некоторое время мы все, действительно станем рассуждать лишь "на основе приобретенных нами дурных привычек".

#### Библиографический список

1. Кабардин О.Ф.. Справочник по физике. – М.:Просвещение, 1991, стр.97.
2. Физика. Механика. / под ред. Г.Я. Мякишева. М.:Дрофа, 1996.
3. Селезнев Ю.А.. Основы элементарной физики. – М.: Наука, Гл. ред физ-мат лит-ры, 1974г.
4. Князев А.А.. О понятии энергии....// Вопросы прикладной физики. – изд. СГУ, вып.13, 2006г. с. 30-37.
5. Гольдин Л.Л., Новикова Г.И.. Введение в атомную физику. – М.:Наука. ГРФМЛ, 1969.
6. Сивухин Д.В. Общий курс физики. т.II, М.: 1990, гл.II, парагр.15.

#### HEAT BALANCE EQUATION (OR WHAT HEAT IS)

A. Knyazev  
Saratov State University

The physical meaning of the concept "heat" is discussed. It is argued that in popular textbooks of elementary and general physics courses this term is given by either ambiguously or with an appeal to tautology. The author analyzes the first law of thermodynamics, comparing it with the theorem of kinetic energy of the system. As a result, heat is stated as nothing but the work of nonconservative forces of microscopic motion in the system. In fact, this is the work of electromagnetic radiation fields of atoms that make up the body. It contains examples of possible elimination of the ambiguity in such topics of lecture courses as "heat-balance equation", "electromotive force", "atoms and molecules interaction force", etc.

**СИСТЕМА КОЭФФИЦИЕНТОВ КОЛЛЕКТИВНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ФЛУКТУАЦИЙ  
МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ**

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

Саратовский государственный университет

*Шаповалов Александр Степанович*, д.ф.-м.н., профессор кафедры прикладной физики*Машников Валерий Васильевич*, к.ф.-м.н., доцент кафедры прикладной физики

Portland State University

*Минкин Леонид Моисеевич*, профессор

Саратовское электроагрегатное производственное объединение

*Шаповалов Степан Александрович*, инженер

Определяются и систематизируются коэффициенты коллективной трансформации флуктуаций ансамбля генерирующих диодных модулей в шумы выходного сигнала многодиодного СВЧ генератора с суммирующим резонатором. Полученные выражения учитывают число диодов, свойства электродинамической системы и стратегию настройки генератора.

Особенности физического механизма преобразования собственных шумов внутренних источников флуктуаций (и, в первую очередь, диодов) в шумы выходного сигнала многодиодного генератора вызывают интерес как с теоретической, так и с практической точек зрения. В работе [1] показано, что для сравнения процессов трансформации низкочастотных (НЧ) шумов диодов в амплитудно-частотные флуктуации выходного сигнала однодиодного и многодиодного генераторов целесообразно вводить в рассмотрение коэффициенты коллективной трансформации модуляционных шумов. Они определяются как отношение спектров флуктуаций сигналов соответственно многодиодного и однодиодного генераторов и, таким образом, позволяют выяснить особенности трансформации модуляционных шумов ансамбля генерирующих модулей в шумы выходного сигнала многодиодного генератора. Это достоинство указанных коэффициентов делает их привлекательными при теоретическом анализе процесса формирования спектра выходного сигнала. В практическом отношении значимость коэффициентов коллективной трансформации определяется тем, что они, по существу, являются коэффициентами подавления или усиления шумов выходного сигнала многодиодного генератора по сравнению с шумами однодиодного.

В данной работе определяются коэффициенты коллективной трансформации СВЧ шумов ансамбля генерирующих диодных модулей в шумы выходного сигнала многодиодного генератора. По аналогии с [1] коэффициенты коллективной трансформации СВЧ шумов определяются как отношение спектральных плотностей амплитудно-частотных флуктуаций, соответствующих многодиодному и однодиодному генераторам и обусловленных СВЧ собственными шумами диодных модулей. Вся необходимая информация для определения коэффициентов коллективной трансформации СВЧ шумов содержится в работах [2-4]. Очевидно, что объединённая система коэффициентов коллективной трансформации и СВЧ, и модуляционных шумов позволяет более полно, а главное по единой методике, анализировать

и сравнивать процессы трансформации. Поэтому система коэффициентов, рассчитанных в данной работе для СВЧ шумов, дополняется рассчитанной ранее системой коэффициентов для модуляционных шумов.

Для определенности будем полагать, что основными источниками внутренних СВЧ шумов генерирующих диодных модулей являются собственные шумы их активных элементов (диодов), хотя источниками шума, естественно, являются и остальные элементы схемы. Строго говоря, в используемых ниже выражениях будут фигурировать результирующие характеристики источников шума. Как и в [1-4] будем считать, что диодные модули совершенно идентичны, а генератор, по существу, является сумматором мощности, в котором диодные модули и нагрузка связаны с общим суммирующим резонатором идеальными трансформаторами.

Ранее было показано [5], что соотношение спектров флуктуаций сигнала многодиодного и однодиодного генераторов зависит от стратегии настройки многодиодного генератора в процессе увеличения числа активных элементов. Очевидно, что объективное сравнение спектров генерируемых сигналов возможно лишь в том случае, когда процесс увеличения числа диодов генератора сопровождается его подстройкой, которая обеспечивает неизменность амплитуды СВЧ колебаний на каждом активном элементе. Это может быть достигнуто различными приемами, из которых можно выделить два принципиально отличных способа. Условно первым способом настройки генератора назовем подстройку путем изменения связи суммирующего резонатора с нагрузкой. Вторым способом будем считать настройку генератора за счет изменения связи диодных модулей с суммирующим резонатором. Другие (комбинированные) способы настройки пока рассматриваться не будут, и коэффициенты коллективной трансформации будут определяться только при двух указанных способах.



Коэффициенты коллективной трансформации амплитудных шумов СВЧ происхождения

Вначале рассчитаем коэффициенты коллективной трансформации при первом способе настройки.

Как уже было сказано выше, под коэффициентом коллективной трансформации амплитудных флуктуаций сигнала  $G_{\alpha hf}(\Omega)$ , обусловленных СВЧ шумами диодных модулей, будем понимать отношение

$$G_{\alpha hf}(\Omega) = \frac{S_{\alpha hf N}(N)}{S_{\alpha hf 1}(N)}, \quad (1)$$

где  $S_{\alpha hf N}(N)$  и  $S_{\alpha hf 1}(N)$  - спектральные плотности относительных флуктуаций амплитуды  $\alpha(t)$  сигнала, обусловленных высокочастотными ( $hf$ ) шумами диодов соответственно  $N$ -диодного и однодиодного генераторов;  $\Omega$  - круговая частота.

Вся необходимая информация об этом отношении содержится в работе [2], поэтому определение  $G_{\alpha hf}(\Omega)$  фактически сводится к введению новых обозначений. Действительно, согласно [2] при первом способе настройки спектральные плотности флуктуаций сигналов многодиодного и однодиодного генераторов определяются соотношениями

$$S_{\alpha hf N}(\Omega) = \frac{1}{N} \frac{2S_{u1}(\Omega)}{I_1^4 \left( \frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1} \right)^2} \frac{p_1^2 a^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (2)$$

$$S_{\alpha hf 1}(\Omega) = \frac{2S_{u1}(\Omega)}{I_1^4 \left( \frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1} \right)^2} \frac{p_1^2}{p_1^2 + \Omega^2}, \quad (3)$$

где  $2S_{u1}(\Omega)$  - спектральная плотность напряжения квадратурных компонент шума диода (и других внутренних источников), пересчитанная в контур суммирующего резонатора в случае однодиодного генератора (генерирующий диодный модуль связан с суммирующим резонатором идеальным трансформатором);  $I_1$  - амплитуда СВЧ тока в контуре суммирующего резонатора однодиодного генератора;  $R_{d1}$  - активное сопротивление диода, пересчитанное в контур суммирующего резонатора в однодиодном генераторе;  $p_1 = \frac{I_1}{X_1'(q_\phi + 1)} \frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1}$  - прочность

предельного цикла однодиодного генератора;  $q_\phi = X_p' / X_1'$  - параметр фиксирующей способности контура, равный отношению фиксирующей способности суммирующего резонатора  $X_p'$  к внесенной фиксирующей способности  $X_1'$  диодного модуля в однодиодном генераторе (штрих над символами означает производную по частоте);  $X_p$  - реактивная часть импеданса суммирующего резонатора,  $X_1$  - реактивная часть импеданса диодного модуля, включающая и реактивность диода и пересчитанная в контур суммирующего

резонатора в однодиодном генераторе;

$$a = N(q_\phi + 1) / (q_\phi + N) \quad [5].$$

Подстановка (2) и (3) в (1) приводит к следующему выражению для коэффициента коллективной трансформации амплитудных шумов СВЧ происхождения

$$G_{\alpha hf}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (4)$$

Информация о значениях  $G_{\alpha hf}(\Omega)$  в различных частных случаях можно получить на основе данных, приведённых в [2], однако детальный анализ полученного выражения требует проведения дополнительных исследований.

Определим коэффициент коллективной трансформации амплитудных шумов при втором способе настройки многодиодного генератора.

При указанном способе настройки прочности предельного цикла  $N$ -диодного и однодиодного генераторов совпадают, выражение для спектральной плотности амплитудного шума однодиодного генератора, по-прежнему, определяется соотношением (3), а спектральная плотность флуктуаций амплитуды сигнала многодиодного генератора принимает вид [2]

$$S_{\alpha hf N}(\Omega) = \frac{1}{N} \frac{2S_{u1}(\Omega)}{I_1^4 \left( \frac{\partial R_{d1}}{\partial I_1} \right)^2} \frac{p_1^2}{p_1^2 + \Omega^2}. \quad (5)$$

Подставляя (3) и (5) в (1), приходим к следующему выражению для коэффициента коллективной трансформации амплитудных шумов

$$G_{\alpha hf}(\Omega) = \frac{1}{N}. \quad (6)$$

Коэффициенты коллективной трансформации частотных шумов СВЧ происхождения

Определим коэффициенты коллективной трансформации частотных шумов СВЧ происхождения при первом способе настройки генератора.

В соответствии с принятым принципом коэффициент коллективной трансформации

$G_{\nu hf}(\Omega)$  частотных шумов СВЧ происхождения можно определить как отношение спектральных плотностей флуктуаций  $\nu(t)$  круговой частоты сигнала соответственно многодиодного  $S_{\nu hf N}(\Omega)$  и однодиодного  $S_{\nu hf 1}(\Omega)$  генераторов. Однако такой подход оправдывает себя лишь при втором способе настройки генератора.

При первом способе настройки выражение для  $G_{\nu hf}(\Omega)$  оказывается очень громоздким и сложным для анализа. Дело в том, что в общем случае, когда имеется корреляция квадратурных компонент собственных шумов диодов, спектральная плотность частотных флуктуаций

$S_{vhfN}(\Omega)$  содержит две составляющих: независимую от корреляции квадратурных компонент  $S_{vhfN}^{ind}(\Omega)$  и зависимую (корреляционную)  $S_{vhfN}^{cor}(\Omega)$ . Результирующее выражение для частотного спектра и указанные составляющие имеют вид [3]

$$S_{vhfN}(\Omega) = S_{vhfN}^{ind}(\Omega) + S_{vhfN}^{cor}(\Omega), \quad (7)$$

$$S_{vhfN}^{ind}(\Omega) = \frac{N}{(q_\Phi + N)^2} \frac{2S_{u1}(\Omega)}{I_1^2(X_1')^2} \times \frac{(p_1^2 + q_1^2)a^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (8)$$

$$S_{vhfN}^{cor}(\Omega) = \frac{N^2(q_\Phi + 1)}{(q_\Phi + N)^3} \frac{S_{uk1}(\Omega)}{I_1^2(X_1')^2} \times \frac{2q_1\Omega}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (9)$$

Здесь  $S_{uk1}(\Omega)$  - абсолютная величина взаимной спектральной плотности напряжения квадратурных компонент шума, пересчитанная в контур суммирующего резонатора в случае однодиодного генератора;  $q_1$  - неизохронность однодиодного генератора [3].

Соотношения (8) и (9) отличаются не только по виду, но и по смыслу. Выражение (8) описывает трансформацию собственных спектров квадратурных компонент собственных шумов диодов в шумы выходного сигнала, а выражение (9) - аналогичную трансформацию взаимных спектров квадратурных компонент. Естественно, что в таком случае для детального описания трансформации частотных флуктуаций однодиодного генератора в частотные флуктуации многодиодного целесообразно ввести два коэффициента коллективной трансформации частотных шумов.

Один из таких коэффициентов  $G_{vhf}^{ind}(\Omega)$  должен описывать трансформацию независимой (от корреляции квадратурных компонент) части спектра частотных флуктуаций  $S_{vhfN}^{ind}(\Omega)$ , а другой

$G_{vhf}^{cor}(\Omega)$  - трансформацию корреляционной компоненты спектра  $S_{vhfN}^{cor}(\Omega)$ . Очевидно, что

согласно принятому выше принципу эти коэффициенты следует определить таким образом:

$$G_{vhf}^{ind}(\Omega) = \frac{S_{vhfN}^{ind}(\Omega)}{S_{vhf1}^{ind}(\Omega)}, \quad (10)$$

$$G_{vhf}^{cor}(\Omega) = \frac{S_{vhfN}^{cor}(\Omega)}{S_{vhf1}^{cor}(\Omega)}. \quad (11)$$

Подставив в числитель выражения (10) соотношение (8) для спектральной плотности  $S_{vhfN}^{ind}(\Omega)$ , а в знаменатель - значение этой спектральной плотности при  $N=1$ , получим коэффициент трансформации независимой части спектра частотных флуктуаций сигнала

$$G_{vhf}^{ind}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 + q_1^2)a^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2} \times \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 + q_1^2 + \Omega^2}. \quad (12)$$

Аналогичным образом, подставив в числитель выражения (11) соотношение (9) для корреляционной составляющей  $S_{vhfN}^{cor}(\Omega)$

спектральной плотности, а в знаменатель - значение этой составляющей при  $N=1$ , получим коэффициент трансформации корреляционной части спектра частотных флуктуаций сигнала

$$G_{vhf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (13)$$

Значения коэффициентов трансформации  $G_{vhf}^{ind}(\Omega)$  и  $G_{vhf}^{cor}(\Omega)$  в различных частных случаях нетрудно оценить на основе результатов работы [3]. В общем же случае их детальный анализ требует постановки самостоятельной работы.

Рассмотрим коэффициенты коллективной трансформации частотных шумов при втором способе настройки многодиодного генератора.

При указанной стратегии настройки генератора спектральные плотности частотных флуктуаций многодиодного и однодиодного генераторов описываются следующими выражениями [3]

$$S_{vhfN}^{ind}(\Omega) = \frac{2S_{u1}(\Omega)}{NI_1^2(X_1')^2(q_\Phi + 1)^2} \left(1 + \frac{q_1^2}{p_1^2 + \Omega^2}\right), \quad (14)$$

$$S_{vhfN}^{cor}(\Omega) = \frac{S_{uk1}(\Omega)}{NI_1^2(X_1')^2(q_\Phi + 1)^2} \frac{2q_1\Omega}{p_1^2 + \Omega^2}. \quad (15)$$

Подстановка (14) и (15) соответственно в (10) и (11) приводит к следующим простым выражениям для коэффициентов коллективной трансформации частотных шумов СВЧ происхождения при втором способе настройки генератора:

$$G_{vhf}^{ind}(\Omega) = G_{vhf}^{cor}(\Omega) = \frac{1}{N}. \quad (16)$$

Коэффициенты коллективной трансформации взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций сигнала, вызванных СВЧ шумами.

Как и в случае частотных флуктуаций, взаимный спектр  $S_{\alpha\nu hf}(\Omega)$  амплитудно-частотных флуктуаций СВЧ происхождения, рассчитанный с учётом корреляции квадратурных компонент собственных шумов диодов, содержит две составляющих [4]. Первая составляющая (независимая) -  $S_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega)$  - не зависит от корреляции квадратурных компонент и определяется их собственными спектрами. Вторая составляющая (корреляционная) -  $S_{\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega)$  -

зависит от корреляции квадратурных компонент шума и определяется их взаимным спектром. Корреляционная составляющая имеет комплексный характер. В результате полное выражение для  $S_{\alpha\nu hf}(\Omega)$  представляется суммой трёх слагаемых

$$S_{\alpha\nu hf}(\Omega) = S_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) + \text{Re} S_{\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) + j \text{Im} S_{\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega). \quad (17)$$

Таким образом, для детального анализа процесса трансформации взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций целесообразно введение трёх коэффициентов

$$G_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) = \frac{S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega)}{S_{\alpha\nu hf1}^{ind}(\Omega)}, \quad (18)$$

$$G_{r\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{\text{Re} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega)}{\text{Re} S_{\alpha\nu hf1}^{cor}(\Omega)}, \quad (19)$$

$$G_{i\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{\text{Im} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega)}{\text{Im} S_{\alpha\nu hf1}^{cor}(\Omega)}, \quad (20)$$

которые характеризуют трансформацию соответственно независимой составляющей, действительной части корреляционной составляющей и мнимой части корреляционной составляющей взаимного спектра

Найдём коэффициенты коллективной трансформации взаимных спектров амплитудно-частотных флуктуаций при первом способе настройки генератора. Для этого воспользуемся выражениями для  $S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega)$ ,

$\text{Re} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega)$ , и  $\text{Im} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega)$ , полученными в [4],

$$S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega) = -2 \frac{N^2 (q_\Phi + 1) q_1 S_{u1}(\Omega)}{(q_\Phi + N)^3 I_1^2(X_1')^2} \times \frac{1}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (21)$$

$$\text{Re} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega) = -\frac{N}{(q_\Phi + N)^2} \frac{S_{uk1}(\Omega)}{I_1^2(X_1')^2} \times \frac{\Omega}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (22)$$

$$\text{Im} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega) = -\frac{N^2 (q_\Phi + 1) S_{uk1}(\Omega)}{(q_\Phi + N)^3 I_1^2(X_1')^2} \times \frac{p_1}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (23)$$

Подставляя в числитель выражения (18) соотношение (21) для  $S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega)$  для произвольного  $N$ , а в знаменатель - значение  $S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega)$  при  $N=1$ , нетрудно получить коэффициент трансформации независимой составляющей взаимного спектра

$$G_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (24)$$

Аналогичная подстановка в выражение (19) соотношения (22) при произвольном  $N$  и  $N=1$  даёт коэффициент трансформации действительной части корреляционной составляющей взаимного спектра

$$G_{r\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (25)$$

Наконец, подставляя в (20) отношение величин  $\text{Im} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega)$  и  $\text{Im} S_{\alpha\nu hf1}^{cor}(\Omega)$ , описываемых выражением (23), получаем коэффициент трансформации мнимой части корреляционной составляющей взаимного спектра

$$G_{i\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}. \quad (26)$$

Для расчёта коэффициентов трансформации взаимного спектра при втором способе настройки генератора воспользуемся выражениями для составляющих этого спектра, рассчитанных в [4] при указанной стратегии настройки,

$$S_{\alpha\nu hfN}^{ind}(\Omega) = -\frac{2q_1 S_{u1}(\Omega)}{N(q_\Phi + 1)^2 I_1^2(X_1')^2 (p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (27)$$

$$\text{Re} S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega) = -\frac{\Omega S_{uk1}(\Omega)}{N(q_\Phi + 1)^2 I_1^2(X_1')^2 (p_1^2 + \Omega^2)}, \quad (28)$$

$$\text{Im}S_{\alpha\nu hfN}^{cor}(\Omega) = -\frac{p_1 S_{uk1}(\Omega)}{N(q_\phi + 1)^2 I_1^2(X_1^2)(p_1^2 + \Omega^2)}. \quad (29)$$

Подставляя в (18)-(20) выражения (27)-(29) при произвольном  $N$  и при  $N=1$ , нетрудно убедиться, что в этом случае все три коэффициента одинаковы и равны

$$G_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) = G_{r\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = G_{i\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{1}{N}. \quad (30)$$

Система коэффициентов трансформации и их сравнение

Проведём последовательно сравнение коэффициентов коллективной трансформации спектров флуктуаций СВЧ происхождения, модуляционного происхождения и полную систему указанных коэффициентов.

Система, характеризующая трансформацию шумов СВЧ происхождения, содержит шесть коэффициентов. При втором способе настройки генератора, как следует из выражений (6),(16),(30), все шесть коэффициентов трансформации одинаковы и равны  $1/N$ .

При первом способе настройки из шести коэффициентов, которые определяются выражениями (4),(12),(13),(24),(25),(26) и характеризуют трансформацию собственных и взаимных спектров флуктуаций СВЧ происхождения, отличаются друг от друга только три. Таким образом, результаты их расчёта можно представить в виде следующей таблицы:

$$G_{\alpha hf}(\Omega) = G_{r\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2},$$

$$G_{\nu hf}^{ind}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 + q_1^2)a^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2} \times \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 + q_1^2 + \Omega^2},$$

$$G_{\nu hf}^{cor}(\Omega) = G_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) = G_{i\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}.$$

Для возможности сравнения коэффициентов трансформации спектров флуктуаций СВЧ и НЧ происхождения рассмотрим систему коэффициентов трансформации спектров флуктуаций модуляционного происхождения, рассчитанную в [1].

Указанная система состоит из четырёх коэффициентов, характеризующих трансформацию спектра амплитудных флуктуаций (коэффициент  $G_{\alpha lf}(\Omega)$ ), спектра частотных флуктуаций (коэффициент  $G_{\nu lf}(\Omega)$ ), действительной части взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций (коэффициент  $G_{r\alpha\nu lf}(\Omega)$ ), мнимой

части взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций (коэффициент  $G_{i\alpha\nu lf}(\Omega)$ ). Индексы  $lf$  означают низкочастотное происхождение флуктуаций.

При втором способе настройки генератора все четыре коэффициента одинаковы и равны  $1/N$ .

Многодиодный генератор характеризуется единым коэффициентом коллективной трансформации флуктуаций.

При первом способе настройки генератора отличными друг от друга являются только три коэффициента, и система коэффициентов имеет вид

$$G_{\alpha lf}(\Omega) = G_{i\alpha\nu lf}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2},$$

$$G_{\nu lf}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 a^2 + b^2 \Omega^2)(p_1^2 + \Omega^2)}{(p_1^2 + b^2 \Omega^2)(p_1^2 a^2 + \Omega^2)},$$

$$G_{r\alpha\nu lf}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}.$$

Здесь  $b = 1 + q_1 \frac{K_{\alpha m1}}{K_{\nu m1}}$ ,  $K_{\alpha m1}$  и  $K_{\nu m1}$  -

соответственно амплитудная и частотная модуляционные чувствительности однодиодного генератора

Полная система коэффициентов трансформации, характеризующая трансформацию спектров флуктуаций и СВЧ, и НЧ происхождения, состоит из десяти коэффициентов. При втором способе настройки генератора все коэффициенты одинаковы и равны  $1/N$ . При первом способе настройки они имеют иные значения. Однако их сопоставление показывает, что отличными друг от друга являются лишь четыре коэффициента. Таким образом, полная система коэффициентов трансформации имеет вид

$$G_{\alpha hf}(\Omega) = G_{\alpha lf}(\Omega) = G_{i\alpha\nu lf}(\Omega) =$$

$$= G_{r\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2},$$

$$G_{\nu hf}^{ind}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 + q_1^2)a^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2} \times$$

$$\times \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 + q_1^2 + \Omega^2},$$

$$G_{\nu lf}(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{(p_1^2 a^2 + b^2 \Omega^2)(p_1^2 + \Omega^2)}{(p_1^2 + b^2 \Omega^2)(p_1^2 a^2 + \Omega^2)},$$

$$G_{\nu hf}^{cor}(\Omega) = G_{\alpha\nu hf}^{ind}(\Omega) = G_{i\alpha\nu hf}^{cor}(\Omega) =$$

$$= G_{r\alpha\nu lf}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}.$$

Интересно также отметить, что у восьми коэффициентов ( $G_{\alpha hf}(\Omega)$ ,  $G_{\alpha lf}(\Omega)$ ,

$$G_{i\alpha v l f}(\Omega), \quad G_{r\alpha v h f}^{cor}(\Omega), \quad G_{v h f}^{cor}(\Omega),$$

$$G_{\alpha v h f}^{ind}(\Omega), \quad G_{i\alpha v h f}^{cor}(\Omega), \quad G_{r\alpha v l f}(\Omega)$$

совпадают частотно-зависимые множители. Таким образом, полная система коэффициентов

коллективной трансформации характеризуется всего лишь тремя видами частотной зависимости.

Представленная система коэффициентов позволит проводить исследование особенностей трансформации флуктуаций сигнала генерирующих диодных модулей в шумы выходного сигнала многодиодного генератора.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С., Кудряшов С.А., Шаповалов С.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2007. Вып. 14. С. 46-49.
2. Шаповалов А.С., Шаповалов С.А., Кудряшов С.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2003. Вып. 9. С. 86-88.
3. Шаповалов А.С., Кудряшов С.А., Шаповалова И.А., // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2008. Вып. 15. С. 40-43.
4. Шаповалов А.С., Минкин Л.М., Шаповалов С.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2008. Вып. 15. С. 37-40.
5. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С. // Электронная техника. Серия 1. СВЧ-техника. – 1997. Вып 2. С. 28-31.

A SYSTEM OF FACTORS OF THE COLLECTIVE TRANSFORMATION OF FLUCTUATIONS OF THE MULTIDIODE MICROWAVE GENERATOR

<sup>1</sup>A.S.Shapovalov, <sup>1</sup>V.V. Mashnikov, <sup>2</sup>L.M. Minkin, <sup>3</sup>S.A. Shapovalov

<sup>1</sup>Saratov State University,

<sup>2</sup>Portland State University, USA

<sup>3</sup>Saratov Electric Aggregate Production Firm

It is determined and systematized the factors of collective transformation of fluctuations of the generating diodes modules ensemble into noise of output signal of the multidiode microwave generator with the summing resonator. The received expressions are taken into account number of diodes, properties of the electrodynamic system and strategy of tuning of generator.

УДК 530.182::52.072.127

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ПЕРЕХОДА К ХАОСУ В АКТИВНОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ОЦЕНКИ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ МЕТРИЧЕСКОЙ ЭНТРОПИИ

А.А.Дворак

Саратовский государственный университет

Дворак Антон Александрович, студент

Методом оценки относительной метрической энтропии исследовано изменение скорости перемешивания в фазовом пространстве активной среды, демонстрирующей пространственный переход к хаосу.

На данный момент существуют различные модели распределённых систем, демонстрирующих пространственный переход к хаосу. Они представляют собой цепочки либо непрерывные среды, элементами которых являются автогенераторы. Интерес представляет изменение степени хаотичности вдоль такой среды, которое можно проследить, рассчитав энтропию в ней.

Модель непрерывной активной среды была предложена в статье [1]. В среде можно наблюдать пространственный переход к временному хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода. Её уравнения имеют вид:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = mu(x,t) + v(x,t) - u(x,t)w(x,t) + \int_0^x H(x',x)u(x',t)dx', \quad (1)$$

$$\frac{\partial v(x,t)}{\partial t} = -u(x,t),$$

$$\frac{\partial w(x,t)}{\partial t} = -gw(x,t) + gI(u(x,t))u^2(x,t).$$

Переменные  $u(x,t), v(x,t), w(x,t)$  определяют состояние в точке  $x$  в момент времени  $t$ ,  $m, g, \gamma$  – управляющие параметры, функция  $H$  определяет характер связи между элементами.

Для расчёта энтропии применялся метод, базирующийся на анализе Recurrence Plots, подробно описанный в статье [2].

Помимо распределения энтропии вдоль среды, о её динамике можно судить по следующему сечению. На плоскости  $(x, u)$  ставится точка с координатами  $(x_0, u(t_0, x_0))$ , если в данный момент времени  $v(t_0, x_0) = 0$  и  $u > 0$ . Таким образом, периодическим колебаниям будет соответствовать конечное число изолированных точек в сечении, непериодическим – множество дробной размерности.

Было произведено моделирование среды со следующими параметрами:  $m=0,85, g=0,65, \gamma=5,2$ . Функция связи между элементами экспоненциальна:

$$H(x',x) = \exp\left(-\frac{x'}{x-x'}\right). \quad (2)$$

Полученные результаты представлены на рис. 1. Мы видим, что в той области среды, где по сечению можно визуально судить о наличии хаоса,

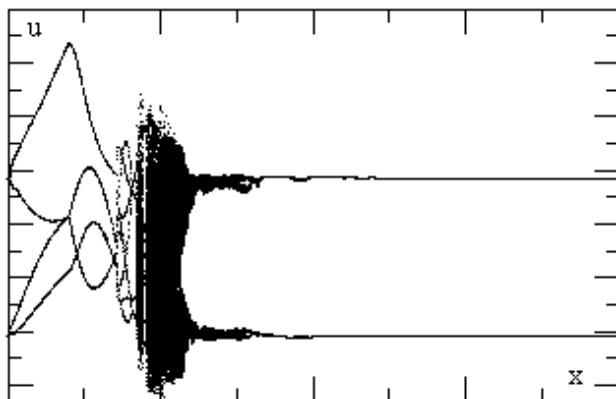


Рис. 1 а: сечение среды

относительная энтропия отлична от нуля. Сначала она быстро нарастает до максимума, а затем наблюдается более медленный спад до нуля.

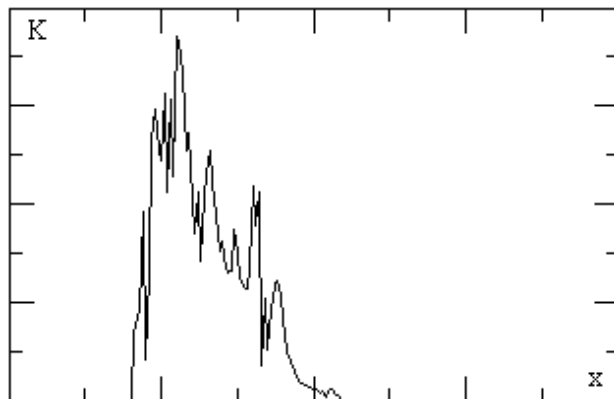


Рис. 1 б: энтропия вдоль среды

Представленные результаты позволяют сделать следующие выводы. При пространственном переходе к хаосу через каскад бифуркаций удвоения периода скорость перемешивания в фазовом пространстве среды быстро нарастает, достигая максимума, затем происходит её медленный спад до

нуля, что обусловлено затухающим характером связи.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю асп. Астахову С. В. (Саратовский государственный университет).

#### Библиографический список

1. Астахов С.В., Вадивасова Т.Е., Анищенко В.С. // Изв. вузов ПНД. 2008. Т. 16. № 2. С. 122.
2. Анищенко В.С., Астахов С.В. // Письма в ЖТФ, 2007, том 33, вып. 21.
3. Faure Ph., Korn H. // Physica D. 1998. V. 122. P. 265.
4. Thiel M., Romano M.C., Kurts J. // Izv. VUZ. AND. 2003. V. 11. N 3.

#### ANALYSIS OF THE SPATIAL TRANSITION TO CHAOS IN THE ACTIVE MEDIUM USING THE RELATIVE METRIC ENTROPY APPROACH

A.Dvorak

Saratov State University

The rate of the topological mixing in the active medium, demonstrating the spatial transition to chaos, has been carried out using the relative metric entropy approach.

Жюри студенческой научной конференции физического факультета Саратовского государственного университета отметило данную работу среди лучших и рекомендовало к опубликованию.

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕЖДУ МУЛЬТИСТАБИЛЬНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ПОД ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ**

А.В.Шабунин, А.Н.Литвиненко

Саратовский государственный университет

Шабунин Алексей Владимирович, д.ф.-м. н., профессор

Литвиненко Артем Николаевич, студент

Разработан новый метод управления мультистабильностью при помощи внешнего бифазного гармонического воздействия. Представлены результаты экспериментального тестирования метода на примере связанных генераторов Чуа.

В системе двух симметрично связанных идентичных осцилляторов, каждый из которых при изменении управляющих параметров демонстрирует переход к хаосу через последовательность бифуркаций удвоения периода, при фиксированных значениях ее параметров может наблюдаться сосуществование двух или нескольких режимов функционирования. Такое явление получило название мультистабильности. При фазовой мультистабильности форма колебаний в каждой из подсистем остается практически неизменной, меняется лишь величина сдвига фаз колебаний[1].

Для переключения между сосуществующими фазовыми модами мы предлагаем использовать схему, показанную на рис.1. Внешняя сила одновременно воздействует на обе подсистемы. Меня сдвиг фаз между сигналами внешнего воздействия, мы можем переключать систему между устойчивыми фазовыми модами.



Рис. 1 Схема контроллера.

Внешняя сила воздействует на частоте субгармоники, фаза которой отвечает за режим колебаний.

В качестве модельной системы были взяты связанные генераторы Чуа под внешним воздействием. Уравнения, приведенные в безразмерный вид :

$$\begin{aligned} \dot{x}_{1,2} &= \alpha(y_{1,2} - \varphi(x_{1,2})), \\ \dot{y}_{1,2} &= x_{1,2} - y_{1,2} + z_{1,2} + K(y_{2,1} - y_{1,2}), \\ \dot{z}_{1,2} &= -\beta(y_{1,2}) + A \sin(\omega t + \Delta_{1,2}), \end{aligned} \quad (1)$$

Выберем значения управляющих параметров:  $\alpha = 8,3$ ,  $\beta=14,0$ ,  $K=0,01$ . В этом случае в фазовом пространстве системы (1) сосуществуют два устойчивых предельных цикла:  $2C^0$  (рис.2б) и  $2C^1$  (рис.2а). Оба предельных цикла соответствуют колебаниям периода два и различаются сдвигом фаз между колебаниями подсистем. Режим колебаний  $2C^0$  характеризуется равенством колебаний в подсистемах. В режиме  $2C^1$  колебания в подсистемах сдвинуты на половину периода. При этом, основные гармоники во взаимном спектре

имеют нулевые фазы, а субгармоники - фазы, равные  $\pi$ . Эти различия в фазовом спектре мы можем использовать для переключения между устойчивыми режимами.

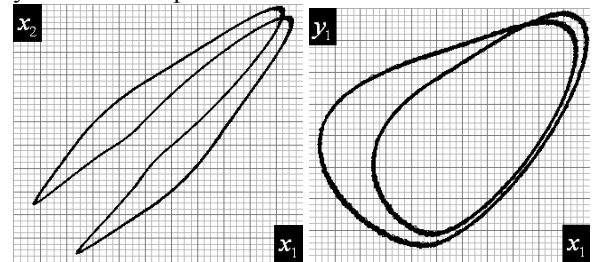


Рис. 2 а: Фазовые портреты режима  $2C^1$ .

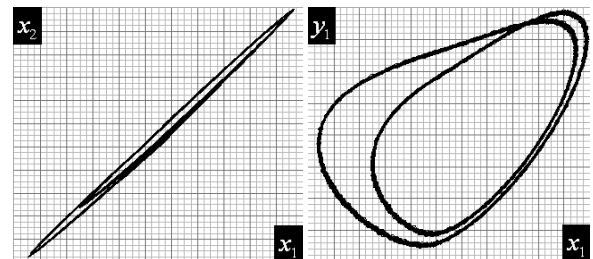


Рис. 2 б: Фазовые портреты режима  $2C^0$ .

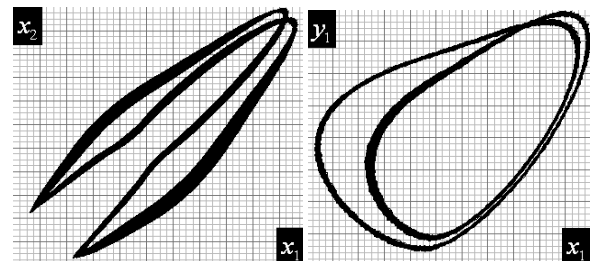


Рис. 3 а: Фазовые портреты режима  $2T^1$ .

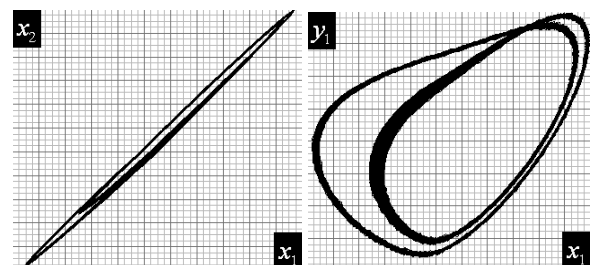


Рис. 3 б: Фазовые портреты режима  $2T^0$ .

При включении внешнего воздействия с разностью фаз в 0 на систему, функционирующую в режиме  $2C^1$ , происходит мягкое рождение тора, основанного на этом режиме(рис. 3а). При увеличении амплитуды внешнего сигнала до

некоторого порогового значения (рис. 3б) происходит переход на тор, основанный на режиме  $2C^0$ . При выключении внешнего воздействия мы остаемся на  $2C^0$ . Аналогично осуществляется переход с  $2C^0$  на  $2C^1$ .

Эксперимент показал, что эффект носит пороговый характер (рис.4). Для переключения между режимами необходимо, чтобы разность фаз внешнего воздействия соответствовала разности фаз субгармоник целевого режима.

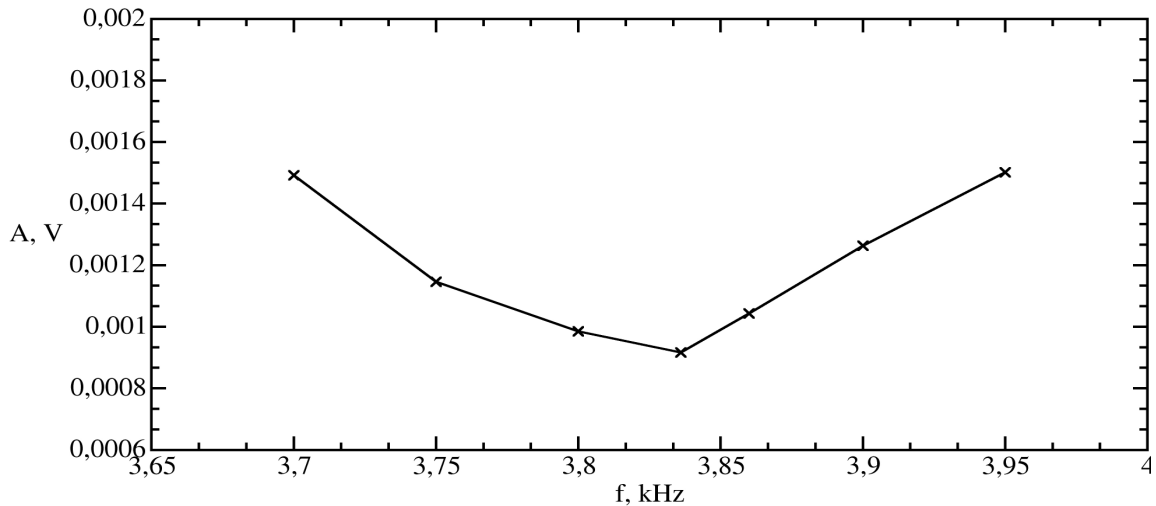


Рис. 4. Зависимость пороговых значений амплитуды внешнего сигнала, необходимой для переключения от  $2C^0$  к  $2C^1$ , от частоты.

#### Библиографический список

1. Фазовая мультистабильность и установление колебаний в нелинейных системах с удвоением периода. // Радиотехника и электроника, 1993, т. 38, N 2, стр. 291-295
2. Global bifurcation analysis of the double-scroll circuit. // Int. J. Bifurcation and Chaos, 1991, v. 1, N 1, pp. 139-182.

#### EXPERIMENTAL STUDY OF CONTROLLING MULTISTABILITY BY EXTERNAL FORCE

A.V. Shabunin, A.N. Litvinenko

Saratov State University

We have constructed a new method of multistability control by means of bi-phase harmonic influence. The results of its experimental testing are presented on the example of two coupled Chua's generators.

Жюри студенческой научной конференции физического факультета Саратовского государственного университета отметило данную работу среди лучших и рекомендовало к опубликованию.



# СПЕКТРОСКОПИЯ

УДК 543.42+547.82

## СТАБИЛЬНОСТЬ И СТРУКТУРА КОНФОРМЕРОВ ГЛИЦИНА, АЛАНИНА И ЛЕЙЦИНА В ИЗОЛИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ И ЦВИТТЕР-ИОННОЙ ФОРМЕ

Г.Н. Тен, Д.М. Кадров, В.И. Березин

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., доцент

Кадров Дмитрий Михайлович, студент

Березин Валентин Иванович, д.ф.-м.н., профессор

Выполнен расчёт и анализ структуры конформеров глицина, аланина и лейцина в изолированном состоянии и их цвиттер-ионных форм в водном растворе методом DFT. Показано, что для глицина и аланина наиболее стабильным является конформер I, а для лейцина – конформер III.

**Введение.** Несмотря на то, что со времени возникновения молекулярной биологии, как самостоятельного раздела науки, прошло несколько десятилетий, одной из её центральных задач остаётся проблема структуры белка. Сведения о строении молекул белка могут быть получены методом электронной микроскопии, рассеянием рентгеновых лучей под малыми углами, ультрацентрифугированием и т.д. [1,2]. Наиболее полное представление об атомном строении белковых молекул даёт рентгеноструктурный анализ. Например, этим методом установлено строение гемоглобина крови, миоглобина мышц, лизоцима и выполнена расшифровка структуры ряда других белков, например, рибонуклеазы, инсулина, химотрипсина, карбоксипептидазы. Следует отметить, что рентгеноструктурное исследование биологических объектов относится к числу очень сложных и трудоёмких работ.

Значительную помощь при изучении строения и функций белка оказывает знание структуры

фрагментов белковых молекул – аминокислот и пептидов в разных фазовых состояниях. Известно, что аминокислоты в жидком и твёрдом состояниях находятся в цвиттер-ионной форме, а в изолированном состоянии имеют каноническую нейтральную форму.

**Цель работы** – проанализировать структуру и стабильность конформеров изолированных аминокислот – глицина (Gly), аланина (Ala) и лейцина (Leu), а также их цвиттер-ионных форм. Расчёт выполнен методом DFT в приближении B3LYP/6-311++G(d,p) с помощью программ Gaussian-03 [3].

**Результаты и обсуждение.** Молекулярные диаграммы рассматриваемых соединений с обозначением и нумерацией атомов приведены на рис. 1. Расположения атомов в конформерах II, III и цвиттер-ионных формах Ala и Leu аналогичны расположениям атомов в соответствующих конформерах Gly.

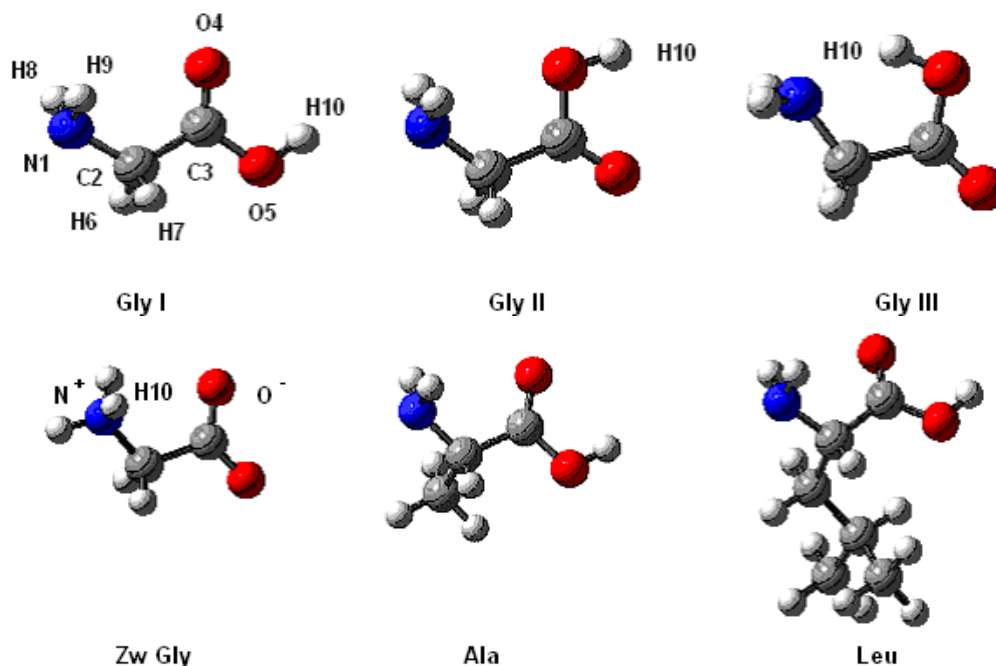


Рис. 1. Молекулярные диаграммы конформеров и цвиттер-ионных форм Gly, Ala и Leu

Вычисленные значения полных энергий в изолированном состоянии и водном растворе (модель реактивного поля SCRF, диэлектрическая проницаемость  $\epsilon=78.39$ ) приведены в табл. 1.

Сравнение значений полных энергий для Gly и Ala даёт одну и ту же последовательность убывания стабильности конформеров – I, III, II. Для Leu наиболее стабильным является конформер III.

Значения полных энергий цвиттер-ионных форм Gly, Ala и Leu ниже энергий соответствующих конформеров I на 13.41, 14.22 и 12.76 ккал/моль. В данном случае сравнение проводилось для изолированных конформеров и цвиттер-ионных форм, рассчитанных в водной среде, т.к. в водном растворе аминокислоты существуют в виде цвиттер-ионов.

В табл. 1 приведены также значения полных энергий конформеров Gly, вычисленные методом SCRF. В этом случае более стабильным по сравнению с цвиттер-ионной формой оказывается конформер Gly I, однако сравнение дипольных моментов показывает, что в водном растворе равновесие также должно сместиться в сторону цвиттер-ионной формы.

Таблица 1.

Значения полных энергий и дипольных моментов конформеров Gly, Ala, Leu и цвиттер-ионных форм

Конформер	Полная энергия (а.е.)	Дипольный момент (D)	$\Delta$ (ккал/моль)
Gly I	-284.52 966 199 -284.55 145 154 (SCRF)	1.18 1.92	0
Gly II	-284.52 658 474 -284.54 808 632 (SCRF)	2.48 3.18	1.93 2.11
Gly III	-284.52 898 832 -284.55 068 822 (SCRF)	5.77 7.67	0.42 0.48
Zw Gly	-284.55 102 642 (SCRF)	14.69	-13.41 (0.27)
Ala I	-323.85 607 958	1.31	0
Ala II	-323.85 437 751	1.63	1.07
Ala III	-323.85 605 805	5.58	0.01
Zw Ala	-323.87 873 390 (SCRF)	13.74	-14.22
Leu I	-441.82 712 756	1.41	0.21
Leu II	-441.82 643 182	1.54	0.64
Leu III	-441.82 745 790	5.10	0
Zw Leu	-441.84 779 835 (SCRF)	13.65	-12.76

В таб. 2 приведены структурные параметры только того молекулярного фрагмента, который является общим для всех аминокислот. Как показывает расчёт, в изолированном состоянии структурные параметры данного фрагмента не только для соответствующих конформеров Gly, Ala и Leu (например, Gly I, Ala I, Leu I), но и для всех

трёх конформеров I, II, III отличаются не более чем на 5-10%, за исключением длин связей CO и угла  $C_2C_3O_4$ , что связано с переносом протона. Т.е. присоединение метильных групп практически не влияет на структурные параметры общего для Gly, Ala и Leu молекулярного фрагмента.

Таблица 2.

Вычисленные длины связей (Å) и углы (град.) конформеров и цвиттер-ионных форм Gly, Ala и Leu

Связи, углы	Gly I	Gly II	Gly III	Ala I	Ala II	Ala III	Leu I	Leu II	Leu III	Zw Gly	Zw Ala	Zw Leu
$N_1C_2$	1.448	1.460	1.469	1.455	1.461	1.469	1.462	1.466	1.476	1.500	1.515	1.513
$C_2C_3$	1.524	1.515	1.537	1.532	1.530	1.537	1.530	1.529	1.541	1.546	1.560	1.562
$C_3O_4$	1.205	1.356	1.340	1.206	1.359	1.360	1.207	1.360	1.342	1.255	1.261	1.261
$C_3O_5$	1.355	1.204	1.201	1.356	1.206	1.202	1.356	1.206	1.204	1.251	1.246	1.247
$O_{5(4)}H_{10}$	0.969	0.969	0.983	0.969	0.969	0.983	0.970	0.969	0.970			
$N_1H_9$	1.015	1.014	1.012	1.015	1.015	1.012	1.016	1.015	1.015	1.031	1.028	1.031
$N_1H_8$	1.015	1.014	1.013	1.016	1.015	1.013	1.015	1.015	1.014	1.031	1.044	1.037
$N^+_1H_{10}$										1.031	1.029	1.029
$H_9N_1C_2$	110.8	111.2	112.8	110.9	110.5	112.8	111.1	111.4	111.9	111.2	114.1	111.8
$H_9N_1H_8$	106.6	108.1	108.1	106.4	107.6	108.1	107.0	107.8	107.8	106.3	109.3	110.8
$C_2N_1H_8$	110.8	110.5	112.5	110.2	110.9	112.5	109.9	109.9	111.8	109.9	104.2	106.2
$N_1C_2C_3$	116.0	112.7	111.6	113.6	115.1	111.6	112.3	113.2	108.8	110.9	106.8	106.7
$C_2C_3O_4$	125.8	112.0	114.0	125.6	112.3	114.0	124.9	112.1	114.0	116.4	115.8	115.5
$O_4C_3O_5$	122.9	122.8	123.4	122.6	122.3	123.4	122.4	122.1	122.7	128.8	128.3	127.9
$C_3O_{5(4)}H_{10}$	107.6	107.4	105.5	107.4	107.3	105.5	107.3	107.2	107.3			
$C_2N^+_1H_{10}$										112.6	112.4	112.9
$H_8N^+_1H_{10}$										108.9	108.9	107.9
$H_9N^+_1H_{10}$										108.0	107.7	107.1

При образовании цвиттер-ионных форм происходит увеличение на 0.05–0.07 Å и выравнивание, соответственно, длин связей  $N_1C_2$ ,

$C_2C_3$  и  $C_3O_4$ ,  $C_3O_5$ ; кроме того, в цвиттер-ионных формах угол  $O_4C_3O_5$  увеличивается на 5 град по сравнению с каноническими конформерами.

Сравнение структурных параметров цвиттер-ионов показывает, что в водном растворе происходит поворот фрагмента COO относительно группы N<sup>+</sup>H<sub>3</sub>, причём угол поворота увеличивается в ряду Zw Gly, Zw Ala и Zw Leu.

**Выводы.** Расчёт и анализ стабильности канонических конформеров Gly, Ala и Leu показывает, что в изолированном состоянии могут одновременно существовать все три конформера I,

II и III. Для Leu, в отличие от Gly и Ala, наиболее стабильным является конформер III.

Геометрические параметры общего для Gly, Ala и Leu фрагмента незначительно отличаются для одинаковых конформерных структур в случае изолированных молекул. Напротив, в водном растворе для цвиттер-ионных форм наблюдается значительное изменение взаимного расположения фрагментов COO и N<sup>+</sup>H<sub>3</sub> как относительно друг друга, так и относительно метильных групп.

Библиографический список

1. Гурская Г.В. Рентгеноструктурный анализ белков. Л., 1961.
2. Jeffrey G.A., Saenger W. Hydrogen Bonding in Biological Structures. – Berlin, Germany: Springer. 1991. 569 p.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2003.

### STABILITY AND STRUCTURE CONFORMERS OF GLYCINE, ALANINE AND LEUCINE IN ISOLATED STATE AND ZWITTERIONIC FORMS

G.N. Ten, D.M. Kadrov, V.I. Berezin

Saratov State University

The structure of the glycine, alanine and leucine conformers in isolated state and zwitterionic forms of an aqueous solution was performed. It is shown that the most stability structure for glycine and alanine are conformer I and for leucine – conformer III.

УДК 543.42+547.82

### АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА КОНФОРМЕРОВ ИЗОЛИРОВАННОГО ГЛИЦИНА В АНГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Г.Н. Тен, Д.М. Кадров, В.И. Березин

Саратовский государственный университет

*Тен Галина Николаевна*, д.ф.-м.н., доцент

*Кадров Дмитрий Михайлович*, студент физфака

*Березин Валентин Иванович*, д.ф.-м.н., профессор

Проведён расчёт и анализ колебательных спектров конформеров глицина в ангармоническом приближении. Выполнена полная интерпретация ИК спектра изолированного глицина.

**Введение.** Колебательным спектрам глицина (Gly), как простейшей аминокислоте, посвящено большое число экспериментальных и теоретических работ. ИК и КР спектры Gly были зарегистрированы в различных условиях – в газовой фазе, в растворах, в поликристаллическом состоянии, а также методом матричной изоляции [1-11]. Теоретический анализ колебательных спектров Gly ранее был выполнен с использованием как полуэмпирических, так и неэмпирических квантово-химических методов, но в рамках гармонического приближения [5,6].

Цель работы – применить результаты квантово-химического расчёта колебательных спектров конформеров Gly, полученных в ангармоническом приближении, для анализа и интерпретации колебательного спектра изолированного Gly. Расчёт выполнен методом DFT в приближении B3LYP/6-311++G(d,p) с помощью программ Gaussian-03 [12].

**Результаты и обсуждение.** Молекулярные диаграммы рассматриваемых конформеров Gly изображены на рис. 1.

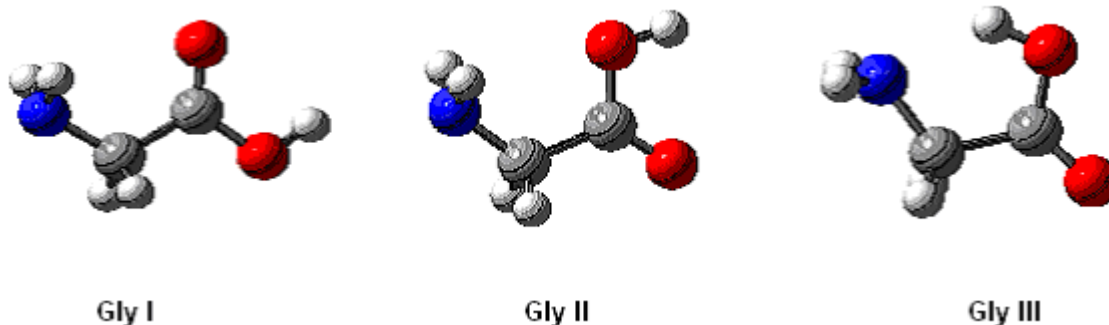


Рис. 1. Молекулярные диаграммы конформеров Gly

В табл. 1 приведены экспериментальные и рассчитанные значения частот в гармоническом и ангармоническом приближениях. Как и следовало ожидать, влияние ангармонизма в наибольшей степени сказывается на валентных колебаниях связей OH, NH и CH – частотные смещения

изменяются от 135 (колебание № 5 для Gly I) до 271  $\text{см}^{-1}$  (колебание № 3 для Gly III). Кроме того, наблюдаются значительные (до 93  $\text{см}^{-1}$ ) отличия ангармонических и гармонических частот для валентных колебаний  $\text{Q}(\text{C}=\text{O})$  и деформационных колебаний  $\beta(\text{CON})$ ,  $\beta(\text{CCO})$ . Частотные смещения других колебаний лежат в пределах 5–40  $\text{см}^{-1}$ .

Согласно результатам расчёта в конформерах Gly I, Gly II, Gly III имеют место соответственно 9, 20 и 21 резонансов Ферми, а также один резонанс Дарлинг-Деннисона (для Gly I).

Для сравнения результатов расчёта с экспериментом был использован экспериментальный ИК спектр Gly, измеренный в Ag матрице при температуре 13 К [5,6]. Ранее отнесение экспериментальных полос поглощения с целью интерпретации и определения конформационного состава был выполнен в работе [6]; расчёт проводился методами DFT и MP2 в гармоническом приближении. Надо отметить, что даже использование спектров дейтерозамещённых конформеров Gly не позволило провести интерпретацию всех экспериментальных полос поглощения колебательного спектра. В частности, не было выполнено отнесение колебаний в области ~ 1750, 1400 и 800  $\text{см}^{-1}$ .

Результаты нашего расчёта, а также экспериментальные частоты и относительные интенсивности полос поглощения [6] приведены в табл. 2. На основе анализа колебательных спектров можно сделать следующие выводы.

1. Расчёт в ангармоническом приближении позволил выполнить однозначную интерпретацию экспериментальных полос поглощения в области валентных (3600—2800  $\text{см}^{-1}$ ) колебаний связей OH, NH и CH для всех трёх конформеров Gly.

2. В области ~1800–1700  $\text{см}^{-1}$  интерпретация полос поглощения возможна только с учётом резонанса Ферми. Экспериментальные полосы средней интенсивности поглощения с частотами

1767 и 1741  $\text{см}^{-1}$  могут быть отнесены к составным частотам 18+13 и 19+12 конформера Gly II, интенсивность которых сопоставима с интенсивностями основных колебаний, что является следствием резонанса Ферми, приводящего к перераспределению интенсивностей между фундаментальными и составными колебаниями. Увеличение интенсивности полос поглощения с частотами 1390, 911, 883 и 798  $\text{см}^{-1}$  также можно объяснить резонансным взаимодействием основных тонов сильной и средней интенсивности, частоты колебаний которых равны 1373, 880 (или 876), 852 и 786 (или 785)  $\text{см}^{-1}$ , с составными колебаниями 20+15, 12+18, 22+20 и 22+19 Gly III, Gly I и Gly II соответственно.

3. Предложенное теоретическое отнесение экспериментального спектра изолированного Gly как суперпозиции спектров конформеров Gly I, Gly II, Gly III в целом совпадает с отнесением, предложенным в работе [6]. В то же время расчёт в ангармоническом приближении позволяет выполнить интерпретацию ряда колебаний, отнесение которых ранее было затруднено. Например, экспериментальные полосы поглощения с частотами 1405, 809, 807, 796, 617  $\text{см}^{-1}$  можно отнести к колебаниям конформеров Gly – I, III, II, III и II соответственно. Таким образом, уточнение проведённого ранее в работе [6] отнесения позволило провести полную интерпретацию ИК спектра изолированного Gly.

4. Рассчитанные интенсивности ИК полос хорошо согласуются с их качественной (относительной интенсивностью) оценкой из эксперимента [5]. На рис. 2. приведены экспериментальный (2а) спектр поглощения изолированного Gly и суммарный ИК спектр конформеров Gly I Gly II и Gly III, относительное содержание которых составляет 80, 10 и 10% соответственно.

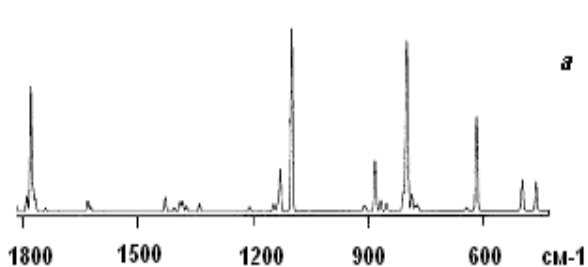


Рис. 2а. Экспериментальный [5] спектр поглощения изолированного Gly.

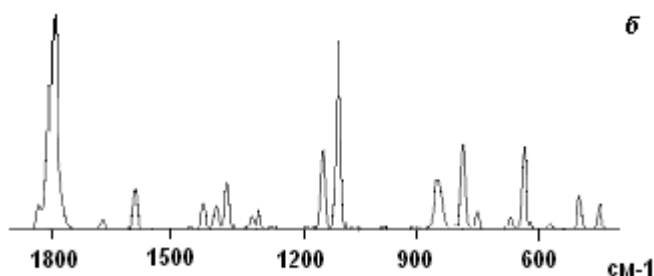


Рис. 2б. Суммарный вычисленный ИК спектр конформеров Gly (Gly I – 80%, Gly II – 10%, Gly III – 10%).

**Заключение.** Выполнен анализ колебательных спектров конформеров Gly в ангармоническом приближении. Показано, что для конформеров данного класса соединений применение ангармонической теории возмущения второго

порядка позволяет выполнить полную интерпретацию колебательных спектров, что может быть использовано для предсказательных расчётов колебательных спектров аминокислот.

Таблица 1.

Вычисленные значения частот ( $\nu_{\text{гарм}}, \nu_{\text{ангарм}}, \text{см}^{-1}$ ) и интенсивностей ИК спектров ( $I_{\text{р.ИК}}, \text{км/моль}$ ) конформеров Gly I, Gly II, Gly III в гармоническом и ангармоническом приближениях

№	Gly I			Gly II			Gly III			
	Кол.	$\nu_{\text{р. гарм}}$	$\nu_{\text{р. ангарм}}$	$I_{\text{р.ИК}}$	$\nu_{\text{р. гарм}}$	$\nu_{\text{р. ангарм}}$	$I_{\text{р.ИК}}$	$\nu_{\text{р. гарм}}$	$\nu_{\text{р. ангарм}}$	$I_{\text{р.ИК}}$
1		3756	3586	60.4	3761	3563	72.0	3615	3447	17.3
2		3585	3412	6.5	3598	3432	7.3	3538	3388	0.7
3		3513	3355	1.9	3516	3370	1.5	3488	3217	292.9
4		3076	2921	6.9	3104	2958	7.9	3099	2950	5.9
5		3043	2908	16.9	2934	2789	53.4	3055	2913	13.1
6		1816	1782	318.2	1820	1785	352.1	1843	1818	381.2
7		1680	1587	24.9	1655	1667	41.4	1663	1600	36.5
8		1457	1416	17.1	1490	1450	5.4	1465	1427	6.8
9		1395	1355	13.9	1425	1388	31.2	1410	1381	382.7
10		1384	1339	0.1	1344	1300	50.0	1359	1303	6.7
11		1303	1355	14.2	1291	1248	7.5	1330	1319	8.9
12		1186	1156	1.0	1232	1183	69.3	1207	1160	34.5
13		1159	1127	97.1	1133	1095	176.2	1165	1144	2.6
14		1121	1086	222.2	1075	1052	34.2	1067	1041	18.4
15		916	905	3.2	1013	977	11.0	925	859	31.4
16		901	848	114.1	934	804	40.7	884	855	89.9
17		814	789	104.5	811	753	129.8	855	813	98.4
18		644	636	96.4	695	672	89.4	813	770	43.3
19		637	632	5.0	593	574	60.8	645	636	6.3
20		505	508	41.4	543	629	27.4	548	538	6.2
21		463	457	31.0	456	453	7.8	509	507	2.2
22		256	247	10.4	289	257	17.6	317	311	17.1
23		214	265	46.9	228	160	31.9	259	147	13.3
24		64	84	5.5	67	68	2.6	59	141i	1.3

Таблица 2.

Экспериментальные [6] и вычисленные значения частот ( $\nu_3, \nu_{\text{р}}, \text{см}^{-1}$ ) и интенсивностей ( $A_{(\text{э. отн})}, I_{\text{р.ИК}}, \text{км/моль}$ ) ИК спектров конформеров Gly I, Gly II, Gly III

Gly [6]		Gly I, II, III		Отнесение		
$\nu_3$	$A_{(\text{э. отн})}$	$\nu_{\text{р. анг.}}$	$I_{\text{р.ИК}}$	Gly I	Gly II	Gly III
3560	0.253	3586	60.4	q(OH)		
3543	0.041	3563	72.0		q(OH)	
		3447	17.3			q(NH <sub>2</sub> )asym
		3432	7.3	q(NH <sub>2</sub> )asym		
3410	0.042	3412	6.5		q(NH <sub>2</sub> )asym	
		3388	0.7			q(NH <sub>2</sub> )sym, q(OH)
		3370	1.5	q(NH <sub>2</sub> )sym		
		3355	1.9		q(NH <sub>2</sub> )sym	
3200	0.029	3217	292.9			q(OH)
		2921	6.9	q(CH <sub>2</sub> )asym		
		2908	16.9	q(CH <sub>2</sub> )sym		
2958	0.023	2958	7.9		q(CH)	
2944	0.030	2950	5.9			q(CH <sub>2</sub> )asym
		2913	13.1			q(CH <sub>2</sub> )sym
		2789	53.4		q(CH)	
1790	0.165	1818	381.2			Q(C=O)
1779	1.368	1782	318.2	Q(C=O)		
1773	0.217	1785	352.1		Q(C=O)	
1767	0.136	1767			18+13 FR	
1741	0.036	1756			19+12 FR	
1630	0.116	1667	41.4		$\beta(\text{NH}_2)$	
1622	0.054	1600	36.5			$\beta(\text{NH}_2)$
		1587	24.9	$\beta(\text{NH}_2)$		
1429	0.097	1450	5.4		$\beta(\text{CH}_2)$	
1427	0.071	1427	6.8			$\beta(\text{CH}_2)$

1405	0.037	1416	17.1	$\beta(\text{CH}_2)$		
1390	0.105	1391				20+15 FR
1383	0.107	1388	31.2		$\beta(\text{COH}), \text{Q}(\text{CO})$	
1373	0.050	1381	382.7			$\beta(\text{COH}), \text{Q}(\text{CO})$
1339	0.079	1355	14.2	$\beta(\text{COH}), \text{Q}(\text{CO})$		
		1355	13.9	$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{COH})$		
		1339	0.1	$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{CNH})$		
		1319	8.9			$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{COH})$
		1303	6.7			$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{CNH})$
		1300	50.0		$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{COH})$	
1210	0.050	1248	7.5		$\beta(\text{CCH}), \beta(\text{CNH})$	
		1183	69.3		$t\omega(\text{CH}_2)$	
		1160	34.5			$t\omega(\text{CH}_2)$
1147	0.077	1156	1.0	$t\omega(\text{CH}_2)$		
1136	0.082	1144	2.6			$q(\text{CN}), q(\text{CO})$
1130	0.458	1127	97.1	$q(\text{CN}), q(\text{CO})$		
1101	0.989	1095	176.2		$q(\text{CN}), q(\text{CO})$	
1099	1.229	1086	222.2	$q(\text{CN}), q(\text{CO})$		
		1052	34.2		$q(\text{CN}), q(\text{CO})$	
		1041	18.4			$q(\text{CN}), q(\text{CO})$
		977	11.0		$\omega(\text{NH}_2), q(\text{CC})$	
911	0.051	916				12+18 FR
907	0.033	905	3.2	$\omega(\text{NH}_2), q(\text{CC})$		
883	0.485	880		22+19 FR		
880	0.139	859	31.4			$\omega(\text{NH}_2), q(\text{CC})$
867	0.109	855	89.9			$q(\text{CC}), \omega(\text{NH}_2)$
852	0.079	848	114.1	$q(\text{CC}), \omega(\text{NH}_2)$		
809	0.134	813	98.4			$\beta(\text{CCC})$
807	0.083	804	40.7		$q(\text{CC}), \omega(\text{NH}_2)$	
801	1.233	789	104.5	$q(\text{CC}), q(\text{CO})$		
798	0.056				22+20 FR	
796	0.236	770	43.3			$q(\text{CC}), q(\text{CO})$
786	0.126					
785	0.058	753	129.8		$q(\text{CC}), q(\text{CO})$	
777	0.052					
771	0.063	672	89.4		$\beta(\text{CCC})$	
644	0.036	636	96.4	$\beta(\text{CCC})$		
		636	6.3			$\tau(\text{CO})$
		632	5.0	$\tau(\text{CO})$		
619	0.346	629	27.4		$\tau(\text{CO})$	
617	0.771	574	60.8		$\beta(\text{OCO})$	
		538	6.2			$\beta(\text{OCO})$
500	0.195	508	41.4	$\beta(\text{OCO})$		
498	0.180	507	2.2			$\beta(\text{CCO})$
463	0.313	457	31.0	$\beta(\text{CCO})$		
		453	7.8		$\beta(\text{CCO})$	
		311	17.1			$\beta(\text{OCO}), \beta(\text{CCN})$
		265	46.9	$\beta(\text{OCO}), \beta(\text{CCN})$		
		257	17.6		$\beta(\text{OCO}), \beta(\text{CCN})$	
		247	10.4	$\chi(\text{CCNH}), \chi(\text{NCCO})$		
		160	31.9		$\chi(\text{CCNH}), \chi(\text{NCCO})$	
		147	13.3			$\chi(\text{CCNH}), \chi(\text{NCCO})$
		84	5.5	$\chi(\text{NCCO})$		
		68	2.6		$\chi(\text{NCCO})$	

## Библиографический список

1. Ramaekers R., Pajak J., Lambie B., Maes G. // J. Chem. Phys. 2004. V. 120. P. 4182-4193.
2. Иванов А.А., Королик Е.В., Инсарова Н.И., Ильич Г.К. // ЖПС. 1991. Т.54, N 3. С. 464-468.
3. Grenie Y., Garrigou-Lagrange C. // J. Mol. Spectr. 1972. V. 41. P. 240-248.
4. Grenie Y., Lasseguers J.-C., Garrigou-Lagrange C. // J. Chem. Phys. 1970. V. 53. P. 2980-2982.

5. Gómez-Zavaglia A., Fausto R. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2003. V.5. P. 3154-3161.
6. Stepanian S.G., Reva I.D., Radchenko E.D., Rosado M.T.S., Duarte M.L.T.S., Fausto R., Adamowicz L. // J. Phys. Chem. 1998 A. V. 102. P. 1041-1054.
7. Masamura M. // J. Mol. Struct. 1988. V.168. P. 227-234.
8. Takeda M., Iavazzo R.E.S., Garfinkel D., Scheinberg I.H., Edsall J.T. // J. Amer. Chem. Soc. 1958. V. 80, N 5. P. 3813-3818.
9. Pearson J.F., Slifkin M.A. // Spectrochim. Acta. 1972. V. 28 A. P. 2403-2417.
10. Kakihana M., Akiyama M., Nagumo T., Okamoto M. // Z. Naturforsch. 1988. V.43a. P. 774-792.
11. De Gelder J., De Gussem K., Vanderabeele P., Moens L. // J. Raman Spectr. 2007. V.38. P. 1133-1147.
12. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2003.

## ANALYSIS OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF ISOLATED CONFORMERS OF GLYCINE IN THE ANHARMONIC APPROXIMATION

G.N. Ten, D.M. Kadrov, V.I. Berezin

Saratov State University

Vibrational spectra of the glycine conformers in the anharmonic approximation are calculated. The complete interpretation of the IR spectrum of isolated glycine was performed.

УДК 543.42+547.82

## РАСЧЁТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ВОДНОГО РАСТВОРА АДЕНИНА

Г.Н. Тен, А.А. Яковлева, В.И. Березин

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., доцент СГУ

Яковлева Антонина Алексеевна, аспирант

Березин Валентин Иванович, д.ф.-м.н., профессор

Проведен расчёт и анализ ИК и КР спектров водного раствора таутомеров аденина Ade-N<sub>9</sub>H и Ade-N<sub>7</sub>H в приближении B3LYP/6-311++G(d,p). Показано, что в нейтральном водном растворе наряду с таутомером Ade-N<sub>9</sub>H, доминирующим по количественному содержанию, присутствует таутомер Ade-N<sub>7</sub>H.

**Введение.** Определение таутомерного состава оснований нуклеиновых кислот в различных фазовых состояниях является одной из важных задач биохимии и молекулярной биологии. Для решения этой задачи весьма целесообразным представляется использование методов колебательной спектроскопии. При этом определение таутомерного состава вещества и идентификация таутомеров методами колебательной спектроскопии часто вызывают серьезные затруднения из-за наложения спектров нескольких таутомерных форм.

Целью данной работы является определение таутомерного состава Ade в нейтральном водном растворе путем теоретического исследования ИК и КР спектров Ade-N<sub>9</sub>H и Ade-N<sub>7</sub>H и сравнения с экспериментом.

**Результаты расчёта.** Расчёты колебательных спектров таутомеров Ade-N<sub>9</sub>H, Ade-N<sub>7</sub>H, молекулярные диаграммы которых представлены на рис. 1, были выполнены с помощью программ Gaussian-03 [1].

Гармонические колебания рассчитывались в приближении B3LYP/6-311++G(d,p), использующем диффузные функции и показавшем свою высокую эффективность при расчёте колебательных спектров. Для учёта влияния воды как растворителя на колебательные спектры рассматриваемых

молекулярных структур использовалась модель реактивного поля (диэлектрическая проницаемость  $\epsilon=78,39$ , метод SCRF).

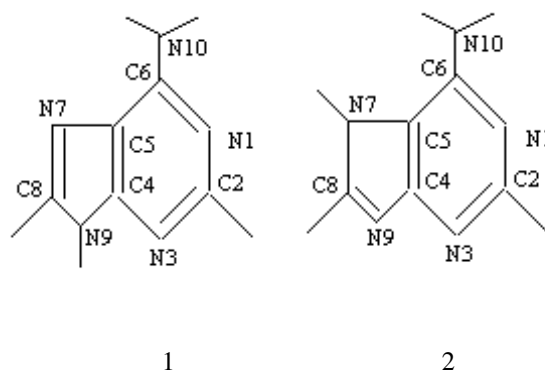


Рис. 1. Молекулярные диаграммы Ade-N<sub>9</sub>H (1) и Ade-N<sub>7</sub>H (2) с обозначением атомов

Результаты расчёта колебательных спектров Ade-N<sub>9</sub>H, Ade-N<sub>7</sub>H приведены в табл. 2. Ранее экспериментальные спектры КР водного раствора Ade были представлены в нейтральной среде [2] и при pH=11.3 [3], при этом вопрос о таутомерном составе Ade не рассматривался.

Таблица 1.

Экспериментальные и вычисленные значения частот ( $\nu_3$ ,  $\nu_p$ ,  $\text{см}^{-1}$ ) и интенсивностей ИК ( $I_{\text{ИК}}$ ,  $\text{км/моль}$ ) и КР ( $I_{\text{КР}}$ ,  $\text{Å}^4/\text{а.е.м.}$ ) спектров таутомеров Ade в водном растворе

№	Ade ( $\nu_3$ , $I_{\text{КР}}^{\text{омн}}$ )		Ade-N <sub>9</sub> H			Ade-N <sub>7</sub> H			Отнесение
	[2]	[3]	$\nu_p$	$I_{\text{КР}}$	$I_{\text{ИК}}$	$\nu_p$	$I_{\text{КР}}$	$I_{\text{ИК}}$	
Неплоские колебания									
1			138	2.2	362.4	271	16.7	452.4	$\rho(\text{NH}_2)$
2			155	0.7	36.5	148	1.6	4.1	$\chi(\text{p+i})$
3			212	0	0.2	204	0.2	0.6	$\chi(\text{p+i})$
4			300	0.4	4.7	300	0.4	41.3	$\chi(\text{p+i})$
5			517	0.5	100.6	463	1.4	18.4	$\rho(\text{NH}_2)$
6			545	0.7	129.3	512	0.4	210.3	$\rho(\text{N}_{9,7}\text{H})$
7			577	1.6	15.0	579	1.4	10.8	$\rho+\chi$
8			667	1.8	0.8	637	1.2	0.1	$\rho(\text{C}_8\text{H})$ ,
9			688	1.0	0.8	701	2.1	0.9	$\chi(\text{p+i})$
10			808	1.9	16.1	802	0.3	4.2	$\chi(\text{p+i})$
11			873	4.9	11.3	894	2.2	13.4	$\rho(\text{C}_8\text{H})$
12			972	0.4	6.8	972	0.3	8.2	$\rho(\text{C}_2\text{H})$
Плоские колебания									
13	306(12.0)	312(1)	288	7.2	29.0	301	6.0	5.2	$\beta(\text{C}_6\text{N}_{10})$
14	492(12.7)		524	7.6	8.4	526	13.5	19.1	$\gamma$
15	542(15.8)	540(1)	532	9.3	9.1	539	5.0	5.0	$\gamma$
16	578(6.3) 626(22.2)	628(2)	619	27.6	7.1	614	21.8	1.2	$\gamma$
17	728(100)	725(7)	719	101.9	11.9	723	112.9	13.2	Q, $\gamma$
18	914(5.7)	915(1)	904	9.3	38.3	902	6.0	48.8	Q, $\gamma$
19	964(11.4)	965(1)	943	19.8	46.6	945	24.2	7.7	Q, $\gamma$
20		1030(0)	997	20.7	20.7	1010	27.7	39.6	Q, $\beta(\text{NH}_2)$
21			1087	36.4	24.6	1107	11.3	58.3	Q, $\beta(\text{N}_{9(7)}\text{H})$
22	1134(6.2) 1162(1.9)	1125(1)	1141	11.9	54.9	1142	30.1	34.4	Q, $\beta$
23	1198(5.1)	1200(1)	1228	44.0	41.6	1227	50.9	35.4	Q, $\beta$
24	1254(44.9)	1252(6)	1256	85.1	66.6	1265	1.5	52.3	Q, $\beta$
25	1296(2.5) 1314(30.4)	1315(5)	1324	62.6	175.8	1326	116.1	29.5	Q, $\beta$
26	1332(79.1)	1330(10)	1350	191.3	107.9	1350	134.5	35.4	Q, $\beta$
27	1368(23.4)	1365(4)	1364	160.7	75.1	1372	106.8	76.5	Q, $\beta$
28	1454(19.6)	1385(3)	1410	126.2	52.9	1397	226.4	216.8	Q, $\beta$
29		1450(3)	1430	10.2	69.4	1427	53.7	443.1	Q, $\beta$
30	1486(5.1)	1475(1)	1484	126.5	207.9	1492	52.7	122.4	Q, $\beta$
31	1542(24.7)	1540(4)	1503	192.8	-	1503	23.7	2.8	Q, $\beta$
32			1593	17.5	30.9	1608	7.2	95.3	Q, $\beta(\text{NH}_2)$
33			1609	133.2	336.5	1572	152.5	75.7	Q, $\beta$
34	1656(18.4)		1630	23.7	1225.5	1647	41.1	997.7	Q, $\beta(\text{NH}_2)$
35			3103	385.3	3.9	3102	360.6	5.8	q(C <sub>2</sub> H)
36			3160	285.3	23.6	3158	277.1	26.7	q(C <sub>8</sub> H)
37			3269	400.4	539.3	3265	343.8	537.0	q(N <sub>9,7</sub> H)
38			3433	589.1	410.2	3421	636.8	382.5	q(NH <sub>2</sub> ) sym
39			3550	114.2	208.8	3529	130.3	193.6	q(NH <sub>2</sub> ) asym



Как показывает эксперимент, в нейтральном водном растворе наблюдается расщепление линий в области  $\sim 600$ ,  $1100$  и  $1300$   $\text{cm}^{-1}$ . Так, в области колебания  $16$  расположены две близко расположенные линии с частотами  $578$  и  $626$   $\text{cm}^{-1}$ ; в области колебания  $22$  – линии с частотами  $1134$  и  $1162$   $\text{cm}^{-1}$ ; в области колебания  $25$  – линии с частотами  $1296$  и  $1314$   $\text{cm}^{-1}$ , причём интенсивность одной из двух линий превышает интенсивность другой в несколько раз. Это указывает на присутствие в колебательном спектре нескольких (не менее 2-х) молекулярных структур, а сам спектр является суперпозицией нескольких спектров.

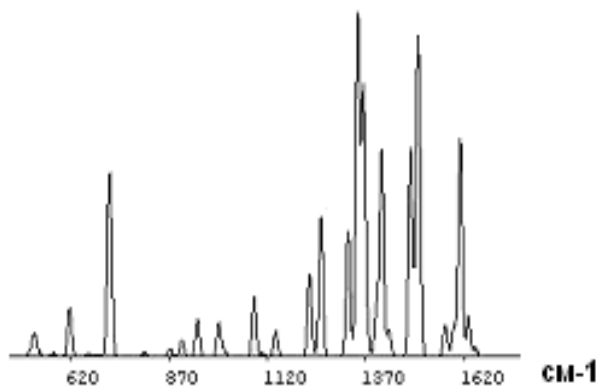


Рис. 2. Вычисленный КР спектр водного раствора смеси Ade-N<sub>9</sub>H (80%) и Ade-N<sub>7</sub> (20%)

На рис. 2 приведён теоретический спектр, полученный наложением спектров таутомеров Ade-N<sub>9</sub>H и Ade-N<sub>7</sub>H, процентное содержание которых составляет 80 и 20 % соответственно. Сравнение с экспериментальным спектром указывает на присутствие этих структур в нейтральном водном растворе [2]. В водном растворе при pH=11.3 расщепление линий исчезает и экспериментальный КР спектр соответствует вычисленному спектру для таутомера Ade-N<sub>9</sub>H [3]. Это подтверждает тот факт, что в воде одновременно могут существовать таутомеры Ade-N<sub>9</sub>H и Ade-N<sub>7</sub>H, причём, как показывают результаты исследований ЯМР, в нейтральном водном растворе при 20 °С процентное содержание таутомера Ade-N<sub>7</sub>H составляет не менее 22 % [4]. Кроме того, экспериментально

установлено присутствие Ade-N<sub>7</sub>H и в других растворах [5].

На рис. 3 представлен теоретический ИК спектр смеси спектров таутомеров Ade-N<sub>9</sub>H и Ade-N<sub>7</sub>H, процентное содержание которых также составляет 80 и 20 % соответственно, с помощью которого также можно проводить идентификацию таутомерного состава Ade в нейтральном водном растворе.

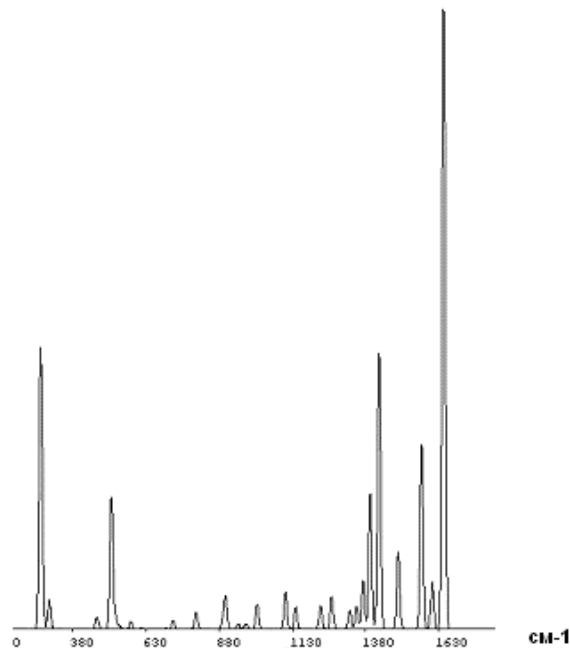


Рис. 3. Вычисленный ИК спектр водного раствора смеси Ade-N<sub>9</sub>H (80%) и Ade-N<sub>7</sub> (20%)

**Выводы.** В данной работе для определения таутомерного состава Ade в нейтральном водном растворе были выполнены расчёты колебательных спектров таутомеров Ade-N<sub>9</sub>H, Ade-N<sub>7</sub>H в приближении B3LYP/6-311++G(d,p). Показано, что в водном растворе присутствуют таутомеры Ade-N<sub>7</sub>H и Ade-N<sub>9</sub>H с доминированием последнего.

#### Библиографический список

1. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03. Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2003.
2. Mathlouthi M., Seuvre A.-M. // Carbohydrate Research. — 1984. — **131**. — P.1— 15.
3. Lord R.C., Thomas G.J. // Spectrochim. Acta. — 1967. — **23A**. — P. 2551 — 2591.
4. Dreyfus M., Dobin G., Bensaude O., Dubuis J.E. // J. Am. Chem. Soc. — 1975. — **97**. — P. 2369 — 2376.
5. Chenon M.T., Pugmire R.J., Grant D.M., Panzica R.P., Townsend L.B. // J. Am. Chem. Soc. — 1975. — **97**. — P. 4636 — 4643.

#### CALCULATION AND INTERPRETATION OF VIBRATIONAL SPECTRA OF ADENINE WATER SOLUTION

G.N. Ten, A.A. Yakovleva, V.I. Berezin  
Saratov State University

The calculation and analysis of IR and Raman spectra of an aqueous solution of the tautomers of adenine Ade-N<sub>9</sub>H and Ade-N<sub>7</sub>H in B3LYP/6-311++G(d,p) approximation was completed. It is shown that in neutral aqueous solution tautomer Ade-N<sub>7</sub>H, along with Ade-tautomer N<sub>9</sub>H, which is dominant in quantitative content, is presented too.

## ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ НА ИК СПЕКТР КОМПЛЕМЕНТАРНОЙ ПАРЫ АДЕНИН-ТИМИН

Г.Н. Тен, А.А. Яковлева, В.И. Березин

Саратовский государственный университет

*Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., доцент**Яковлева Антонина Алексеевна, аспирант**Березин Валентин Иванович, д.ф.-м.н., профессор.*

Проведен расчёт и анализ ИК спектра комплементарной пары аденин-тимин в приближении V3LYP/6-311++G(d,p). Показано влияние водородных связей на частоты и интенсивности полос поглощения пары по сравнению со спектрами изолированных молекул тимина и аденина.

**Введение.** Для получения достоверной информации о структурных и спектральных свойствах вещества в твёрдом и жидком фазовых состояниях необходимо выполнить надёжную интерпретацию спектров с учётом влияния водородных связей. Это можно сделать, сравнивая, например, спектры изолированных молекул со спектрами конденсированных состояний или со спектрами изолированных димеров.

Ранее было показано, что КР спектры тимина (Thy) в изолированном и поликристаллическом состояниях, в отличие от ИК спектров, очень похожи – по мнению авторов эксперимента [1] они практически совпадают и этот факт можно использовать для надёжной интерпретации спектров ОНК в конденсированных состояниях.

Цель данной работы – проанализировать и сравнить влияние водородных связей на ИК спектры изолированных Ade и Thy при их объединении в комплементарную пару. Расчёт частот и интенсивностей полос поглощения выполнен методом DFT в приближении V3LYP/6-311++G(d,p) по программам Gaussian-03 [2].

**Результаты и обсуждение.** Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade-Thy с нумерацией атомов дана на рис. 1. Колебания пары, кроме нескольких смешанных, соответствуют колебаниям Ade или Thy, поэтому при рассмотрении спектра нуклеотидного димера Ade-Thy можно использовать ту же нумерацию, что и для колебаний изолированных оснований нуклеиновых кислот (рис. 2,3). Значения вычисленных в гармоническом приближении экспериментальных частот и интенсивностей ИК и КР спектров Thy, Ade, а также комплементарной пары Ade-Thy ранее были приведены в работах [3,4].

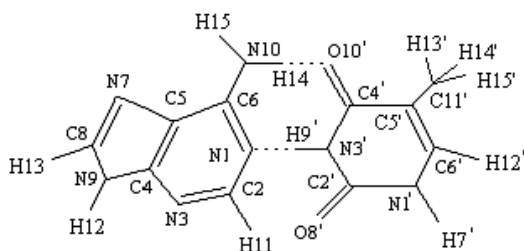


Рис. 1. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade-Thy с нумерацией атомов

Сравнение вычисленных ИК спектров показывает, что частоты колебаний комплементарной пары Ade-Thy, формы которых отвечают выходу связей CС и CN из плоскости пиримидинового и пуринового колец Thy и Ade, а также неплоским колебаниям связей N<sub>1</sub>H<sub>7</sub>, C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>, N<sub>9</sub>H<sub>12</sub> и C<sub>8</sub>H<sub>13</sub>, за исключением крутильного колебания аминной группы χ(NH<sub>2</sub>), отличаются от соответствующих колебаний изолированных молекул Ade и Thy в среднем на 3 см<sup>-1</sup>. Напротив, для неплоских колебаний выхода связи N<sub>10</sub>H<sub>14</sub> аминной группы Ade (колебание 9a) и связи N<sub>3</sub>H<sub>9</sub> Thy (колебание 12t), участвующих в образовании водородных связей наблюдается смещение в область более высоких частот на 200–300 см<sup>-1</sup>.

В низкочастотной области интенсивности полос поглощения неплоских колебаний отдельных ОНК (Ade и Thy), значения которых лежат в интервале от 0.1 до 85 км/моль, при образовании пары существенно меняются (например, интенсивность полосы поглощения ρ(NH<sub>2</sub>) колебания 9a увеличивается от 2.4 до 23.5 км/моль), что приводит к значительному изменению ИК спектра (рис. 2-3). Кроме того, смещение на 390 см<sup>-1</sup> самой интенсивной в низкочастотной области ИК спектра полосы поглощения, отвечающей неплоскому колебанию аминной группы χ(NH<sub>2</sub>), также приводит к существенному отличию колебаний Ade в комплементарной паре по сравнению с колебаниями Ade в изолированном состоянии.

Аналогичный характер изменения интенсивностей полос поглощения наблюдается и для плоских колебаний в области 280–1000 см<sup>-1</sup>. Например, интенсивность дыхательного колебания Thy (колебание 13t) в ИК спектре при образовании комплементарной пары возрастает в 5.5 раз.

Сравнение интенсивностей КР и ИК спектров ОНК и пары в области 300–1000 см<sup>-1</sup> показывает, что спектры КР не только Thy, но и Ade практически не претерпевают каких-либо существенных изменений при образовании комплементарной пары в отличие от ИК спектров, существенные изменения в которых происходят благодаря проявлению в них неплоских колебаний связей, участвующих в образовании водородных связей O<sub>10</sub>...H<sub>14</sub>N<sub>10</sub> и N<sub>3</sub>H<sub>9</sub>...N<sub>1</sub>.

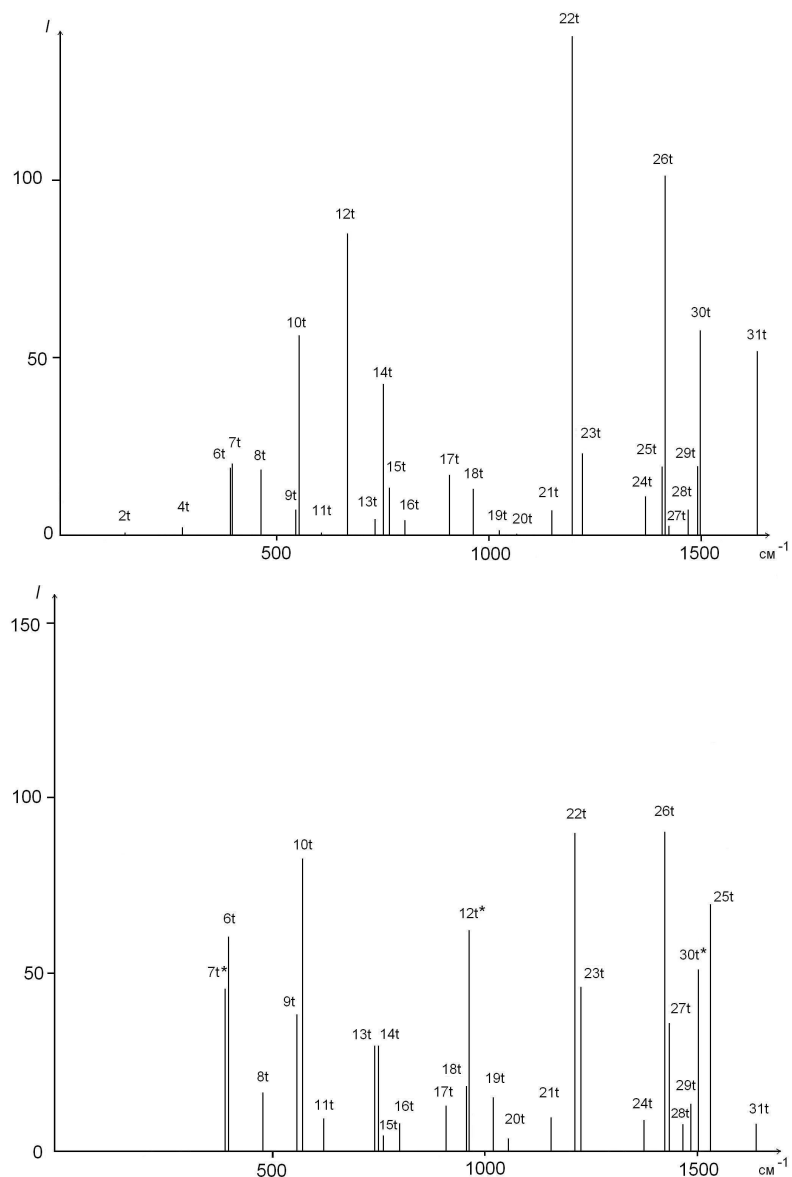


Рис. 2. Вычисленные ИК спектры Thy – изолированного (вверху) и в паре Ade-Thy (внизу).

Степень отличия колебательных спектров отдельных ОНК и комплементарной пары в области  $1000\text{--}1800\text{ см}^{-1}$  зависит от того, какие молекулярные фрагменты принимают участие в образовании водородных связей. Для Thy значительные частотные смещения колебаний связей  $\text{N}'_3\text{H}'_9$  и  $\text{C}'_4=\text{O}'_{10}$  приводят к сильному отличию спектров ИК и КР от аналогичных спектров Thy в паре. Напротив, в случае Ade, для которого частотные смещения деформационных колебаний аминной группы при образовании комплементарной пары составляют не более  $25\text{ см}^{-1}$ , значительные отличия наблюдаются только в спектрах КР, а на спектрах ИК, напротив, влияние водородных связей практически не сказывается.

Смещение частоты колебания 25t Thy на  $132\text{ см}^{-1}$ , форма которого содержит изменения внешних деформационных углов при связи  $\text{N}'_3\text{H}'_9$ , позволяет по появлению интенсивного колебания с частотой

$1541\text{ см}^{-1}$  судить об образовании водородной связи  $\text{N}'_3\text{H}'_9\dots\text{N}_1$  в паре Ade-Thy. Образование другой водородной связи, а именно  $\text{O}'_{10}\dots\text{H}_{14}\text{N}_{10}$ , приводит к менее значительным изменениям частот колебаний структурных фрагментов, образующих водородную связь, – частота деформационного колебания 34a связи  $\text{N}_{10}\text{H}_{14}$  при образовании комплементарной пары повышается на  $25\text{ см}^{-1}$ , а частота валентного колебания  $\text{Q}(\text{C}'_4=\text{O}'_{10})$  (колебание 32t), напротив, понижается на  $32\text{ см}^{-1}$ .

Аналогично влияет водородная связь на величину смещения частот колебаний валентных связей  $\text{N}'_3\text{H}'_9$  и  $\text{N}_{10}\text{H}_{14}$  – это смещение составляет  $598\text{ см}^{-1}$  и  $202\text{ см}^{-1}$ . При этом интенсивность валентного колебания  $\text{q}(\text{N}'_3\text{H}'_9)$  Thy возрастает в ИК спектре в 31 раз.

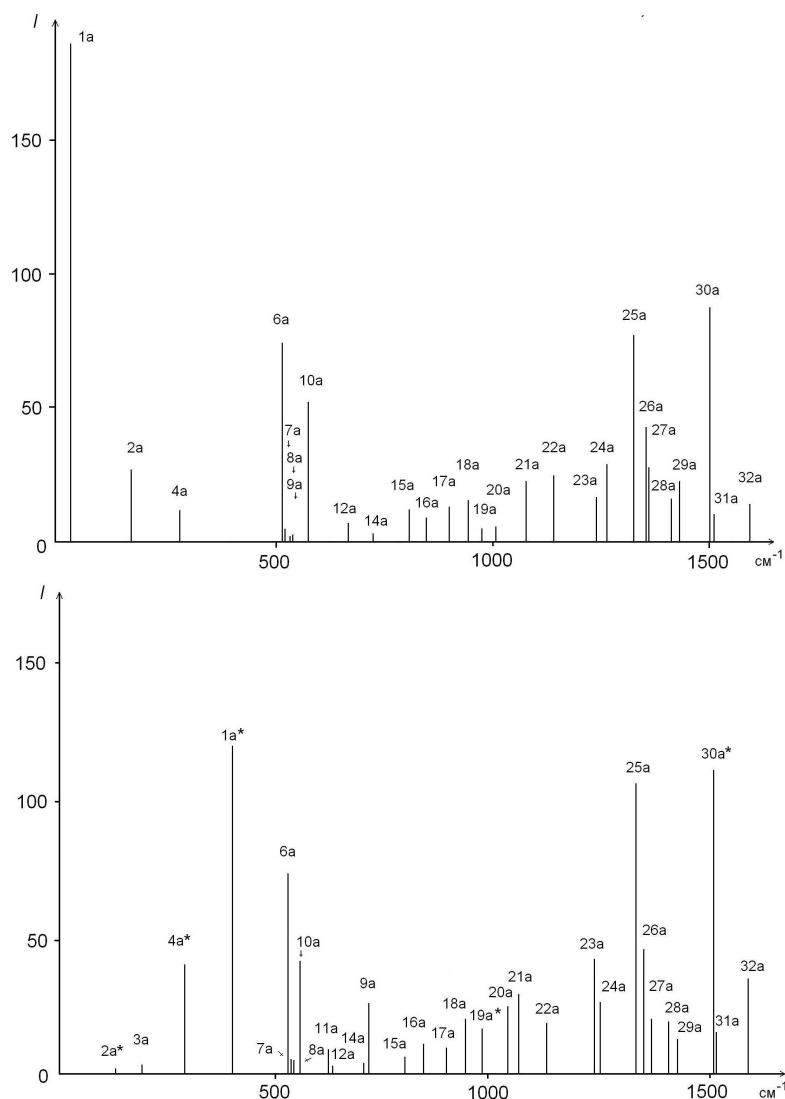


Рис. 3. Вычисленные ИК спектры Ade – изолированного (вверху) и в паре Ade-Тху (внизу).

**Выводы.** Основной причиной, позволяющей утверждать о большей чувствительности ИК спектров Ade и Thy к влиянию окружающей среды, в том числе водородных связей, по сравнению со спектрами КР является проявление в них неплоских колебаний связей структурных фрагментов, принимающих непосредственное

участие в образовании водородных связей. Значительное частотное смещение этих колебаний при образовании комплементарной пары в сочетании с сильной интенсивностью соответствующих полос поглощения приводит к существенному различию ИК спектров изолированных ОНК и пары.

#### Библиографический список

1. Szczepaniak K., Szczesniak M.M., Person W.B. // J. Phys. Chem. 2000. V.104 A. P. 3852-3863.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03. Gaussian Inc., Pittsburgh PA. 2003.
3. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Баранов В.И. // ЖСХ. 2010. Т.51. № 3. С. 474-482.
4. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Березин В.И., Баранов В.И. // ЖСХ. 2010. Т.51. № 5. С. 883-889.

#### EFFECT OF HYDROGEN BONDING ON THE IR SPECTRUM OF ADENINE-THYMINE COMPLEMENTARY PAIR

G.N. Ten, A.A. Yakovleva, V.I. Berezin  
Saratov State University

The calculation and analysis of the infrared spectrum of adenine-thymine complementary pair was studied in approximation B3LYP/6-311++G(d,p) approximation. The influence of hydrogen bonding on the frequency and intensity of the absorption bands of the pair compared in comparison with the spectra of isolated thymine and adenine molecules is shown.

**ЦИФРОВАЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ ФАЗОВАЯ МИКРОСКОПИЯ**

А.Ю.Абрамов, С.А.Савонин, О.В.Диков, О.А.Перепелицина, В.П.Рябухо

Саратовский государственный университет

*Абрамов Александр Юрьевич, аспирант**Савонин Сергей Александрович, аспирант**Диков Олег Викторович, аспирант**Перепелицына Ольга Александровна, к.ф.-м.н, доцент**Рябухо Владимир Петрович, д.ф.-м.н, профессор*

Рассматривается метод оптической голографической интерференционной микроскопии с записью цифровой голограммы и численной процедурой восстановления комплексного объектного волнового поля для пространственно высокоразрешающего анализа структуры фазовых микрообъектов. Обсуждаются возможности применения метода и результаты экспериментальных исследования процесса взаимной диффузии веществ в тонких прозрачных средах.

Микрообъекты, прозрачные для излучения оптического диапазона, широко распространены как в промышленности, так и в биомедицине. К ним относятся полимерные пленки, синтетические волокна, оптические кристаллы и микродетали, оптоволоконные изделия, биологические ткани, клетки и др. Такие объекты называют фазовыми, поскольку они изменяют (модулируют) фазу проходящего через них оптического поля [1-3]. Фазовые объекты в общем случае могут иметь трехмерное пространственное распределение показателя преломления  $n(x, y, z)$ , который определяется плотностью, температурой, концентрацией вещества и другими физическими параметрами объекта. При исследовании фазовых микрообъектов, как правило, требуется не только оценивать их геометрию, но и определять параметры их внутренней структуры с микронным и субмикронным разрешением. Эта задача практически нереализуема средствами классической микроскопии, поскольку в наблюдаемом обычном изображении фазовая модуляция объектной волны не проявляется.

Для визуализации пространственных фазовых возмущений используют интерференционные методы [1-3], в частности, интерференционную микроскопию [4,5] фазовых микроструктур. В этих методах пространственная фазовая модуляция проявляется в наблюдаемом изображении в системе интерференционных полос, пространственный период которых соответствует изменению фазы поля на  $2\pi$  рад. Предельные возможности классических микроскопических интерференционных систем связаны с ограниченным поперечным пространственным разрешением фазовых неоднородностей объекта при относительно больших градиентах этих фазовых возмущений. При исследовании объектов с пространственно сложной фазовой структурой также возникают проблемы с качественной и количественной интерпретацией формирующихся интерференционных картин со сложным рисунком полос. Эти проблемы только усиливаются при исследовании процессов изменения фазовой структуры таких объектов.

В настоящей работе показано, что перечисленные проблемы в значительной степени

преодолеваются при совместном использовании методов микроскопии, интерферометрии и оптической голографии в сочетании с высокоразрешающей цифровой фотографией. Совместное использование этих методов и технологий, как показывают результаты настоящей работы, предоставляет новые уникальные возможности в исследовании фазовых микрообъектов и микропроцессов, протекающих в таких объектах.

В оптической голографии [6] реализуется возможность записи и последующего восстановления оптического поля объекта с его пространственными распределениями комплексной амплитуды - и амплитуды и фазы этого поля. В методе цифровой голографии [7], в котором используется запись цифровой голограммы и процедура численного восстановления комплексной амплитуды объектного поля, реализуется возможность количественного восстановления фазовых пространственных распределений в объектной волне. Кроме этого, численные процедуры восстановления комплексных амплитуд полей позволяют реализовывать соответствующие процедуры интерференционного сравнения этих полей и формирования интерференционных картин, отображающих изменения фазовых распределений в объектном поле, происшедших в результате тех или иных процессов в исследуемом объекте. Таким образом, реализуется возможность наблюдения и количественного контроля динамики изменения объемных распределений различных физических параметров внутри прозрачных микрообъектов. В настоящей работе разработаны новые методы и схемные решения цифровой голографической фазовой микроскопии, а также программное обеспечение для процедуры численной обработки цифровых голограмм с целью восстановления комплексной амплитуды объектного поля и реализации принципа голографической интерферометрии.

**Схемные решения для цифрового голографического микроскопа**

Для записи оптической голограммы необходимо использование когерентной опорной волны, накладываемой на объектную волну [6]. В цифровой голографии [7] реализуется цифровая запись голограммы - картины интерференции объектной и

опорной волн, с помощью матричного фотоприемника с последующим восстановлением и преобразованием комплексной амплитуды объектного поля в численной форме с использованием компьютерных вычислений. Для записи цифровой голограммы возможны различные оптические схемные решения. Для реализации метода цифровой голографической микроскопии наиболее приемлемой считается схема записи голограммы сфокусированного изображения, когда в плоскости матричного фотоприемника формируется или полное изображение изучаемого объекта, или его отдельный фрагмент. Вместе с этим, для численного преобразования цифровой голограммы с практической точки зрения наиболее удобно использовать алгоритм быстрого преобразования Фурье. В настоящей работе для реализации метода цифровой голографической микроскопии предложена схема записи фурье-голограммы сфокусированного изображения объекта.

На рисунках 1 и 2 представлены два схемных решения для цифрового голографического фазового микроскопа (ЦГФМ). В обеих схемах, в отличие от известных решений [8-11], используется деление

исходного пучка не по амплитуде, а по волновому фронту, что существенно упрощает реализацию метода цифровой голографической микроскопии. В схеме 1 (рис. 1) пучок *He-Ne* лазера *LSR* коллимируется системой линз *L1-L2* и делится по волновому фронту на опорный и объектный пучки. Объектный пучок ослабляется нейтральным фильтром *F1*, проходит через исследуемый фазовый объект *C*. Микрообъектив *OB* формирует изображение исследуемого объекта в плоскости матрицы цифровой камеры *CMOS*. Ослабленный фильтром *F2*, опорный пучок проходит через линзу *LR*, испытывает отражения в системе зеркал *M1-M2*, и фокусируется в заднюю фокальную плоскость *FP* микрообъектива *OB*. Оба пучка, проходя через нейтральный фильтр *F3*, перекрываются под небольшим углом  $\theta$  в плоскости матрицы камеры *CMOS*.

В схеме 2 (рис. 2) используются два идентичных микрообъектива *OB1* и *OB2* в объектном и опорном каналах, что обеспечивает высокую стабильность системы в условиях внешних возмущений и простоту юстировки оптических элементов схемы.

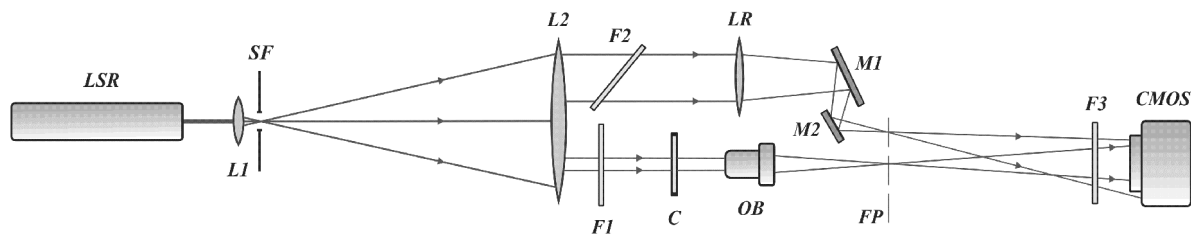


Рис. 1. Схема 1 цифрового голографического фазового микроскопа: *LSR* – *He-Ne* лазер; *SF* – пространственный фильтр; *L1-L2* – коллиматор; *F1,F2,F3* – нейтральные фильтры; *C* – исследуемый фазовый объект; *OB* – объектив; *LR* – линза; *M1,M2* – зеркала; *FP* – фокальная плоскость объектива; *CMOS* – цифровая фотокамера

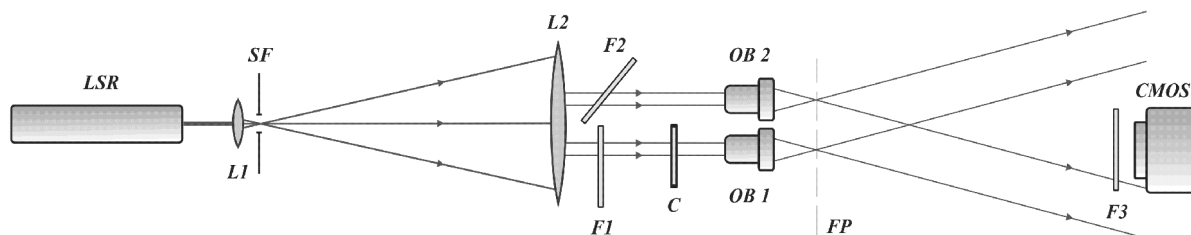


Рис. 2. Схема 2 цифрового голографического фазового микроскопа: *LSR* – *He-Ne* лазер; *SF* – пространственный фильтр; *L1-L2* – коллиматор; *F1,F2,F3* – нейтральные фильтры; *C* – исследуемый фазовый объект; *OB1,OB2* – идентичные микрообъективы; *FP* – фокальная плоскость микрообъективов; *CMOS* – цифровая фотокамера

Особенность записи голограммы сфокусированного изображения связана с формированием в плоскости записи поля с детерминированным фазовым распределением, обусловленным влиянием фокусирующего объектива. Для компенсации влияния этого фазового распределения с целью формирования голограммной интерференционной структуры с минимально возможной пространственной частотой опорная волна должна иметь приблизительно такое же фазовое распределение. В этом случае

интерференционные полосы голограммной структуры имеют почти эквидистантное расположение, аналогичное голограммной структуре фурье-голограммы. Использование пары идентичных объективов *OB1* и *OB2* обеспечивает уравнивание дополнительных фазовых распределений в опорном и объектном плечах микроскопа.

Наличие опорного пучка, когерентного объектному, позволяет производить запись голографического изображения, т.е. изображения, содержащего в себе информацию не только об

амплитуде объектного поля, но и об его фазе. В этом заключается принципиальное отличие голографической микроскопии от классической.

Особенность записи цифровых голограмм заключается в необходимости разрешения спекл-структуры изображения объекта и голограммной интерференционной структуры – системы несущих интерференционных полос, образованных наложением опорной волны на объектное поле. Пространственная частота интерференционной структуры  $f_s$  зависит и от угла  $\theta$  между опорной и объектной волнами, и от длины волны  $\lambda$ :

$$f_s = \frac{1}{d} = \frac{\sin \theta}{\lambda} \quad (1)$$

где  $d$  – пространственный период интерференционных полос.

Согласно теореме Котельникова [12], частота дискретизации – частота отсчетов – должна быть вдвое больше максимальной частоты, присутствующей в регистрируемом сигнале:

$$f_d \geq 2f_s \quad (2)$$

Максимальное значение частоты дискретизации определяется расстоянием между соседними пикселями  $\Delta x$  используемой цифровой матрицы:

$$f_d = \frac{1}{\Delta x} \quad (3)$$

Таким образом, из теоремы Котельникова следует основное условие записи цифровой голограммы, заключающееся в необходимости использования достаточно малых углов между опорным и объектным пучками:

$$\theta_{\max} \sim \frac{\lambda}{2\Delta x} \quad (4)$$

В наших экспериментах для записи цифровых голограмм использовалась камера с  $3.0 \text{ Mpx}$  сенсором, выполненным по технологии *CMOS*. Одиночный пиксель матрицы имеет размеры  $3.2 \times 3.2 \text{ }\mu\text{m}$ . Используя (4) можно оценить максимальную величину угла  $\theta$  между объектной и опорной

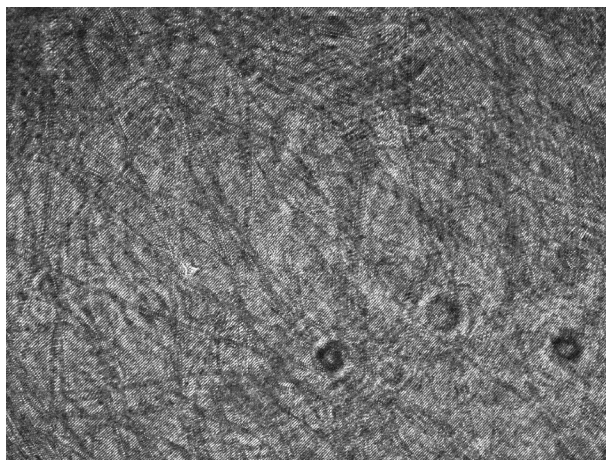


Рис.3. Цифровая голограмма

пространственный спектр голограммы подвергается процедуре пространственной фильтрации – выделяются пространственные

волнами при использовании *He-Ne* лазера с длиной волны  $\lambda = 0.63 \text{ мкм}$ ;  $\theta_{\max} \leq 5.6^\circ$ .

Сравнительная малость этого угла накладывает определенные ограничения на схемные решения для метода цифровой голографии и, в частности, метода голографической микроскопии.

#### Программа обработки цифровых голограмм

Разработанное прикладное программное обеспечение (ПО) позволяло реализовать процедуры численного восстановления комплексной амплитуды и интенсивности объектного поля в плоскости его изображения с записанной цифровой голограммы, а также последующий многоэкспозиционный интерференционный анализ динамики изменения изучаемого фазового объекта.

Принцип работы ПО заключается в следующем. Цифровая голограмма (рис. 3), как матрица распределения интенсивности  $I(x, y)$  в плоскости матричного сенсора камеры, подвергается дискретному фурье-преобразованию, которое определяется выражением:

$$U_D(\xi, \eta) = \sum_{x=0}^{M-1} \sum_{y=0}^{N-1} I(x, y) U_r(x, y) \exp\left(-i2\pi\left(\frac{x\xi}{M} + \frac{y\eta}{N}\right)\right) \quad (5)$$

где  $U_r(x, y)$  – комплексная амплитуда восстанавливаемого поля;  $\xi = 0, 1, 2, \dots, M-1$  и  $\eta = 0, 1, 2, \dots, N-1$ . В результате вычисляется фурье-массив  $U_D(\xi, \eta)$ , представляющий собой комплексный спектр пространственных частот голограммы. На рисунке 4 в качестве примера представлена картина распределения интенсивности этого спектра. На ней присутствуют четыре компоненты – изображение точечного опорного источника и дифракционное гало вокруг него в центре, а также распределения интенсивности пространственного спектра объектного и ему комплексно сопряженного полей.

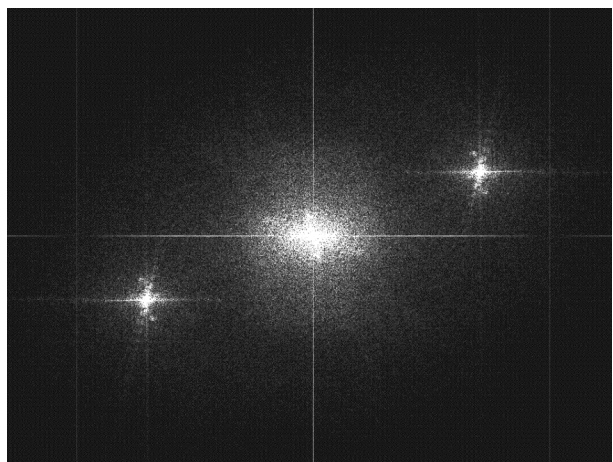


Рис.4. Спектр пространственных частот голограммы

частоты, соответствующие объектному полю (рис. 5). Выделенная (отфильтрованная) область пространственного спектра подвергается второму

фурье-преобразованию для восстановления комплексной амплитуды поля сфокусированного изображения объекта.

На рисунке 6 приведено восстановленное изображение пучка синтетических волокон

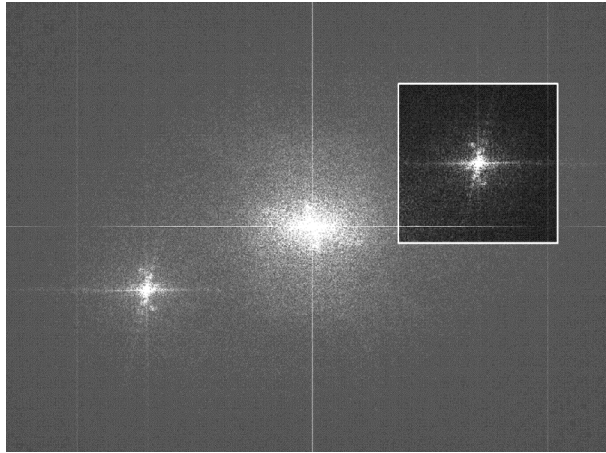


Рис.5. Пространственно частотная фильтрация голограммы

#### Цифровой голографический анализ процесса взаимодиффузии жидкостей с различным показателем преломления

Цифровая голография сохраняет главное преимущество классической оптической голографии – возможность восстановления комплексной амплитуды объектного поля. Это позволяет осуществлять фазовые интерференционные исследования контролируемого фазового объекта путем сложения или вычитания восстановленных объектных полей, соответствующих различным состояниям контролируемого объекта. Формируемая картина интерференционных полос – цифровая интерферограмма  $I_{if}(\xi, \eta)$  – отражает фазовые изменения объекта. Для формирования интерферограммы необходимо вычисление квадрата модуля суммы или разности комплексных амплитуд объектных полей, соответствующих различным состояниям микрообъекта:

$$I_{if}(\xi, \eta) = |U_2(\xi, \eta) - U_1(\xi, \eta)|^2 \quad (6)$$

где  $U_2(\xi, \eta)$  и  $U_1(\xi, \eta)$  – комплексные амплитуды объектных полей.

В настоящей работе методом цифровой голографической фазовой микроскопии было выполнено исследование кинетики взаимодиффузии в системе этиловый спирт-вода. Использовали ректифицированный этиловый спирт и дистиллированную воду в кювете толщиной 1 мм.

Для регистрации экспериментальных цифровых голограмм использовали цифровую CMOS-камеру для микроскопа DCM-300 (разрешение матрицы 2048×1536, размер пикселя 3.2×3.2 мкм). Величины показателей преломления жидкостей в индивидуальном состоянии определяли на рефрактометре ИРФ-22. Эксперименты проводили при 25°C и нормальном атмосферном давлении.

Методика проведения эксперимента состояла в следующем. Сначала кювету полностью заполняли

перхлорвинила, предоставленных Институтом наноструктур и биосистем СГУ. По данным электронной микроскопии диаметр волокна составляет примерно 1-2 мкм.



Рис.6. Восстановленное изображение синтетических волокон перхлорвинила

дистиллированной водой и записывали голограмму. Затем при помощи шприца осторожно откачивали воду из кюветы примерно до половины, и медленно, не допуская перемешивания жидкостей, заливали в кювету спирт. При этом границу между жидкостями позиционировали в центр поля зрения микроскопа – в центр матрицы камеры.

Цифровая камера работала в режиме непрерывного ввода кадров и велась запись файлов цифровых голограмм на жесткий диск компьютера. Накопленный массив экспериментальных данных подвергался численной обработке для формирования интерференционных картин, отражающих фазовые изменения в исследуемой системе в результате процесса взаимодиффузии.

#### Численная обработка цифровых голограмм

Взаимодиффузия жидкостей приводит к изменению пространственного распределения показателя преломления и, как следствие, к изменению фазового сдвига объектного поля с течением времени.

Для определения фазового распределения в системе «спирт-вода» производили, согласно (6), численное формирование цифровой интерферограммы  $I_{if}(\xi, \eta)$  интересующего диапазона изменения состояния системы. Для этого восстанавливали объектное поле с соответствующей голограммы и вычитали из него объектное поле, соответствующее голограмме кюветы полностью заполненной водой.

Вычисляемые таким образом цифровые интерферограммы (рис. 7) качественно и количественно отражают закономерности пространственного распределения показателя преломления образующегося раствора.

В области взаимодиффузии происходит непрерывное изменение показателя преломления (рис.7, а-в), что свидетельствует о формировании



растворов спирта в воде. С течением времени, наблюдается расширение зоны диффузии.

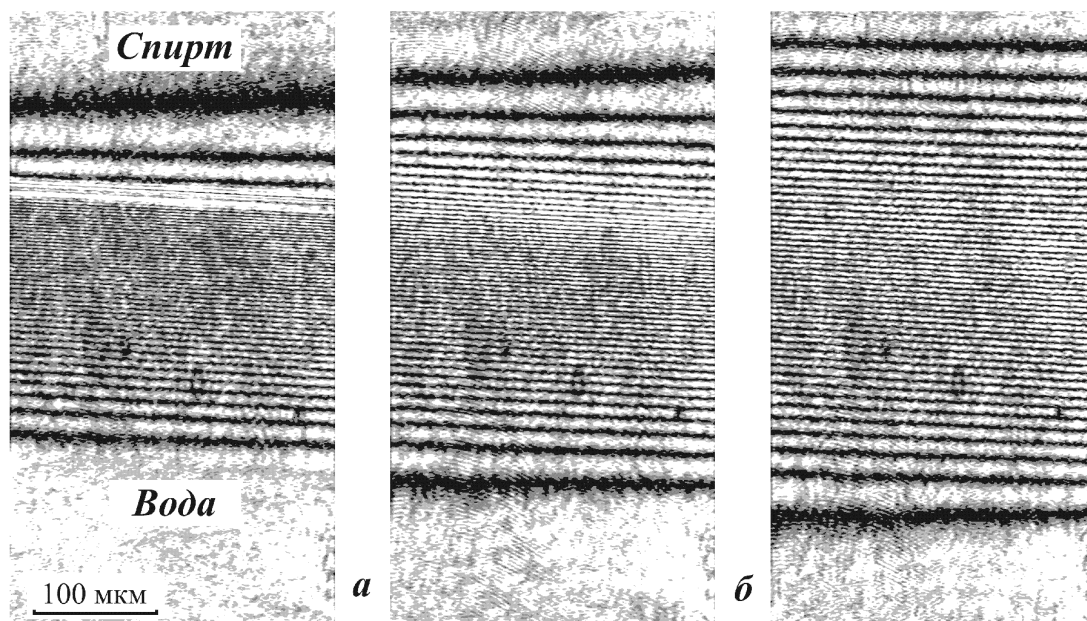


Рис.7

. Цифровые интерферограммы процесса диффузии в различные моменты времени: *а* – 58 с, *б* – 124 с, *в* – 202 с.

По полученным интерферограммам рассчитывали профиль распределения показателя преломления и концентрационный профиль (рис. 8), а также коэффициенты диффузии. Методика расчетов принципиально не отличалась от предложенных нами ранее в работах [13,14] при использовании классических (не голографических) лазерных интерферометров.

Поскольку показатель преломления данной системы линейно зависит от концентрации компонентов, то профиль изменения показателя преломления совпадает с концентрационным профилем. На рисунке 8 видно, что в зоне взаимодиффузии наблюдается непрерывное изменение концентрации и показателя преломления при переходе от одного компонента к другому, обусловленное образованием раствора. С течением времени размеры профиля распределения показателя преломления и концентрации увеличиваются.

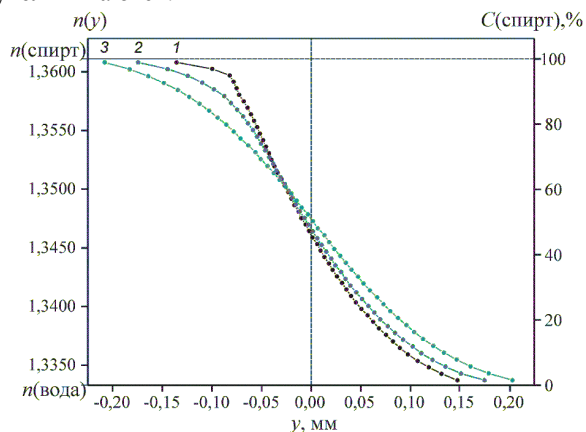


Рис.8. Распределение показателя преломления  $n(y)$  и концентрации этилового спирта  $C(y)$  в ходе процесса диффузии: 1 – время диффузии 58 с, 2 – 124 с, 3 – 202 с.

Расчет коэффициентов взаимодиффузии проводили с использованием теории Матано–

Больцмана [15]. Анализ экспериментальных данных показал, что коэффициенты взаимодиффузии данной системы лежат в пределах  $(2.5 \div 3) \cdot 10^{-7}$   $\text{см}^2/\text{с}$ .

#### Заключение

В рамках проведённых исследований разработаны новые схемные решения и программное обеспечение для цифровой голографической фазовой микроскопии прозрачных микрообъектов технического и биологического происхождения. Показана применимость этого нового типа микроскопии для интерференционных исследований фазовых микрообъектов и динамики протекания микропроцессов в них.

Цифровой голографический микроскоп позволяет исследовать особенности процессов растворения синтетических микро- и нановолокон, производить контроль параметров поверхностных микроструктур, выполнять неинвазивное исследование биологических тканей и отдельных клеток, может применяться для контроля процессов диффузии лекарственных средств в биологические ткани.

Перспективным является разработка и развитие промышленного варианта цифрового голографического фазового микроскопа и сопутствующего программного обеспечения, позволяющего решать задачи технологического и биомедицинского характера.

Авторы благодарны А.Б. Шиповской за плодотворные обсуждения результатов экспериментальных исследований. Работа выполнена при поддержке Аналитической ведомственной целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)”.

**Библиографический список**

1. Островский Ю.И., Бутусов М.М., Островская Г.В. Голографическая интерферометрия. – М.: Наука, 1977. – 336 с.
2. Бекетова А.К., Белозеров А.Ф., Березин А.Н. и др. Голографическая интерферометрия фазовых объектов. – Л.: Наука, 1979. – 232 с.
3. Вест Ч. Голографическая интерферометрия / Пер. с англ. – М.: Мир, 1982. – 504 с.
4. Розенберг Г.В. Интерференционная микроскопия // Успехи физических наук. – 1953. – Т.5. – № 4. – С.271-302.
5. Резчиков А.Ф., Рябухо В.П. Высокора разрешающие интерференционные методы контроля рельефа поверхности и слоистой структуры изделий точного машиностроения и приборостроения // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2010. – В.1. – С.68-79.
6. Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л. Оптическая голография / Пер с англ. – М.: Мир, 1973. – 421 с.
7. Schnars U., Jueptner W. Digital Holography. – Berlin: Springer-Verlag, 2004. – 164 p.
8. Shaked N.T., Newpher T.M., Ehlers M.D., et al. Parallel on-axis holographic phase microscopy of biological cells and unicellular microorganism dynamics // Applied Optics. 2010. – Vol.49. – №15. – P.2872-2878.
9. Marquet P., Rappaz B., Magistretti P. and et al. Digital holographic microscopy: a noninvasive contrast imaging technique allowing quantitative visualization of living cells with subwavelength axial accuracy // Optics letters. – 2005. – Vol.30. – №.5. – P.468-470.
10. Kemper B., von Bally G. Digital holographic microscopy for live cell applications and technical inspection // Applied Optics. – 2008. – Vol.47. – №4. – P.52-61.
11. Dubois F., Schockaert C., Callens N. and et al. Focus plane detection criteria in digital holography microscopy by amplitude analysis // Optics Express. 2006. – Vol.14. – №13. – P.5895-5908.
12. Басараб М.А., Зелкин Е.Г., Кравченко В.Ф. и др. Цифровая обработка сигналов на основе теоремы Уиттекера-Котельникова-Шеннона. – М.: Радиотехника, 2004. – 72 с.
13. Абрамов А.Ю., Рябухо В.П., Шиповская А.Б. Исследование процессов растворимости и диффузии полимера методом лазерной интерферометрии // Журнал технической физики, - 2007. - Т.77. - В.12. - С.45-50.
14. Абрамов А.Ю., Диков О.В., Рябухо В.П., Шиповская А.Б. Исследование процессов взаимодиффузии в тонких прозрачных средах методами лазерной интерферометрии // Компьютерная оптика. – 2008. – Т.32. – № 3. – С.253-264.
15. Малкин А.Я., Чалых А.Е. Диффузия и вязкость полимеров. Методы измерения. – М.: Химия, 1979. – 303 с.

**DIGITAL HOLOGRAPHIC PHASE MICROSCOPY**

A.Y. Abramov, S.A. Savonin, O.V. Dikov, O.A. Perepelitsina, V.P. Ryabukho

Saratov State University

The method of optical holographic interference microscopy with a record of a digital hologram and numerical procedure of reconstruction of a complex object wave field for a spatially high-resolution structure analysis of phase microobjects is considered. The possibilities of applying the method and results of an experimental investigation of the mutual diffusion of substances in the thin transparent medium are discussed.

ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛИ АТОМА БОРА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ  
МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ

Г.Е. Гарбер

Саратовский государственный университет

*Гарбер Георгий Евгеньевич*

Обобщается модель атома Бора на основе идей Фейнмана о необходимости дополнить физические величины стохастическими колебаниями относительно средних значений. Рассматривается статистическая совокупность большого числа частиц в форме облака электронного газа вместо одного электрона. Это дало возможность вычислить основные физические величины для электрона и найти доказательства для постулатов Бора вместо введения абстрактных операторов. Математический аппарат квантовой механики строится на основе физических предположений методами теории вероятностей. Такой подход позволяет придать квантово-механическому формализму физический смысл и включить общую теорию атома Бора в квантовую механику как равноправную часть. Предложенная Н. Бором в 1913 г. теория атома водорода объясняет с позиций квантовой механики планетарную модель атома Резерфорда. Основой теории являются два постулата Бора и правило квантования момента импульса электрона, которое фактически является третьим постулатом [1]. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными и имеют наглядный физический смысл. Теория Бора по-прежнему остается единственной физической теорией, допускающей наглядное и простое представление. Используемый в настоящее время формально-аксиоматический подход в квантовой механике имеет абстрактную математическую форму, не дает наглядного физического представления и малопонятен для начинающих физиков.

Поэтому желательно вернуться к модели атома Бора, используя простое и естественное обобщение, на основе методов теории вероятностей. Исходное положение нового подхода сформулировал Р. Фейнман: «Мы... не имеем права детально описывать поведение частиц в пространстве» [2]. Очевидно, что при таком подходе электрон рассматривается как локализованная в пространстве частица, материальная точка Ньютона (mass point), а не бесконечная волна. Поэтому в число основных физических параметров естественно включается величина вероятности [2]. Такой подход к анализу физических явлений является дальнейшим развитием идей Н. Бора, который первым указал на случайный характер движения элементарных частиц и сформулировал фундаментальный принцип *дополнительности* квантовой механики. Поэтому вместо регулярного движения частицы по единственной гладкой классической траектории, подобной планетной орбите, нужно рассматривать статистическую совокупность траекторий электронов, различающихся между собой малыми стохастическими, случайными отклонениями. Такие случайные отклонения от классической траектории объясняются дискретным, квантовым характером воздействия электромагнитного поля на электрон. Физические предположения Р. Фейнмана и Н. Бора позволяют получить естественное обобщение модели атома Бора, в которой вместо одной орбиты электрона рассматривается пучок траекторий, различающихся между собой малыми случайными отклонениями.

Для исследования статистической совокупности траекторий электронов необходимо использовать методы теории вероятностей, которые позволяют сгладить случайные колебания и вычислить среднюю траекторию электрона [3]. Рассматриваемая статистическая совокупность образует физический ансамбль, состоящий из эквивалентных частиц, которые движутся по мало

различающимся траекториям. С физической точки зрения этот ансамбль представляет собой электронный газ, с помощью которого полностью описывается движение электрона в атоме. Основная числовая характеристика электронного газа имеет следующее статистическое определение – это плотность распределения или плотность вероятности вектора координат электрона [3]:

$$f_S(x, y, z) = \frac{n_1(\Delta V)}{\Delta V \cdot N} \quad (1)$$

где  $n_1(\Delta V)$  - число электронов в объеме  $\Delta V$ ,  $(x, y, z)$  - координаты внутренней точки,  $N$  - общее число частиц.

Индекс  $S$  вводится в честь Э. Шрёдингера для обозначения плотности вероятности вектора координат частицы, занимающей центральное место в квантовой механике. Аналогичную функцию электронной плотности ввёл и успешно применил У. Кон [4]. Дополнительно Р. Фейнман обнаружил аналогию между основными формулами электродинамики и формулами гидродинамики [5, с. 236]. Это позволяет применить для описания движения электронного газа классическую теорию течения идеальной жидкости, в которой частицы не взаимодействуют между собой. Так же, как в гидродинамике, рассматриваются линии тока жидкости, полученные сглаживанием реальных траекторий частиц. Одномерная физическая модель движения электронного газа наглядно представляется в виде элементарной трубки тока бесконечно малого сечения  $dS$ . Статистический поток переносит энергию, приращение которой вдоль интервала движения  $dl$  пропорционально числу частиц в цилиндрическом объёме:

$$\Delta E = E_1 n_1(\Delta V) \quad (2)$$

где  $E_1$  – энергия единичного электрона,  $\Delta V = dl \cdot dS$  – объём цилиндрического интервала трубки тока.

Величина потока энергии через сечение  $dS$  может быть естественно названа потоком Борна  $S_B(E)$  (Born's Stream), который первым применил статистический подход в квантовой механике. Для вычисления величины элементарного потока энергии используется производная по направлению  $dl$  [6]:

$$S_B(E) = v \frac{dE}{dl} dS \quad (3)$$

$$\frac{dE}{dl} = \frac{\partial E}{\partial x} \cos \alpha + \frac{\partial E}{\partial y} \cos \beta + \frac{\partial E}{\partial z} \cos \gamma$$

где  $v$  – средняя скорость частицы;  $\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma$  – направляющие косинусы вектора  $dl$ .

Множество электронов движется по почти периодическим траекториям вокруг общего центра и образует статистическую совокупность точечных частиц, которую можно наглядно представить в виде электронного облака Борна.

Первым шагом решения задачи является получение условия равновесия энергетических потоков через замкнутую поверхность. Выделим внутри электронного облака бесконечно малый объем  $\Delta V$ , который в силу симметрии направлений движения имеет форму сферы. Радиальный поток энергии через замкнутую поверхность сферы вычисляется как сумма элементарных потоков (3) и выражается в виде поверхностного интеграла 1-го рода [6]

$$S_B(E) = v \iint_S \nabla E \cdot \bar{n} dS \quad (4)$$

где  $S$  – поверхность сферы, ограничивающей объем  $\Delta V$ ;  $\bar{n} = (\cos \alpha, \cos \beta, \cos \gamma)$  – единичный вектор нормали к поверхности сферы,  $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$  – оператор градиента.

Взаимодействие единичного электрона с  $EM$ -квантом (фотоном) дается фундаментальными уравнениями Эйнштейна, которые выражают закон сохранения энергии и импульса в квантовой механике

$$\frac{p_1^2}{2m} + U_1 = \varepsilon \cdot h\nu, p_1 = \hbar k \quad (5)$$

где  $p_1, U_1, m$  – импульс, потенциальная энергия и масса электрона;  $h\nu, \hbar k$  – энергия и импульс  $EM$ -кванта;  $k = 2\pi\nu/c$  – волновое число,  $\varepsilon = \pm$  – знак полной энергии электрона, который затем опускается.

Отметим, что волновые свойства электрона отсюда не следуют, а частота и длина волны относятся только к  $EM$ -кванту. Вместо индивидуальных физических характеристик одного электрона введём интегральные характеристики для статистического потока частиц, рассматриваемого как электронный газ. Метод вычисления параметров потока частиц основан на принципе усреднения и позволяет сгладить случайные отклонения индивидуальных измерений. Запишем уравнение баланса потоков энергии через поверхность сферы  $S$ , подставив вместо физических параметров единичного электрона соответствующие величины

для электронного потока. Полученное естественное обобщение энергетического уравнения Эйнштейна (5) выражает закон сохранения энергии для электронного потока

$$S_B(T_e) + S_B(U_e) = S_B(E_q) \quad (6)$$

где  $T_e, U_e$  – кинетическая и потенциальная энергия электронного потока,  $E_q$  – энергия, полученная электронным потоком от  $EM$ -квантов.

Приращение потока для каждого вида энергии (6) определяется в соответствии с (2), следующими статистическими выражениями:

$$\Delta T_e(\Delta V) = \frac{p_1^2}{2m} n_1(\Delta V), \Delta U_e(\Delta V) = U_1 n_1(\Delta V) \quad (7)$$

$$\Delta E_q(\Delta V) = h\nu n_1(\Delta V)$$

Подставим в основное уравнение энергетического баланса (6) числовые значения для соответствующих величин электронного потока. Эти величины являются характеристиками потоков кинетической, потенциальной и электромагнитной энергии, и выражаются через поверхностные интегралы согласно (4) [6]

$$\iint_S \nabla T_e \cdot \bar{n} dS + \iint_S \nabla U_e \cdot \bar{n} dS = \iint_S \nabla E_q \cdot \bar{n} dS \quad (8)$$

Следует отметить, что полученная интегральная форма основного энергетического уравнения (6) хорошо согласуется с предложенной Р. Фейнманом формой квантовой механики в виде функциональных интегралов по траекториям. Подставим в интегральное уравнение (8) значения приращений энергии из (7). Затем произведём усреднение, разделив обе части уравнения (8) на  $N$  и  $\Delta V$ , и введём плотность вероятности  $f_S$  (1). Применим формулу Остроградского – Гаусса [6] и выразим поверхностные интегралы (8) через тройные интегралы

$$\iiint_{\Delta V} \nabla^2 \left( \frac{p_1^2}{2m} f_S \right) dV + \iiint_{\Delta V} \nabla^2 (U_1 f_S) dV = \iiint_{\Delta V} \nabla^2 (h\nu f_S) dV \quad (9)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

где  $\nabla^2$  – оператор Лапласа.

Используя методы векторного анализа, перейдём к пределу при  $\Delta V \rightarrow 0$  и вычислим производные по объёму [6] в обеих частях уравнения (9). Окончательно после всех преобразований основного уравнения для потоков энергии (6) вместо интегрального уравнения (8) получаем следующее дифференциальное уравнение

$$\frac{p_1^2}{2m} \nabla^2 f_S + \nabla^2 (U_1 f_S) = \nabla^2 (h\nu f_S) \quad (10)$$

Рассмотрим второй член уравнения (10), выражающий усреднённую потенциальную энергию электронного потока. Так как потенциал одного электрона находится интегрированием сил электромагнитного поля вдоль пути движения, то он может рассматриваться как интеграл по параметру  $l$

(3). Интегрирование по параметру коммутирует с дифференциальными операторами уравнений Максвелла. Поэтому усредненная потенциальная энергия электронного потока подчиняется волновому уравнению электромагнитного поля

$$\nabla^2(U_1 f_s) = \frac{1}{c^2} U_1 \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \quad (11).$$

Аналогично рассматривается третий член уравнения (10), выражающий усредненную энергию электронного потока, полученную от *EM*-квантов. Приходим к заключению, что эта величина также подчиняется волновому уравнению электромагнитного поля. После преобразования уравнения (10) получаем линейное дифференциальное уравнение в частных производных для плотности вероятности

$$\frac{p_1^2}{2m} \nabla^2 f_s + \frac{1}{c^2} U_1 \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} h\nu \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \quad (12).$$

Полученное дифференциальное уравнение решается стандартным методом разделения переменных:  $f_s = f_{s1}(\mathbf{r})f_{s2}(t)$  [6]. После разделения переменных уравнение (12) распадается на два частных уравнения:

$$\frac{p_1^2}{2m} \frac{c^2}{h\nu - U_1(\bar{r})} \frac{\nabla^2 f_{s1}(\bar{r})}{f_{s1}(\bar{r})} = \lambda \quad (13)$$

$$\frac{d^2 f_{s2}(t)}{dt^2} - \lambda f_{s2}(t) = 0 \quad (14)$$

где  $\mathbf{r}(x, y, z)$  – вектор пространственных координат частицы,  $\lambda = \text{const}$ .

Так как рассматривается периодический процесс, то затухающие решения исключаются, и выбирается  $\lambda = -\omega^2$ . Решениями уравнения (14) являются гармонические функции  $f_{s2}(t) = \cos(\omega t), \sin(\omega t)$ . Подставим найденное значение  $\lambda$  в уравнение для пространственной функции (13) (циклическая частота  $\omega = 2\pi\nu$ ). Величину импульса  $p_1$  выразим из уравнения (5), сократим обе части уравнения (13) на  $k^2$  и опустим для простоты индекс. Таким образом, в результате прямого вычисления получен строгий математический вывод стационарного уравнения Шрёдингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 f_s(\bar{r}) + U(\bar{r}) f_s(\bar{r}) = E_n f_s(\bar{r}) \quad (15)$$

где  $E_n = h\nu$  – полная энергия электрона, полученная от *EM*-кванта.

Найденный математический вывод стационарного уравнения Шрёдингера основан на обобщённой планетарной модели атома Бора и физических предположениях Р. Фейнмана о движении электрона по траектории со случайными отклонениями. В курсах физики такой вывод отсутствует, его возможность отрицается, а уравнение Шрёдингера приводится без доказательства, как постулат [2, 7]. Доказано также, что волновая функция  $\psi$ , которая вводится абстрактно, как решение соответствующего уравнения, имеет точное физическое определение – это плотность вероятности вектора координат

частицы:  $\psi \equiv f_s(x, y, z)$ . Поэтому решение стационарного уравнения Шрёдингера надо рассматривать как действительную, а не комплексную функцию.

Для получения зависящего от времени полного уравнения Шрёдингера необходимо комплексифицировать уравнение (12). Представим решение частного уравнения (14) в комплексной форме, объединив найденные вещественные решения:  $f_{s2} = \exp(-i\omega t)$ . Подставим произведение частных решений (13), (14) в исходное уравнение (12), произведём дифференцирование и сократим на общий множитель  $k^2$ . Таким образом, вычисления позволяют получить полное уравнение Шрёдингера, которое является центральным уравнением квантовой механики, аналогично уравнению Лагранжа классической механики

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 f_s(\bar{r}, t) - U(\bar{r}) f_s(\bar{r}, t) = -i\hbar \frac{df_s(\bar{r}, t)}{dt} \quad (16).$$

Отметим, что уравнение Шрёдингера не является волновым уравнением. Полное уравнение Шрёдингера имеет, конечно, комплексное решение. Для решения физических задач следует использовать только действительную часть найденного решения  $\text{Re } f_s$  в качестве плотности вероятности. Как отметил Р. Фейнман: «В физике праведна и чтима только действительная часть комплексного числа» [8]. Применение квадрата модуля волновой функции  $|\psi|^2$  не обосновано и физического смысла не имеет.

Стационарному уравнению Шрёдингера можно придать операторную форму

$$\hat{H} f_s(\bar{r}) = E_n f_s(\bar{r}) \quad (17)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\bar{r}).$$

Оператор Гамильтона найден в результате вычислений, а не введён без доказательства. Решения операторного уравнения (17) – это собственные функции гамильтониана. Величина полной энергии электрона может принимать только те значения, которые являются собственными значениями гамильтониана. В теории линейных дифференциальных операторов установлено, что собственные значения  $E_n$  образуют дискретный спектр гамильтониана. Таким образом, доказан первый постулат Бора – энергия электрона может принимать только дискретный ряд значений  $E_n$  [1].

Вторым шагом решения задачи является получение условия равновесия потоков импульса для элементарной трубки тока. Вместо импульса единичного электрона, который имеет случайные значения, следует рассмотреть интегральную величину потока импульса электронного газа. Величина потока импульса определяется, аналогично потоку энергии (3) для трубки тока жидкости

$$S_B(P_e) = v \frac{dP_e}{dl} dS \quad (18)$$

где  $\Delta P_e(\Delta V) = p_1 n_1(\Delta V)$  – приращение величины потока импульса электронов в объёме  $\Delta V = \Delta l dS$ .

Естественным обобщением формулы Эйнштейна для импульса единичного электрона (5) является закон сохранения импульса для потока электронного газа. Уравнение баланса для потоков импульса через сечение  $dS$  имеет вид

$$S_B(P_e) = S_B(P_q) \quad (19)$$

где  $\Delta P_q(\Delta V) = \hbar k n_1(\Delta V)$  – величина потока импульса, полученного электронами от  $EM$ -квантов.

Определим квантовый импульс  $p$  как величину электронного потока импульса. Подставим в уравнение (19) величины потоков импульса для электронов и  $EM$ -квантов, которые выражаются через производную по направлению (18), и разделим обе части уравнения на число частиц  $N$ . Получим дифференциальное уравнение, определяющее квантовый импульс

$$\frac{dp}{dl} = \hbar k \frac{df_s}{dl} \quad (20)$$

где  $f_s(l)$  – плотность вероятности Шрёдингера.

В соответствии с уравнениями (5), величина импульса единичного электрона пропорциональна энергии, полученной при взаимодействии с  $EM$ -квантом. Следовательно, величина электронного потока импульса вычисляется как интеграл по параметру  $l$  от сил электромагнитного поля, аналогично потенциальной энергии (11). Так как интегрирование по параметру коммутирует с дифференциальными уравнениями Максвелла, то рассматриваемая величина квантового импульса  $p$  также подчиняется волновому уравнению электромагнитного поля

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial r^2} = \left( \frac{\partial}{\partial l} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} \right) \left( \frac{\partial}{\partial l} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} \right) p = 0 \quad (21).$$

Используем приведенное представление волнового уравнения в виде произведения дифференциальных операторов и выберем такое решение уравнения (21), которое удовлетворяет второму операторному множителю. Затем подставим найденное значение производной по направлению в левую часть уравнения (20)

$$-\frac{1}{c} \frac{\partial p}{\partial t} = \hbar k \frac{\partial f_s}{\partial l} \quad (22).$$

Снова применим метод разделения переменных и представим функции  $p$  и  $f_s$  в виде произведения. Подставим эти выражения в уравнение (22)

$$-\frac{1}{c} p_1(l) \frac{dp_2(t)}{dt} = \hbar k f_{s2}(t) \frac{df_{s1}(l)}{dl} \quad (23)$$

где  $p = p_1(l)p_2(t)$ ,  $f_s = f_{s1}(l)f_{s2}(t)$ .

Так как функция  $f_{s2}(t)$  была найдена ранее (14), то зависящий от времени множитель  $p_2(t)$  находится интегрированием. Так, для функции  $f_{s2}(t) = \sin(2\pi\nu t)$  зависящий от времени множитель квантового импульса равен  $p_2(t) = \cos(2\pi\nu t)$ . Подставив обе зависящие от времени функции в уравнение (23), сократив на волновое число  $k$  и опустив индексы, получим значение квантового импульса

$$p(l) = \hbar \frac{df_s(l)}{dl} = p_1 f_s(l), \hat{p} = \hbar \frac{d}{dl} \quad (24).$$

Таким образом, с помощью модели атома Бора определена одна из основных физических величин – квантовый импульс  $p$ . Квантовый импульс определён для электронного потока и является вещественной функцией, которая выражается через плотность вероятности Шрёдингера. Одновременно найдено среднее значение импульса единичного электрона  $p_1$ . Кроме того, путём вычислений получен оператор импульса, который в курсе физики [7] вводится искусственно, без физического объяснения, и используется вместо величины импульса. При этом удалось избежать излишней комплексификации для рассматриваемых физических величин.

Третьим шагом решения задачи является вычисление величины момента импульса для потока электронного газа. Наглядно планетарная модель атома Бора – это облако частиц в форме колец, вращающихся вокруг общего центра, подобных кольцам Сатурна. Следует рассмотреть движение по линиям тока жидкости, которые сглаживают случайные отклонения траекторий электронов и имеют форму окружности. Это позволяет ввести основную характеристику вращательного движения электронного газа – квантовый момент импульса.

Определим квантовый момент импульса  $L$  как величину потока момента импульса электронного газа. Для кольцевого электронного потока трубка тока жидкости имеет форму тора бесконечно малого сечения  $dS$ , и движение фактически происходит по окружности. Поэтому квантовый момент импульса вычисляется как произведение квантового импульса  $p$  (24) на радиус окружности:  $L = rp$ . После естественного перехода к полярным координатам получаем окончательную формулу для квантового момента импульса

$$L = r\hbar \frac{df_s(l)}{dl} = \hbar \frac{df_s(\varphi)}{d\varphi}, \hat{L} = \hbar \frac{d}{d\varphi} \quad (25)$$

где  $dl = rd\varphi$ .

Точное решение уравнения Шрёдингера приводится в курсах квантовой механики и в сферических координатах имеет вид:  $f_s(r) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ . Зависящее от полярного угла частное решение имеет простой вид, и квантовый момент импульса легко вычисляется:

$$L = \hbar n f_s(r, \theta, \varphi) = l_1 f_s(r, \theta, \varphi), \Phi(\varphi) = \sin(n\varphi + \varphi_0) \quad (26)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$  называется главным квантовым числом.

Таким образом, вычислена основная характеристика вращательного движения электронного газа – квантовый момент импульса  $L$ . Эта величина является действительной функцией и пропорциональна плотности вероятности Шрёдингера. Вычислен также оператор момента импульса (25), который обычно вводится формально, без физического объяснения. Наконец, найденная величина квантового момента импульса (26) позволяет определить средний момент импульса единичного электрона

$$l_1 = mvr = n\hbar \quad (27).$$

Таким образом, доказано правило квантования или третий постулат Бора.

Следует особо выделить решение задачи при  $n=0$ , которому не соответствует ни одна орбита Бора. В этом состоянии “электрон находится с ядром водорода в гораздо более тесной близости, образуя своего рода нейтральный дублет”, как предсказал ещё Э. Резерфорд в 1920 году. Проще говоря, это состояние представляет модель нейтрона Резерфорда.

Четвёртый шаг решения задачи – это вычисление условий равновесия для потоков энергии и импульса для кольцевого движения электронного газа на основе законов сохранения. Продолжим рассмотрение элементарной кольцевой трубки тока радиуса  $r$ . Применим основное уравнение энергетического баланса для потоков энергии через бесконечно малое сечение  $dS$  (6), используя определение величины потока энергии через производную по направлению (3). Приращение кинетической, потенциальной и электромагнитной энергии вычислим по статистическим формулам (7). Получим дифференциальное уравнение, которое является естественным обобщением уравнения Бернулли для потока электронного газа

$$\frac{d}{dl} \left( \frac{\rho v^2}{2} - U\rho_e - E_n f_s \right) = 0 \quad (28)$$

где  $\rho = Nm f_s$  – обычная плотность массы,  $\rho_e = N e f_s$  – электронная плотность заряда по У. Кону [4],  $e$  – заряд электрона.

Подставим в найденное уравнение (28) выражения плотности массы  $\rho$  и плотности заряда  $\rho_e$  через плотность вероятности Шрёдингера  $f_s$ ; после сокращения получим следующее уравнение для средних параметров единичного электрона

$$\frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} - E_n = 0 \quad (29)$$

где  $U(r) = e^2/r$  – кулоновская потенциальная энергия электрона.

Затем следует рассмотреть заполненный электронным газом объём  $\Delta V$ , который имеет массу  $\rho\Delta V$ . Траектория этого физического тела совпадает с линией тока жидкости, которая имеет форму окружности радиуса  $r$ , а вектор импульса равен  $\rho\Delta V v$ . Закон сохранения импульса для выделенного объёма электронного газа совпадает по форме со вторым законом Ньютона

$$d(\rho\Delta V \cdot \vec{v}) = \vec{F} dt \quad (30)$$

где  $\vec{F} dt$  – дифференциал импульса, который передается EM-квантами электронам.

Так как дифференциалы в обеих частях уравнения (30) имеют одинаковое направление вдоль радиуса вращения, отсюда следует равенство величин векторов

$$\rho\Delta V \cdot v d\varphi = \rho_e \Delta V \frac{e}{r^2} dt \quad (31)$$

где  $F_1 = e^2/r^2$  – величина кулоновской силы, действующей на единичный электрон.

Плотность массы и заряда выражается через плотность вероятности Шрёдингера  $f_s$  и производится сокращение. Получаем уравнение для средних параметров электрона, которое описывает движение единичного электрона по круговой орбите

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (32).$$

Таким образом, вычислив уравнения равновесия для величины потока энергии и потока импульса электронного газа, удалось получить средние значения основных параметров единичного электрона. Находим из уравнений (27), (29), (32) среднюю энергию электрона, радиус стационарной орбиты Бора и среднюю скорость электрона

$$E_n = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2}, r_n = \frac{n^2\hbar^2}{me^2}, v_n = \frac{e^2}{n\hbar} \quad (33)$$

где  $n = 1, 2, \dots$  – главное квантовое число.

Отметим, что величина полной энергии электрона  $E_n$  вычислена на основе модели атома Бора без уравнения Шрёдингера. Приведенная величина средней скорости электрона подтверждает, что электрон действительно движется по круговой орбите. При переходе из стационарного состояния с энергией  $E_n$  в состояние с энергией  $E_k$  излучается EM-квант с частотой  $\Delta\nu$ , которая в соответствии с уравнением (15) равна  $\Delta\nu = (E_n - E_k)/h$ . Это является доказательством второго постулата Бора.

Таким образом, все постулаты Бора доказаны и становятся в дальнейшем законами движения электрона в атоме. Стационарная орбита электрона является результатом сглаживания реальных траекторий и вычисляется путём усреднения по всей статистической совокупности. Радиус орбиты – это средняя величина или, по определению теории вероятностей, математическое ожидание [3] расстояния от центра вращения до траектории электрона. Случайные отклонения траектории от орбиты Бора можно оценить с помощью радиальной части плотности вероятности Шрёдингера  $f_s$ . Для радиальной функции точное решение имеет вид [7]

$$f_s = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi), R_n(r) = r_0^l \exp\left(-\frac{1}{2}r_0\right) L_{n-1}^{2l+1}(r_0) \quad (34)$$

где  $r_0 = 2r/(nr_1)$ ,  $r_1$  – радиус первой орбиты Бора,  $L_l(x)$  – обобщённый полином Лагерра [7],  $l = 0, 1, \dots, n-1$  – азимутальное квантовое число.

В соответствии с физической постановкой задачи, распределение вероятности полностью сосредоточено на интервале между соседними корнями полинома Лагерра. Область определения радиальной функции  $R(r)$  достаточно ограничить этим интервалом, а не рассматривать все значения аргумента от 0 до  $\infty$ , как это делается для волновой функции [7]. Нужный интервал выбирается из условия, что радиус Бора  $r_n$  находится во внутренней точке:  $r_{n1} < r_n < r_{n2}$ . Распределение вероятности имеет куполообразную форму, подобную нормальному распределению Гаусса [3], и нормируется только для выбранного интервала. Случайные отклонения траектории электрона от стационарной орбиты заключены между внешней и внутренней граничной окружностью, которые



соответствуют интервалу  $(r_{n1}, r_{n2})$ . Реальная траектория электрона содержится внутри найденного кольца, которое наглядно изображает состояние с квантовым уровнем энергии  $E_n$  (33). Орбита Бора содержит такие точки внутри кольца, в которых плотность распределения имеет максимальное значение. Рассмотрение кольцевого электронного потока вместо единичной орбиты позволяет оценить точность решения. График кругового движения электрона имеет форму пучка траекторий и может быть представлен системой колец, подобной кольцам Сатурна, вместо системы стационарных орбит.

Движение электрона в пространстве происходит внутри оболочки, ограниченной внешней и внутренней сферическими поверхностями, соответствующими тому же самому интервалу  $(r_{n1}, r_{n2})$ . Азимутальная часть плотности вероятности Шрёдингера  $f_S$  не зависит от радиальной части. Для азимутальной функции точное решение выражается через присоединённый полином Лежандра [7]

$$\Theta_{lm}(\theta) = P_l^m(\cos \theta) \quad (35)$$

где  $m$  – магнитное квантовое число.

Область определения азимутальной функции также разбивается на интервалы между соседними корнями присоединённого полинома Лежандра  $(\theta_j, \theta_{j+1})$ . Поэтому сферическая оболочка распадается на  $l$  цилиндрических колец, каждое из которых имеет форму тора с поперечным сечением прямоугольного вида  $(r_{n1}, r_{n2}) \times (\theta_j, \theta_{j+1})$ . Совокупность реальных пространственных траекторий имеет форму пучка возможных траекторий электрона, который содержится внутри найденного тора. Усреднение по всей совокупности траекторий даёт стационарную орбиту, которую можно определить как геометрическое место точек, соответствующих максимальной плотности распределения Шрёдингера. Поэтому угол наклона орбиты к плоскости эклиптики  $\theta_j$  вычисляется как экстремум азимутальной функции  $\Theta'(\theta_j) = 0$  (35). Таким образом, движение электрона в пространстве с равной вероятностью может происходить по одной из одинаковых орбит Бора радиуса  $r_n$  (33), которые различаются только углом наклона плоскости вращения к плоскости эклиптики  $\theta_j, j = 0, 1, \dots, n-1$ . Это физическое объяснение  $l$  – кратного вырождения состояния с энергетическим уровнем  $E_n$ .

Квантово-механический график реального движения электрона в атоме можно построить, взяв  $N$  одинаковых экземпляров материальной точки (mass point), представляющей электрон, и разместив их внутри пространственной сферической оболочки, соответствующей интервалу  $(r_{n1}, r_{n2})$ . Графическое изображение такого облака электронного газа должно быть построено с плотностью распределения, соответствующей точному решению уравнения Шрёдингера. Особенно наглядно может быть представлена двумерная проекция графика, в виде кольца, соответствующего главному квантовому числу  $n$ . Орбита Бора будет видна, как геометрическое место

максимальной концентрации точек. Такое построение сохраняет наглядность и физический смысл планетарной модели атома Бора. Детальное построение может быть выполнено с использованием компьютерных графических технологий и выходит за рамки настоящей работы.

Значение теории атома Бора в физике точно определил Э. Резерфорд: «Каждая наука проходит стадию, когда за недостаточной достоверностью знания ученые вынуждены заменять доказательства и опровержения верой и неверием». Достаточные доказательства для планетарной модели атома даёт подход Р. Фейнмана, который дополнил классические физические величины стохастическими, случайными отклонениями от средних значений. Он приводит к естественному, простому и наглядному обобщению планетарной модели атома, в котором рассматривается вращение статистического потока электронного газа вместо движения одного электрона по разрешённой орбите. Обобщённая модель атома Бора позволяет вычислить средние значения физических величин, а также дополнить их конечными границами случайных отклонений траектории электрона, которые имеют форму кольца или тора.

Сформулируем итоговые выводы. Получено простое и наглядное обобщение модели атома Бора на основе идей Р. Фейнмана о случайном характере движения электронов. Построена статистическая совокупность большого числа частиц, которая имеет форму вращающегося потока электронного газа, и позволяет вычислить значения физических величин методами теории вероятностей. На основе этого представления определена основная величина квантовой механики – плотность вероятности вектора координат частицы. С помощью метода энергетических потоков даётся точное математическое доказательство уравнения Шрёдингера, решением которого является эта плотность вероятности. Показано, что полная энергия электрона является собственным значением оператора Гамильтона, и поэтому может принимать только дискретный ряд значений. Аналогичными методами вычислены величина потока момента импульса и среднего момента импульса одного электрона на основе законов сохранения для электронного потока. Правило квантования Бора следует из сравнения найденной величины потока момента импульса с точным решением уравнения Шрёдингера. Все постулаты Бора доказаны методами квантовой механики. Завершает решение задачи вычисление средней энергии электрона и радиуса стационарной орбиты на основе обобщённого уравнения Бернулли и закона сохранения импульса для кольцевого электронного потока. Важно отметить, что в процессе обоснования обобщённой модели атома Бора вычислены основные операторы квантовой механики, которые обычно вводятся формально (аксиоматически). Показано, что реальные траектории движения электрона в атоме сосредоточены около стационарной орбиты Бора и



могут находиться только внутри определенного кольца или тора.

Важным следствием решения задачи о движении электрона внутри атома является отказ от волновой гипотезы де Бройля, согласно которой единичный

электрон равномерно распределён по пространству, подобно неограниченной волне. Как сказал Ньютон: «не должно принимать в природе иных причин сверх тех, которые истинны и достаточны для объяснения явлений».

Библиографический список

1. Мякишев Г.Я., Синяков А.З. Физика: Оптика. Квантовая физика. М., 2001.
2. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 8. М., 1965.
3. Вентцель Е.С. Теория вероятностей. М., 2003.
4. Kohn W. The Edge Electron Gas// Phys. Rev. Lett., 81, 3487 (1998).
5. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 7. М., 1966.
6. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике. М., 1986.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т.3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М., 2002.
8. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Вып. 2. М., 1966.

GENERALIZATION OF THE BOHR'S MODEL OF ATOM IN QUANTUM MECHANICS BY METHODS OF THEORY OF PROBABILITIES

G.E.Garber

Saratov State University

Bohr's model of atom is generalized on the basis of R. Feynman's ideas about the necessity of adding of physical values to stochastic oscillations around mean values. Statistical complex of large number of particles in the form of electron gas cloud instead of one electron is considered. This way gives a chance to calculate basic physical values for electron and to find proofs for the Bohr's postulates instead of artificial introduction of abstract operators. Mathematical apparatus of quantum mechanics is constructed on the basis of physical assumptions by methods of theory of probabilities. Such approach allows to give quantum mechanics formalism physical meaning and to include the general theory of the Bohr's atom in quantum mechanics as equal in rights part.

УДК 539.2:546.26

МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

О.А Терентьев, А.В. Дружинина

Саратовский государственный университет

*Терентьев Олег Анатольевич*, к. ф.-м. н, ассистент

*Дружинина Алена Владимировна*, студентка

Разработана методика изучения механических свойств (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль кручения, модуль сдвига) киральных углеродных нанотрубок (УНТ). Показана зависимость механических характеристик от длины и радиуса УНТ киральности (6,2) и (7,2).

Упругие свойства УНТ можно охарактеризовать несколькими параметрами: модулем Юнга, коэффициентом Пуассона, модулем кручения, а также модулем сдвига. Нужно отметить, что эти параметры используются для характеристики сплошных тел в классической механике. Однако в ряде работ [1-4] было показано, что аналог этих параметров, рассчитанных по аналогичным формулам, но для молекул, применим для описания упругих свойств наноструктур.

Для исследования параметров упругости использовалась УНТ киральностей (6,2) и (7,2) (рис. 1).

В процессе исследования упругих свойств трубок с такой структурой было рассмотрено большое количество способов фиксирования атомов кластера для выявления минимальной энергии деформированных трубок. Наилучшим вариантом, при котором атомная структура вследствие минимизации энергии остова оптимальна, является фиксирование каждого атома с незадействованной связью отдельно (совокупность таких атомов расположена на концах остова). Расчет параметров, характеризующих упругие свойства киральных УНТ, осуществлялся по следующим схемам.

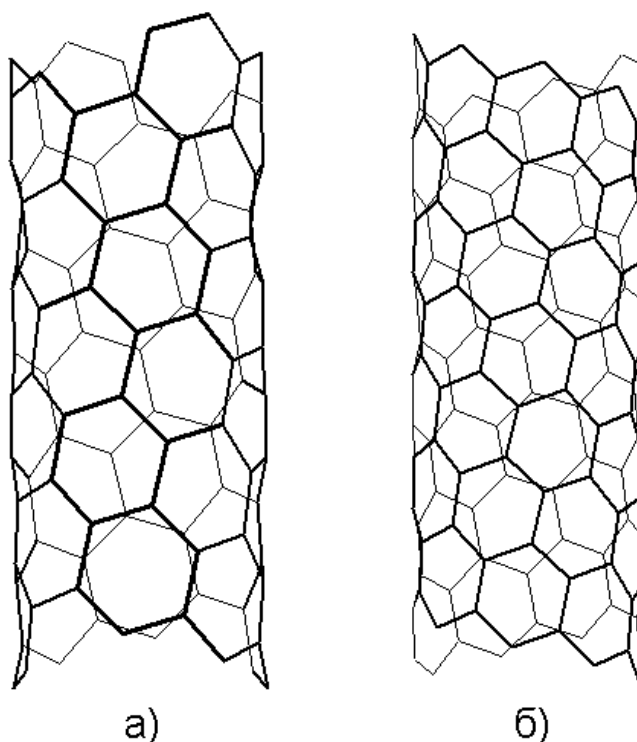


Рис. 1. Модели нанотрубок киральности (6,2) и (7,2)

Расчет модуля Юнга выполняется следующим образом:

1. С помощью пакета программ RING [2], используя трехпараметрический метод расчета координат, генерируется каркас киральной УНТ. Оптимизируя УНТ по координатам, выявляется атомная структура, соответствующая данному состоянию нанокластера. Рассчитывается полная энергия кластера в свободном состоянии. Длина такой трубки рассчитывается по формуле

$$L = Z_1 - Z_2 \quad (1)$$

где  $Z_1, Z_2$ - усредненные значения координат атомов, лежащих на каждом из концов нанотрубки и имеющих незадействованные связи (полагаем, что ось нанотрубки параллельна оси OZ).

2. Длина кластера увеличивается или уменьшается, затем фиксируется вышеописанным способом и оптимизируется. Вычисляется энергия растянутой или сжатой УНТ, ее длина (тем же способом, который описан выше). Модуль Юнга рассчитывается по формуле:

$$Y = \frac{F}{S} \cdot \frac{L}{\Delta L} \quad (2)$$

где  $F = 2 \cdot \Delta E / \Delta L$  – сила растяжения (сжатия) нанокластера, вычисленная по величине энергии упругого растяжения (сжатия)  $\Delta E$ ;  $L$ - длина недеформированного остова;  $\Delta L$  – разница между длинами недеформированной и деформированной УНТ;  $S$  – площадь поперечного сечения кольца шириной  $3,4 \text{ \AA}$  (расстояние между слоями в графите), содержащего периметр остова.

Расчет коэффициента Пуассона выполняется по формуле:

$$\mu = -\frac{\Delta R}{R} \cdot \frac{L}{\Delta L} \quad (3)$$

где  $R$  - радиус недеформированного кластера,  $\Delta R$ - величина, на которую изменился радиус после деформации.

Расчет модуля кручения производится следующим образом:

1. С помощью пакета программ RING рассчитываются координаты атомов нанотрубки трехпараметрическим методом, находится основное ее состояние путем минимизации энергии кластера. Рассчитывается длина и полная энергия в основном состоянии УНТ.

2. Трубка скручивается, то есть каждый слой атомов поворачивается пропорционально расстоянию до основания так, что концы трубки, в результате скручивания, смещены друг относительно друга на некоторый угол  $\varphi$ . Фиксируются атомы на концах каркаса, имеющие незадействованные связи. Путем оптимизации по координатам атомов каркаса рассчитывается полная энергия кластера в этом состоянии. Модуль кручения рассчитывается следующим образом:

$$f_{\Delta E} = \frac{2 \cdot \Delta E}{\varphi^2} \quad (4)$$

где  $\Delta E$  – разница энергий трубок в основном и скрученном состояниях.

Расчет модуля сдвига совершается по следующей схеме:

1. Расчет атомной структуры остова трехпараметрическим методом, ее оптимизацией по

координатам атомов каркаса. Рассчитывается полная энергия и длина кластера в основном состоянии.

2. Чтобы получить сдвиг, атомы на одном из оснований остова фиксируются, а остальные слои атомов сдвигаются, вследствие чего один из концов трубки сдвинут относительно другого на расстояние  $\Delta X$ . Схематично такой сдвиг изображен на рис. 2.

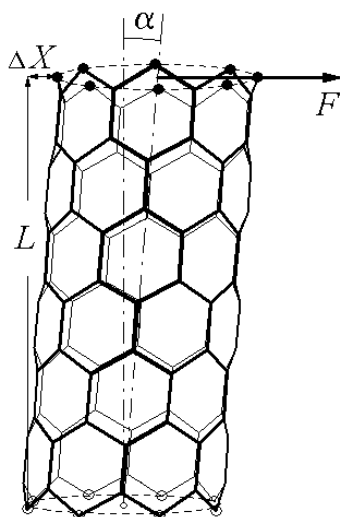


Рис. 2. Моделирование деформации сдвига нанотрубки. Здесь  $F$  – деформирующая сила,  $\Delta X$  – сдвиг верхнего основания под действием силы,  $\alpha$  – угол сдвига,  $L$  – длина нанотрубки

Смещение можно рассчитать следующим образом:  $\Delta X = \text{tg}(\alpha) \cdot L$ , где  $\alpha$  – угол сдвига,  $L$  – длина нанотрубки. Сила, под действием которой происходит смещение:

$$F = \frac{2 \cdot \Delta E}{\Delta L} \quad (5)$$

где  $\Delta L$  – разница между длинами недеформированной и деформированной УНТ,  $\Delta E$  – энергия деформации.

Расчет модуля сдвига осуществляется по формуле:

$$G = \frac{F}{S \cdot \text{tg} \alpha} \quad (6)$$

где  $S$  – площадь поперечного сечения кольца шириной  $3,4 \text{ \AA}$  (расстояние между слоями в графите), содержащего периметр нанотрубки.

С помощью вышеизложенной методики исследовались зависимости модуля Юнга  $Y$ , коэффициента Пуассона  $\mu$ , модуля кручения  $f$  и модуля сдвига  $G$  от длины и радиуса трубок киральности (6,2) и (7,2). Длину трубок увеличивали путем наращивания кольца из гексагонов. Для трубки киральности (6,2) полученные характеристики сведены в таблицу 1. Для трубки (7,2) данные сведены в таблицу 2.

Таблица 1

Изменение параметров упругости с ростом длины трубки киральности (6,2)

кол-во атомов	Диаметр, $\text{\AA}$	Длина, $\text{\AA}$	$Y$ , ТПа	$G$ , ТПа	$f$ , эВ/рад <sup>2</sup>	$\mu$
100	2,89	13,37	0,74	0,08	56,36	0,44
116	2,89	15,74	0,77	0,08	50,89	0,43
132	2,89	18,1	0,76	0,07	37,55	0,42

Таблица 2

Изменение параметров упругости с ростом длины трубки киральности (7,2)

Кол-во атомов	Диаметр, $\text{\AA}$	Длина, $\text{\AA}$	$Y$ , ТПа	$G$ , ТПа	$f$ , эВ/рад <sup>2</sup>	$\mu$
136	3,25	16,31	0,77	0,08	60,31	0,43
154	3,24	18,4	0,79	0,07	29,03	0,44
172	3,24	21	0,76	0,07	17,81	0,46

Как видно из таблицы 1 с ростом длины при постоянном диаметре киральной трубки все параметры, кроме модуля Юнга, уменьшаются. Из таблицы 2 следует что, модуль кручения также обнаружил уменьшение с ростом длины. Эти данные согласуются с данными для акиральных трубок, приведенными в работе [3]. Коэффициент Пуассона для трубки с большим диаметром (а именно для трубки киральности (7,2)) обнаружил тенденцию к увеличению с ростом длины трубки, хотя для трубки (6,2) наблюдался противоположный эффект. Коэффициент Пуассона хоть и показал различное поведение при росте длины УНТ разных диаметров, но его значения близки к значениям для акиральных УНТ, приведенных в работах [2,3]. Модуль Юнга для обеих исследуемых трубок выявил закономерность – при каждом последующем увеличении длины (путем наращивания кольца из гексагонов) он сначала увеличивался, а затем уменьшался. Значения модуля Юнга согласуются с выводами, сделанными относительно акиральных УНТ с подобным количеством атомов, где средняя величина модуля была  $0,7 \text{ ТПа}$ . Модуль сдвига для обеих трубок не обнаружил зависимости от длины, и примерно равен  $0,07 \div 0,08 \text{ ТПа}$ . Такое же поведение модуля сдвига было показано и для акиральных УНТ [1].

**Библиографический список**

1. Терентьев О.А., Осипов Д.В. // Вопросы прикладной физики. Изд-во Саратовского университета. 2008. № 15. Саратов. С.28-29.
2. Терентьев О.А. «Атомная структура и эмиссионная способность нерегулярных углеродных тубулярных нанокластеров», Диссертация на соискание ученой степени кандидата наук, Саратовский государственный ун-т, 2007.
3. Глухова О.Е., Терентьев О.А. // Физика твердого тела. 2006. Т.48. вып. 7. С.1329-1335.
4. Глухова О.Е. // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2009. Т.12. № 1. С.69-75.

**TECHNIQUE OF STUDYING THE MECHANICAL CHARACTERISTICS OF CHIRAL CARBON NANOTUBES**

Terentev O.A., Druzhinina A.V.  
Saratov State University

The technique of studying of mechanical properties (Young modulus Poisson's ratio, torsion module, shift module) of chirality carbon nanotubes (CCN) is developed. Dependence of mechanical characteristics from length and radius of CCN chirality (6,2) and (7,2) is shown.

Жюри студенческой научной конференции физического факультета Саратовского государственного университета отметило данную работу среди лучших и рекомендовало к опубликованию.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО–КОНДУКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА В СИСТЕМАХ МИКРОКАНАЛОВ

И. А. Ермолаев, В.С. Кошелев, С. В. Отпущенников

Саратовский государственный университет

Ермолаев Игорь Анатольевич, к.ф.-м.н. доцент кафедры прикладной физики

Кошелев Василий Сергеевич, д.т.н. профессор кафедры прикладной физики

Отпущенников Сергей Валерьевич, начальник отдела СТС ПРЦНИТ

Методом конечных элементов моделируется конвективно–кондуктивный теплообмен в системе параллельных щелевых микроканалов.

В настоящее время существует повышенный интерес к теплообмену в микросистемах, вызванный необходимостью охлаждения миниатюрных устройств различного назначения. На практике чаще используются способы воздушного охлаждения [1,2], но при мощных потоках тепла более эффективна теплоотдача в жидкости, протекающей через систему микроканалов.

Так, для охлаждения элементов электронного оборудования используются миниатюрные тепловые трубы, системы мини- и микроканалов с однофазными [1] и двухфазными течениями [5]. Типичная схема такой микроканальной структуры [4] представлена на рис.1. Здесь  $d$  – ширина микроканала,  $d_s$  – ширина теплопроводящей стенки канала,  $H$  – высота микроканала,  $q_w$  – плотность потока тепла от источника,  $a$  – размер внутренней области микроканальной структуры, где можно пренебречь теплоотдачей в окружающую среду через боковые стенки. В этой части системы микроканалов можно выделить характерную область решения.

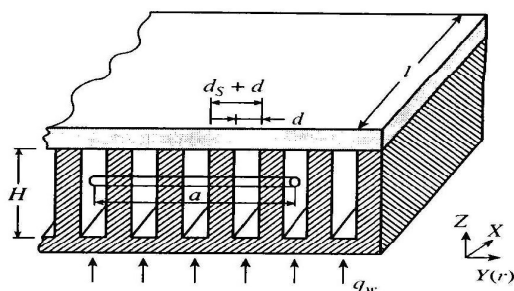


Рис 1. Схема типичной микроканальной структуры  
 Вследствие малых размеров микроканалов (10мкм < d < 1000мкм) чаще всего в них реализуется ламинарное течение, характеризуемое значениями безразмерных критериев Рейнольдса  $Re = \frac{ud}{\nu} < 10^3$ , и Пекле  $Pe = \frac{uDpc}{\lambda} = 10^2$ , где  $u$  – скорость,  $D$  – гидравлический диаметр,  $\nu$  – коэффициент кинематической вязкости,  $p$  – плотность,  $c$  – удельная теплоемкость,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности. Для описания такого течения капельных жидкостей в микроканалах с  $d > 40$ мкм применимы точные аналитические или численные решения уравнений Навье–Стокса с условиями

прилипания на твердой стенке [3].

Между тем теплообмен в микроканальных системах имеет ряд существенных отличий в сравнении с обычными каналами. Это связано с сопряженностью полей температуры в жидкости и каркасе, а также неоднородностью граничных условия на границе жидкость–стенка. Так в [3] делается вывод о необходимости решения трехмерной сопряженной задачи конвективно–кондуктивного теплообмена в системе микроканалов для получения полной картины тепловых режимов. Однако данный подход сопряжен с целым рядом вычислительных и иных трудностей и, в ряде случаев, может быть заменен более простым [4].

Целью данной работы являлось исследование теплообмена в системе микроканалов на основе более простых моделей. Учитывая симметрию относительно осей  $z$ – $x$  была выбрана расчетная область, соответствующая половине блока каналов, разделенного по оси симметрии. Результаты были получены путем численного решения двухмерного стационарного уравнение теплопереноса:

$$V \cdot c \cdot p \frac{\partial T}{\partial x} + U \cdot c \cdot p \frac{\partial T}{\partial y} = \lambda_{xx} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda_{yy} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + Q \quad (1)$$

Использовались следующие граничные условия:

$$X=0: T = T_0, V=const, U=0$$

$$Y=0: T=aTsp$$

$$X=L: dT/dy=0,$$

на твердых внутренних границах  $dT/dx=0, V=0$ .

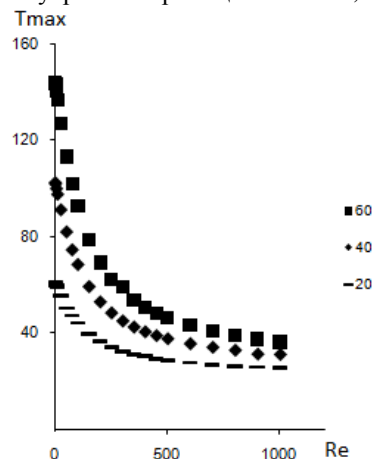


Рис 2. Зависимость максимальной температуры каркаса от числа Re для q=20, 40, 60 kW/m<sup>2</sup>

Уравнение (1) решалось методом конечных элементов Галеркина, температура аппроксимировалась линейной комбинацией функций формы на линейных треугольных конечных элементах. Расчёты проводились на неоднородной конечно-элементной сетке. Поток тепла был выражен через объёмные источники  $\frac{q \cdot S}{V} = Q$ , где  $q$  – плотность теплового потока,  $S$  – площадь поверхности, на которой он распределен,  $V$  – объём элементов каркаса. Вычислительный эксперимент проводился в интервале значений числа

Рейнольдса  $0 < Re < 10^3$ , потоки тепла варьировались от 20 до 60 kW/m<sup>2</sup>.

На рис.2 показана зависимость максимальной температуры каркаса  $T_{max}$  от числа Re и плотности потока тепла. Следует отметить максимальный рост величины  $T_{max}$  с ростом теплового потока при  $Re=0$ . При увеличении интенсивности внешнего течения до Re порядка  $10^3$  зависимость  $T_{max}(q)$  становится незначительной и, при дальнейшем росте критерия Re (если это возможно), стремится к некоторому постоянному значению.

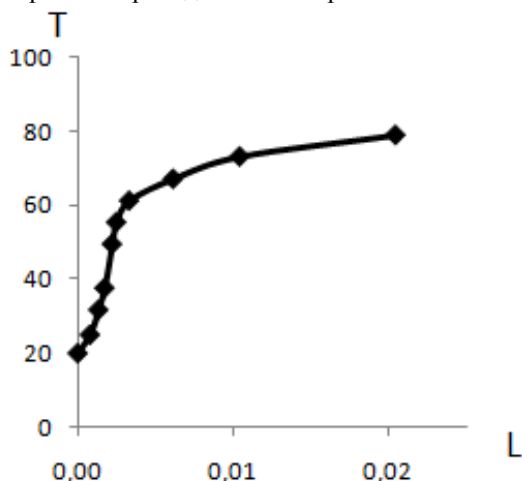


Рис 3. Распределение температуры охладителя по длине центрального канала при Re = 150.

Распределение температуры по оси центрального канала показано на рис.3. Можно отметить значительный рост температуры жидкости на начальном участке микроканала (во входной камере) до L порядка 0,004. Далее температура жидкости на основном участке микроканала увеличивается с меньшей интенсивностью и мало отличается от температуры охладителя в выходной камере.

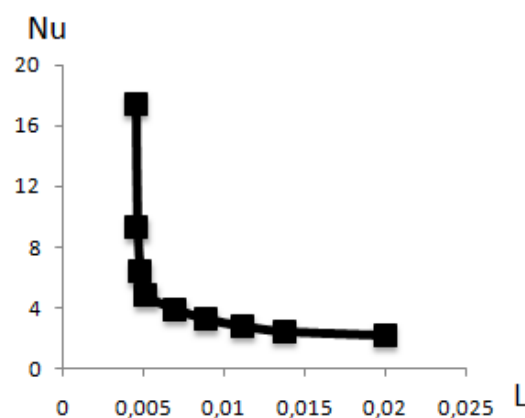


Рис 4. Распределение числа Нуссельта по длине центрального канала, Re=580.

На рис 4. представлено распределение чисел

Библиографический список:

1. Hetsroni G., Mosyak A., Segal Z., Ziskind G. A uniform temperature heat sink for cooling of electronic devices // International Journal of Heat and Mass Transfer, 2002, vol. 45, P.3275-3286
2. Hetsroni G., Mosyak A., and Segal Z. Nonuniform Temperature Distribution in Electronic Devices Cooled by Flow in Parallel Microchannels // IEEE transactions on components and packaging technologies, 2001, vol. 24, №1, P.16-23
3. Артемов В.И., Леонтьев А.И., Поляков А.Ф. Численное моделирование конвективно-кондуктивного теплообмена в блоке прямоугольных микроканалов // Теплофизика высоких температур, 2005, том 43, №4 с. 580-593
4. Леонтьев А.И., Поляков А.Ф. Постановка и решение задачи о конвективно-кондуктивном теплообмене в блоке щелевых микроканалов при однородной температуре каркаса //Теплофизика высоких температур, 2002, том40, №4, с. 623-632
5. Чиннов Е.А., Кабов О.А. Двухфазные течения в трубах и капиллярных каналах //Теплофизика высоких температур, 2006, том 44, №5, с. 777-795

MODELING OF CONVECTIVE-CONDUCTIVE HEAT TRANSFER IN MICROCHANNEL SYSTEMS

I.A. Ermolaev, V.S. Koshelev, S.V. Otpushennikov

Saratov State University

Finite-element method is modeled convective-conductive heat transfer in a system of parallel slotted microchannels.

## ДОЛГОВЕЧНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ

Скапцов А.А., Кошелев В.С.

Саратовский государственный университет

*Скапцов Александр Александрович*, к.т.н., доцент кафедры прикладной физики*Кошелев Василий Сергеевич*, д.т.н., профессор кафедры прикладной физики

Представлены основные методы и результаты исследования долговечности и надёжности электронных приборов.

Развитие направления исследований по надёжности и долговечности современных электронных приборов потребовало поставить и решить ряд новых физико-математических задач на стыке термодинамики необратимых процессов, механики упругого и пластического деформирования сплошных сред, физики металлов и сплавов, а также сложного тепло и массообмена [1].

Существенный прогресс в понимании физических механизмов деградации и разрушения электровакуумных материалов в условиях эксплуатации, характерных для непрерывных и циклических режимов электровакуумных приборов (ЭВП), был достигнут при изучении их одновременно на двух взаимно дополняющих друг друга макроскопическом и микроскопическом уровнях.

С макроскопической точки зрения деградационные процессы проявляют себя как явления пластического течения материалов, образование микропор и микротрещин в трёхмерных полях распределения температур и механических напряжений. Полная математическая модель таких явлений включает, по необходимости, комплекс взаимосвязанных математических задач, что приводит к необходимости многоэтапного их решения.

Первый этап заключается в постановке и решении задач сложного теплообмена и формулировке физически корректных краевых задач ползучести в конструктивных узлах ЭВП, состоящих из десятков и сотен разнородных элементов, геометрические размеры каждого из которых в разных направлениях отличались на несколько порядков, а зоны пластического деформирования концентрировались вблизи мест межэлементных соединений.

Для анализа температурных полей и напряжений в таких системах наиболее эффективным оказался метод эквивалентных схем в приложении к тепловым процессам. Использование такого подхода позволило детально исследовать особенности

распределения температур и напряжений в типовых катодных узлах ЭВП и электронных пушках с низковольтным управлением.

На втором этапе – решении краевой задачи ползучести в областях стыка разнородных элементов конструкции ЭВП ключевой математической моделью явилась модель накопления пластической деформации на границах раздела элементов в условиях периодического разогрева. Она представляет собой нелинейную систему кинетических уравнений рекуррентного типа для произвольного цикла разогрева. При определённом наборе конструктивных и теплофизических параметров такие системы обладают как устойчивыми, так и неустойчивыми решениями, приводящими к прогрессирующему формоизменению конструктивных элементов. Анализ спектров таких решений показал существование гармоник с непрерывным удвоением их периодов, что позволило дать физическое объяснение явления формоизменения в рамках теории бифуркаций. В результате были получены критерии устойчивости и предложены технические решения, обеспечивающие повышенную долговечность катодных узлов СВЧ и внедрение в практику разработок надёжных ЭВП.

Третий этап – физическое обоснование математических критериев разрушения – необходим как для определения срока службы ЭВП, так и для нахождения эффективных способов испытаний ЭВП на долговечность. В этом плане теоретически и экспериментально исследовались области применимости двух физических критериев разрушения – существования предельно допустимой пластической деформации и предельной концентрации точечных дефектов (вакансий) в кристаллической решётке электровакуумных материалов. Это позволило найти оптимальные соотношения параметров формы испытательного термоцикла, обеспечивающие существенное сокращение времени испытаний ЭВП на долговечность.

## Библиографический список

1. Кошелев В.С. Термомеханические процессы в ИЭТ. Саратов. Издательство Саратовского университета. 1994.

## LASTING OF THE ELECTRONIC DEVICES

A.A. Scaptzov, V.S. Koshelev

Saratov State University

The basic methods and results of investigation of the electronic devices lasting and reliability are presented.

Публикацию этой статьи редакция сборника посвящает десятой годовщине преждевременной смерти Александра Александровича Скапцова, не успевшего опубликовать её при жизни...

## ИЗМЕНЕНИЯ В ОРГАНАХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ ПРИ ВВЕДЕНИИ МАГНИТОУПРАВЛЯЕМЫХ МИКРОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА И КОБАЛЬТА

М.В.Куликова, Н.А.Наволокин

Саратовский государственный университет

Куликова Мария Владимировна, студентка, mmcc@mail.ru

Наволокин Никита Александрович, студент, navolokin1@rambler.ru

В работе исследовано токсическое влияние микрочастиц железа и кобальта на органы лабораторных животных.

Развитие нанобиотехнологий привело к возникновению новой области медицины – наноонкологии. В настоящее время наиболее перспективными считаются использование наночастиц (НЧ) в диагностике в качестве контрастного вещества для магнито-резонансной томографии (МРТ) и разработка магнитоуправляемых систем НЧ для целевой доставки противоопухолевых препаратов к канцерогенным образованиям [1, 2], для локальной радиотерапии, а также магнитной и лазерной гипертермии [3].

Однако остаются малоизученными факторы потенциальной токсичности НЧ, связанные с высокой реакционной способностью, большой удельной поверхностью и высоким химическим потенциалом, что приводит к катализу свободных радикалов и повреждению биообъектов [4].

Актуальным является вопрос изучения влияния НЧ, микрочастиц и коллоидных растворов металлов на живые организмы для выявления наиболее безопасного и эффективного вида частиц для последующего применения их в медицине.

**Цель:** Изучить морфологические изменения в органах лабораторных животных при введении микрочастиц Fe и Fe/Co.

**Материалы и методы:** микрочастицы Fe и Fe/Co (средний диаметр 1 мкм.), 8 белых беспородных крыс самцов, 33 мыши-самца, перевиваемая опухоль рака печени крысы, патоморфологические методы.

**Дизайн эксперимента:** в I серии каждая из 6 мышей получила по одной внутримышечной инъекции в каждое бедро, суммарная доза – 7,4 мг/кг; животные выводились из эксперимента через 2 часа.

Во II серии каждая из 6 мышей получила однократно перорально 7 мг/кг. 2 крысы получили 3 мг/кг раствора микрочастиц Fe/Co и 2 крысы получили 3 мг/кг раствора микрочастиц Fe; животные выводились из эксперимента через 1 сутки.

В III серии эксперимента каждая крыса получала перорально в течении 5-ти дней 500 мг/кг раствора, мыши были разделены на три группы по 7 мышей и получали 250 мкг/кг, 500 мкг/кг, 1000 мкг/кг соответственно. Животные выводились из эксперимента на 6-е сутки.

**Результаты:** При обсуждении результатов лабораторных испытаний, для увеличения объективности оценки структурных изменений, возникающих при введении микрочастиц Fe и Fe/Co в органах лабораторных животных, был введён органомерический показатель  $K$ , равный отношению массы животного к массе органа.

В I серии эксперимента были получены следующие результаты: не было обнаружено скоплений микрочастиц в месте инъекции, изменений во внутренних органах также не обнаружено.

Таблица 1. Изменение размеров органов при внутримышечном введении микрочастиц Fe и Fe/Co крысам

Вид частиц	$K$ (селезенка)	$K$ (почка)	$K$ (печень)
Fe	127	193	17
Fe/Co	83	134	17

Таблица 2. Изменение размеров органов при однократном пероральном введении микрочастиц Fe и Fe/Co мышам

Вид частиц	$K$ (селезенка)	$K$ (почка)	$K$ (печень)
Fe	140	106	14
Fe/Co	128	91	13

Во II серии эксперимента в печени и в почках обнаружена жировая инфильтрация.

Таблица 3. Изменение размеров органов при многократном пероральном введении микрочастиц Fe мышам

Дозировка	250	500	1000
	мкг/кг	мкг/кг	мкг/кг
$K$ (селезенка)	137	119	106
$K$ (почка)	103	116	113
$K$ (печень)	19	19	20

**Выводы:** макроскопические изменения во внутренних органах зависят от химического состава, дозы и метода введения микрочастиц.

Авторы выражают благодарность своим научным руководителям: проф. Г. Н. Масляковой, асс. Л. В. Сулеймановой (Саратовский Государственный Медицинский университет), проф. Кочубею В. И., доц. Медведеву Б. А. (Саратовский Государственный Университет).



**Библиографический список**

1. Галанов А. И., Юрмазова Т. А., Савельев Г. Г. // «Разработка магнитоуправляемой системы для доставки химиопрепаратов на основе наноразмерных частиц железа», Сибирский Онкологический Журнал №3(27), 2008
2. Першина А. Г., Сазонов А. Э., Мильто И. В. // «Использование магнитных наночастиц в биомедицине», Бюллетень сибирской медицины, №2, 2008
3. R. Hergt, S. Dutz, R. Müller, M. Zeisberger // «Magnetic particle hyperthermia: nanoparticle magnetism and materials development for cancer therapy», Journal of Physics: Condensed Matter 18 (2006)
4. X-H. Peng, X. Qian, H. Mao // «Targeted magnetic iron oxide nanoparticles for tumor imaging and therapy», International Journal of Nanomedicine 3(3) 311-321, 2008

**CHANGES IN THE ORGANS OF LABORATORY ANIMALS AFTER INTRODUCTION OF  
MAGNETICALLY GUIDED MICROPARTICLES OF IRON AND COBALT**

M.Kulikova, N.Navolokin  
Saratov State University

The article investigates toxicity of iron and cobalt microparticles in the laboratory animals organs.

Жюри студенческой научной конференции физического факультета Саратовского государственного университета отметило данную работу среди лучших и рекомендовало к опубликованию.

## ПАМЯТКА АВТОРАМ

## К публикации принимаются статьи по всем разделам физики

**В редакцию представляются**

- бумажный носитель (бумага белая А4) - 1 экз.;
- электронная копия;
- разрешительный документ на открытое опубликование.

**Правила оформления( не оформленные статьи, не принимаются к рассмотрению):***Структура статьи.*

Заголовок; аннотация на русском (английском) языке; содержание статьи, включая таблицы, рисунки, на русском (английском) языке; библиографический список; название статьи, фамилия автора(ов)), название организации(й), аннотация - все на английском (русском) языке.

Текст представляется в формате M. Word v.6.0 – 7.0; интервал - одинарный; шрифт - Times New Roman Cyt., 14 пт; размер полей: верхнего 2 см, нижнего 2 см, левого 2,5 см, правого 2 см; абзацы - отступом в 0,5 см.

*Заголовок.*

Первая строка – индекс УДК (для статей на русском языке), выровненный по **правому** краю текста; вторая строка – заголовок полужирными строчными буквами без переносов, размещенный по центру текста;

с третьей строки – перечень авторов (имя, отчество, фамилия полностью) с указанием уч. степени, должности, места работы, адреса эл. почты, дом. и раб. телефонов.

*Обозначения и формулы*

Латинские обозначения ( $P$ ,  $I$ ,  $W$  и т.д.) выполняются *курсивом*, названия функций ( $\sin$ ,  $\cos$ , и т.д.), греческие буквы - обычным (прямым) шрифтом ( $\beta$ ,  $\lambda$ ,  $\alpha$ ); обозначения векторов полужирным шрифтом (без верхнего обозначения,  $W$ ,  $a$ ); номера кривых в рисунках даются *курсивом* ( $I$ ,  $2$ ); русский текст и цифры в верхнем и нижнем индексах - прямым шрифтом ( $W_{\text{вых}}$ ,  $L^2$ ).

Формулы и греческие символы набираются только в редакторе формул Equation 2.0, 3.0.

Ширина строки формулы – до 8 см, в особых случаях – 16 см.

*Ссылки.*

Ссылки на формулы и таблицы даются в круглых скобках (\*.\*); формулы, на которые имеются ссылки в тексте, нумеруются в порядке их появления в тексте цифрой, заключенной в круглые скобки (\*.\*), по правому краю границы текста, выносятся отдельной строкой и располагаются по центру текста.

В тексте допустимо расположение только однострочных формул, не имеющих нумераций.

Ссылки на источники даются в квадратных скобках [\*].

*Рисунки.*

Каждый рисунок содержится в отдельном файле формата bmp, jpg, wmf, psx (сохраненные в монохромном режиме). Размеры рисунков: простые ненасыщенные - ширина 8 см., сложные до 16 см. Рисунки даются только черно-белыми.

В оформлении рисунков применяются: латинские обозначения ( $P$ ,  $I$ ,  $W$  и т.д.) - *курсивом*; названия функций ( $\sin$ ,  $\cos$ , и т.д.), греческие буквы - прямым шрифтом, номера кривых - *курсивом*; обозначения векторов полужирным шрифтом (без верхнего обозначения).

*Фотографии*

Фотографии - черно-белые, в отдельных файлах bmp, jpg, wmf, psx (сохраненные в монохромном или 16-цветном режиме). Размеры рисунков-фотографий: простые - шириной 8 см., сложные до 16 см.

*Таблицы*

Размеры таблиц - ширина 8 см., большие - до 16 см. Правила оформления обозначений те же, как и для формул.

*Библиография*

В библиографическом списке нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте. Пример правильного оформления показан в образце на следующей странице.

**Условия опубликования в сборнике:**

- публикации платные;
- стоимость 1 м.п.стр. А4 - 3 у.е. по 25% ежемесячно или разом;
- оплата производится в течение недели со дня получения уведомления редколлегии о принятии статьи к опубликованию;
- редколлегия подтверждает факт оплаты в течение недели со дня получения перевода;
- материалы статьи направлять в адрес редколлегии: г. Саратов, ул. Астраханская, 83, Саратовский госуниверситет, физфак, каф. прикладной физики: отв. редактор сб. "Вопросы прикладной физики" проф. В.С Кошелев;
- или лично отв. секретарю редколлегии на кафедре прикладной физики (СГУ, 8 корпус, 4 этаж, 90 к.) ст.пр. Старшову М.А.

*Телефоны:* редколлегия - 7(8-452) 51-48-52, отв. секр. - 7(8-452) 26-07-50.

**E-mail:** fiz@sgu.ru; mastarshov@mail.ru

## ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЬИ

УДК 51.942.82:621.396.96

## ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МОДЕЛИ В БИОФИЗИКЕ

И.А.Иванов, А.И.Петров

Саратовский государственный университет,

*Иванов Иван Алексеевич*, канд. физ.-мат. н, доцент, e@mail, р.т. (8452) 11-12-13, д.т. (8452) 11-13-14*Петров Антон Иванович*, аспирант, e@mail, р.т. (8452) 15-17-13, д.т. (8452) 21-13-14

Показано, что в некоторых явлениях случайные отклонения от закономерностей настолько малы, что их можно не учитывать. Рассмотрены явления, в которых случайность играет основную роль.

Рассмотрим вероятностную модель биомолекулярной реакции:



Вероятность того, что за время  $\Delta t$  не образуется ни одной молекулы типа  $C$ , равна  $1-N_1N_2\lambda\Delta t$  [1]. На рис.1 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки. Кривая 1 - зависимость от времени, кривая 2 - вблизи точки равновесия.

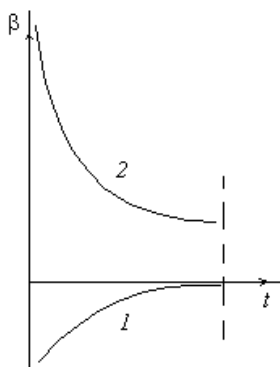


Рис.1

На рис.2 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки при образовании молекулы типа  $D$ .

## Библиографический список

1. Рубин А.Б. Биофизика. М., 1987.
2. Иванов И.А. // Материалы междунар. науч.-техн. конф. "Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-98". Саратов, 1998. Т.1. С.234-235.
3. Бочаров Е.П. // Изв. Вузов. Радиофизика. 1987. Т.30, №1. С.96-103.
4. Rack A.I. // Bell System Tech. J. 1938. V.17, №3. P.123-124.
5. Van Duzer T. // IEEE Trans. 1963. V.ED-10, №6. P.370-378.
6. Петров П.И. // Вопросы электронной техники. Саратов, 1971. Вып.2. С.12-15.
7. Михайлов А.И., Лернер Д.М. // Письма в ЖТФ. 1998. Т.24, вып.21. С.16-22.

## Probabilistic models in biophysics

I.A. Ivanov, A.I. Petrov

Saratov State University

Shown that in some phenomena casual detours from regularities far enough small that their possible not to take into account. Considered phenomena, in which accident plays a main role.

## БИБЛИОТЕКИ,

получившие обязательный экземпляр научного сборника "Вопросы прикладной физики", 2007, №14

### Россия

Библиотека Алтайского государственного университета (656099, Барнаул, пр. Социалистический, 68).

Библиотека Волгоградского государственного университета (400063, Волгоград, ул. 2-я Продольная, 20).

Научная библиотека Уральского государственного университета (620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 510).

Научная библиотека Иркутского государственного университета (664000, Иркутск, Бульвар Ю. Гагарина, 24).

Научная библиотека Казанского государственного университета (420008, Казань, ул. Ленина, 18).

Библиотека Калининградского государственного университета (236040, Калининград, ул. Университетская, 2).

Научная библиотека Краснодарского государственного университета (350000, Краснодар, ул. К. Либкнехта, 149).

Российская государственная библиотека (101600, Москва, Воздвиженка, 8).

Библиотека Администрации Президента Российской Федерации (Москва).

Научная библиотека им. А.М. Горького Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (103031, Москва, ул. Моховая, 9).

Государственная публичная научно-техническая библиотека России (103031, Москва, Кузнецкий мост, 12).

Библиотека института научной информации по общественным наукам Российской академии наук (117417, Москва, ул. Красикова, 28/21).

Библиотека по естественным наукам РАН (119890, Москва, Знаменка, 11).

Государственная публичная историческая библиотека Российской Федерации (101000, Москва, Старосадский пер., 9).

Библиотека Всероссийского института научной и технической информации РАН (125219, Москва, ул. Балтийская, 14)

Государственная общественно-политическая библиотека (129256, Москва, ул. В. Пика, 4, корп. 2)

Центральная политехническая библиотека (101000, Москва, Политехнический пр., 2).

Государственная центральная научная медицинская библиотека (117418, Москва, ул. Красикова, 30).

Государственная публичная научно-техническая библиотека Сибирского отделения РАН (630200, Новосибирск, ул. Восход, 15).

Научная библиотека Новосибирского государственного университета (630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2).

Библиотека Пермского государственного университета (614022, Пермь, ул. Букирева, 15).

Научная библиотека Ростовского государственного университета (344006, Ростов-на-Дону, ул. Пушкинская, 148).

Библиотека Самарского государственного университета (443011, Самара, ул. Потапова, 64/163).

Российская национальная библиотека (191069, Санкт-Петербург, ул. Садовая, 18).

Библиотека РАН (199164, Санкт-Петербург, Биржевая линия, 1).

Научная библиотека Санкт-Петербургского государственного университета (Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9).

Научная библиотека Саратовского государственного университета (410026, Саратов, ул. Университетская, 42).

Научная библиотека Тверского государственного университета (170000, Тверь, ул. Трехсвятская, 16/31).

Научная библиотека Томского государственного университета (634010, Томск, пр. Ленина, 34 А).

Научная библиотека Ульяновского государственного университета (432700, Ульяновск, ул. Л. Толстого, 42).

Библиотека Башкирского государственного университета (450074, Уфа, ул. Фрунзе, 32).

Хабаровская краевая научная библиотека (680671, Хабаровск, ул. К. Маркса, 1/72).

Библиотека Ярославского государственного университета (150000, Ярославль, ул. Советская, 14).

Научно-техническая библиотека Балаковского института техники, технологии и управления (413800, Балаково, ул. Чапаева, 140).

Библиотека Балаиовского педагогического института (412340, Балаиов, ул. К. Маркса, 29).

### Германия

Немецкое исследовательское общество (Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG, Kennedyallee 40, 53175 Bonn).

### Грузия

Библиотека Тбилисского государственного университета (320028, Тбилиси, пр. И. Чавчавадзе, 1).

### Белоруссия

Фундаментальная библиотека Минского государственного университета (220080, Минск, Университетский городок).

### Казахстан

Научная библиотека Казахского государственного университета (480121, Алма-Аты, ул. Тимирязева, 46).

### Молдавия

Научная библиотека Молдавского государственного университета (277003, Кишинев, ул. Садовая, 60).

### США

Библиотека Конгресса США (The Library of Congress European & Latin American Acquisition Division, 101 Independence Ave., S. E. Washington. D.C. 20540-4180. USA).

### Украина

Научная библиотека Киевского государственного университета (252601, Киев, ул. Владимирская, 58).

Научная библиотека Львовского государственного университета (290601, Львов, ул. Драгоманова, 5).

Центральная научная библиотека Харьковского государственного университета (310077, Харьков, пл. Дзержинского, 4).

### Эстония

Фундаментальная библиотека Тартуского государственного университета (202400, Тарту, ул. Струве, 1).

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Ф.И.О.	Место работы	Должность, степень, ученое звание	e-mail
Абрамов Александр Юрьевич	СГУ	аспирант	AbramovAY85@mail.ru
Березин Валентин Иванович	СГУ	д.ф.-м.н., профессор	
Гарбер Георгий Евгеньевич			garber@mail.saratov.ru
Дворак Антон Александрович	СГУ	студент	<a href="mailto:dvorak88@mail.ru">dvorak88@mail.ru</a>
Диков Олег Викторович	СГУ	аспирант	DikovOV@list.ru
Дружинина Алена Владимировна	СГУ	студентка	<a href="mailto:eurosend@list.ru">eurosend@list.ru</a>
Ермолаев Игорь Анатольевич	СГУ	к.ф.-м.н., доцент	
Кадров Дмитрий Михайлович	СГУ	студент	
Князев Александр Александрович	СГУ	к.ф.-м.н., доцент	<a href="mailto:knf@sgu.ru">knf@sgu.ru</a>
Коноваленко Варвара Александровна	СГУ	студент	Varechka333@yandex.ru
Кошелев Василий Сергеевич	СГУ	д.т.н., профессор кафедры прикладной физики	apd@sgu.ru
Крылов Александр Федорович	СГУ	к. ф.-м. н., доцент	
Куликова Мария Владимировна	СГУ	студентка	mmcc@mail.ru
Литвиненко Артем Николаевич	СГУ	студент	LitvinenkoAN@gmail.com
Машников Валерий Васильевич	СГУ	к.ф.-м.н., доцент	<a href="mailto:ValeryMash@yandex.ru">ValeryMash@yandex.ru</a>
Минкин Леонид Моисеевич	Portland State University, USA	профессор	
Наволокин Никита Александрович	СГУ	студент	<a href="mailto:navolokin1@rambler.ru">navolokin1@rambler.ru</a>
Овчинников Вячеслав Александрович	СГУ	инженер кафедры прикладной физики	apd@sgu.ru
Отпущенников Сергей Валерьевич	СТС ПРЦНИТ	начальник отдела	s@sgu.ru
Перепелицына Ольга Александровна	СГУ	к. ф.-м. н., доцент	olga-optics@yandex.ru
Рябухо Владимир Петрович	СГУ	доктор физ.-мат. н., профессор	<a href="mailto:rvp@sgu.ru">rvp@sgu.ru</a>
Савонин Сергей Александрович	СГУ	студент	Savonin@rambler.ru
Старшов Михаил Александрович	СГУ	доцент	mastarshov@mail.ru
Тен Галина Николаевна	СГУ	д.ф.-м.н., доцент	<a href="mailto:GN@info.sgu.ru">GN@info.sgu.ru</a>
Терентьев Олег Анатольевич	СГУ	к.ф.-м.н., ассистент	<a href="mailto:TerentevOA@gmail.com">TerentevOA@gmail.com</a>
Шабунин Алексей Владимирович	СГУ	д. ф.-м. н., профессор	alexey@chaos.ssu.runnet.ru
Шаповалов Александр Степанович	СГУ	д.ф.-м.н., профессор	apd@sgu.ru
Шаповалова Ирина Александровна	СШ №31 Кировского района г.Саратова	учитель высшей категории	apd@sgu.ru

## СОДЕРЖАНИЕ

### ОБЗОР

В.С.Кошелев, А.С Шаповалов	ПРОБЛЕМЫ ТЕПЛООВОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ	3
<b>ОБРАЗОВАНИЕ: УЧЕБНО–МЕТОДИЧЕСКИЕ РАЗРАБОТКИ</b>		
В.А.Коноваленко, В.В.Машников, А.С.Шаповалов	КАНОНИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ГИББСА В ОБЩЕМ КУРСЕ ФИЗИКИ	11
А.Ф. Крылов, Г.Н. Тен	КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ КАК ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ ГИББСА ДЛЯ ЗАКРЫТЫХ СИСТЕМ	14
А.С. Шаповалов, И.А. Шаповалова	О ЧАСТНЫХ СЛУЧАЯХ УРАВНЕНИЯ БЕРНУЛЛИ	15
М.А. Старшов	ФИЗИКА И ПСИХОЛОГИЯ В ПИСЬМАХ ФИЗИКОВ	18
В.А. Овчинников, А.С. Шаповалов	О МЕТОДИКЕ И РЕЗУЛЬТАТАХ ПРИМЕНЕНИЯ АЭРОДИНАМИЧЕСКОГО СТЕНДА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДАВЛЕНИЯ ВДОЛЬ ПОВЕРХНОСТИ ТЕЛ	21
И.А. Шаповалова	ОБУЧЕНИЕ МОНОЛОГИЧЕСКОМУ ВЫСКАЗЫВАНИЮ НА АНГЛИЙСКОМ ЯЗЫКЕ ПРИ ПОМОЩИ ВЕРБАЛЬНЫХ ОПОР	26
А.А. Князев	УРАВНЕНИЕ ТЕПЛООВОГО БАЛАНСА (ИЛИ ЧТО ТАКОЕ ТЕПЛОТА)	28
<b>ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМ; ЭЛЕКТРОННАЯ И ИОННАЯ ОПТИКА</b>		
А.С. Шаповалов, В.В. Машников, Л.М. Минкин, С.А. Шаповалов	СИСТЕМА КОЭФФИЦИЕНТОВ КОЛЛЕКТИВНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ФЛУКТУАЦИЙ МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ	33
А.А.Дворак	ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО ПЕРЕХОДА К ХАОСУ В АКТИВНОЙ СРЕДЕ МЕТОДОМ ОЦЕНКИ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ МЕТРИЧЕСКОЙ ЭНТРОПИИ	38
А.В.Шабунин, А.Н.Литвиненко	ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕЖДУ МУЛЬТИСТАБИЛЬНЫМИ СОСТОЯНИЯМИ ПОД ВНЕШНИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ	40
<b>СПЕКТРОСКОПИЯ</b>		
Г.Н. Тен, Д.М. Кадров, В.И. Березин	СТАБИЛЬНОСТЬ И СТРУКТУРА КОНФОРМЕРОВ ГЛИЦИНА, АЛАНИНА И ЛЕЙЦИНА В ИЗОЛИРОВАННОМ СОСТОЯНИИ И ЦВИТТЕР-ИОННОЙ ФОРМЕ	42
Г.Н. Тен, Д.М. Кадров, В.И. Березин	АНАЛИЗ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА КОНФОРМЕРОВ ИЗОЛИРОВАННОГО ГЛИЦИНА В АНГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ	44
Г.Н. Тен, А.А. Яковлева, В.И. Березин	РАСЧЁТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ВОДНОГО РАСТВОРА АДЕНИНА	48
Г.Н. Тен, А.А. Яковлева, В.И. Березин	ВЛИЯНИЕ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ НА ИК СПЕКТР КОМПЛЕМЕНТАРНОЙ ПАРЫ АДЕНИН-ТИМИН	51
А.Ю.Абрамов, С.А.Савонин, О.В.Диков, О.А.Перепелицина, В.П.Рябухо	ЦИФРОВАЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ ФАЗОВАЯ МИКРОСКОПИЯ	54
<b>ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА</b>		
Г.Е. Гарбер	ОБОБЩЕНИЕ МОДЕЛИ АТОМА БОРА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ВЕРОЯТНОСТЕЙ	60
О.А Терентьев, А.В. Дружинина	МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КИРАЛЬНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	66
<b>ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА</b>		
И. А. Ермолаев, В.С. Кошелев, С.В. Отпущенников	МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНО–КОНДУКТИВНОГО ТЕПЛООБМЕНА В СИСТЕМАХ МИКРОКАНАЛОВ	70
Скапцов А.А., Кошелев В.С	ДОЛГОВЕЧНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРОВ.	72
<b>МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА</b>		
М.В.Куликова, Н.А.Наволокин	ИЗМЕНЕНИЯ В ОРГАНАХ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ ПРИ ВВЕДЕНИИ МАГНИТОУПРАВЛЯЕМЫХ МИКРОЧАСТИЦ ЖЕЛЕЗА И КОБАЛЬТА	73
<b>ПАМЯТКА АВТОРАМ</b>		
БИБЛИОТЕКИ, ПОЛУЧИВШИЕ ЭКЗЕМПЛЯР "ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ" (2009, ВЫП.16)		77
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ		78
СОДЕРЖАНИЕ		79
CONTENTS		80
В КОНЦЕ НОМЕРА. ИЗ КОЛЛЕКЦИИ М.А.СТАРШОВА		81

## CONTENTS

### REVIEW

- Koshelev V.S., Shapovalov A.S. THE PROBLEMS OF THE THERMAL PROJECTION OF THE ELECTRONIC DEVICES 3

### EDUCATION: METHODOLOGICAL ISSUES

- V.A.Konovalenko, V.V.Mashnikov, A.S.Shapovalov CANONICAL DISTRIBUTION OF GIBBS IN THE GENERAL COURSE OF PHYSICS 11
- A.F.Krylov, G.N.Ten SEMICLASSICAL APPROXIMATION AS A SPECIAL CASE OF GIBBS' STATISTICAL MECHANICS FOR CLOSED SYSTEMS 14
- A.S. Shapovalov, I.A. Shapovalova ABOUT THE SPECIAL CASES OF BERNOULLI'S EQUATION 15
- M. A. Starshov PHYSICS AND PSYCHOLOGY IN THE PHYSICS' LETTERS 18
- V.A. Ovchinnikov, A.S. Shapovalov ABOUT A METHOD AND RESULTS OF THE AERODYNAMICS RACK APPLICATION FOR MEASURING OF THE PRESSURE DISTRIBUTION ALONG THE SURFACE OF THE BODIES 21
- I.A.Shapovalova TEACHING OF ORAL MONOLOGUE STATEMENTS WITH THE HELP OF VERBAL SUPPORTS 26
- A.A. Knyazev HEAT BALANCE EQUATION (OR WHAT HEAT IS) 28

### ELECTROMAGNETISM

- A.S.Shapovalov, V.V. Mashnikov, L.M. Minkin, S.A.Shapovalov A SYSTEM OF FACTORS OF THE COLLECTIVE TRANSFORMATION OF FLUCTUATIONS OF THE MULTIDIODE MICROWAVE GENERATOR 33
- A.A.Dvorak ANALYSIS OF THE SPATIAL TRANSITION TO CHAOS IN THE ACTIVE MEDIUM USING THE RELATIVE METRIC ENTROPY APPROACH 38
- A.V. Shabunin, A.N. Litvinenko EXPERIMENTAL STUDY OF CONTROLLING MULTISTABILITY BY EXTERNAL FORCE 40

### SPECTROSCOPY

- G.N. Ten, D.M. Kadrov, V.I. Berezin STABILITY AND STRUCTURE CONFORMERS OF GLYCINE, ALANINE AND LEUCINE IN ISOLATED STATE AND ZWITTERIONIC FORMS 42
- G.N. Ten, D.M. Kadrov, V.I. Berezin ANALYSIS OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF ISOLATED CONFORMERS OF GLYCINE IN THE ANHARMONIC APPROXIMATION 44
- G.N. Ten, A.A. Yakovleva, V.I. Berezin CALCULATION AND INTERPRETATION OF VIBRATIONAL SPECTRA OF ADENINE WATER SOLUTION 48
- G.N. Ten, A.A. Yakovleva EFFECT OF HYDROGEN BONDING ON THE IR SPECTRUM OF ADENINE-THYMINE COMPLEMENTARY PAIR 51
- A.Y.Abramov, S.A.Savonin, O.V. Dikov, O.A.Perepelitsina, V.P. Ryabukho DIGITAL HOLOGRAPHIC PHASE MICROSCOPY 54

### THEORETICAL AND MATHEMATICAL PHYSICS

- G.E.Garber GENERALIZATION OF THE BOHR'S MODEL OF ATOM IN QUANTUM MECHANICS BY METHODS OF THEORY OF PROBABILITIES 60
- O.A.Terentev, A.V. Druzhinina TECHNIQUE OF STUDYING THE MECHANICAL CHARACTERISTICS OF CHIRAL CARBON NANOTUBES. 66

### ENGINEERING

- I.A. Ermolaev, V.S. Koshelev, S.V. Otpushennikov MODELING OF CONVECTIVE-CONDUCTIVE HEAT TRANSFER IN MICROCHANNEL SYSTEMS 70
- A.A. Scaptzov, V.S. Koshelev LASTING OF THE ELECTRONIC DEVICES 72

### MEDICAL PHYSICS

- M.V.Kulikova, N.A.Navolokin CHANGES IN THE ORGANS OF LABORATORY ANIMALS AFTER INTRODUCTION OF MAGNETICALLY GUIDED MICROPARTICLES OF IRON AND COBALT 73

### INFORMATION FOR THE AUTHORS

- LIST OF LIBRARIES WHICH RECEIVED COPIES OF THE PREVIOUS ISSUE 77

LIST OF THE AUTHORS 78

CONTENTS IN RUSSIAN 79

CONTENTS IN ENGLISH 80

FROM THE COLLECTION OF M.A.STARSHOV 81

В лучшем физическом вузе нашей страны работает один из лучших физиков, профессор Н.Б. ДЕЛОНЕ, интеллигент в каком-то поколении. Помимо своей научной работы по лазерным проблемам Николай Борисович обожает что-нибудь написать для юношества. И каждый раз приходится жалеть, что ему не везёт с редакторами, потому что стиль этих работ, мягко говоря, довольно своеобразный.

Вот книга «Квантовая природа вещества», красиво изданная в 2008 году Физматлитом в серии «Библиотека физико-математической литературы для школьников и студентов».

Не успеешь открыть томик, а уже натыкаешься на имя «Птоломей», в том месте, где ожидается привычный Птолемей. И рядом с ним Архимед, который «сформулировал основные законы механики» - интересно бы уточнить, какие они, эти основные законы (страница 7, «От автора»). Основной текст книги тоже богат на открытия.

С.12. «...трудами Лобачевского (в 1826 г.) и Римана (в 1867 г.) были созданы...». Хорошо, если не помнить, что Б. Риман умер в 1866 году. И об этом узнаём из Персоналий, с.203.

С.16. «...прямое измерение заряда электрона было проведено Р. Миллиkenом в 1913 г. Полученная им величина  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  кулона ...».

Разработав свой знаменитый метод капель в 1906 г., Милликен уже в 1910-м нашёл для элементарного заряда  $4,891 \cdot 10^{-10}$  электростатических единиц, когда о кулонах физики ещё не договорились, и продолжал серию опытов года до 1914.

С.24. Автор известного двухтомника «Физика» под бодрым пером нашего профессора приобретает несколько «шотландский» оттенок фамилии с помощью удвоения буквы Л – «Джанколли».

С.37. Не названные по именам исследователи фотоэффекта после Ленарда и через полтора десятка лет после А.Г. Столетова установили важный факт: «процесс выбивания электронов из металла

является практически безынерционным», что подозрительно похоже на сказанное А.Г. Столетовым в первой статье по фотоэффекту (Избранные сочинения, М.-Л., 1950, С.197, написано в 1888г.) : «Актино-электрический ток мгновенно (говоря практически) прекращается, как скоро лучи задержаны экраном. Таким экраном может служить не только непрозрачная пластинка из металла, дерева, картона, но и всякое стекло». И ещё раз, суммируя выводы из своих наблюдений, А.Г. Столетов пишет: «Разряжающее действие лучей обнаруживается даже при весьма кратковременном освещении, причем между моментом освещения и моментом соответственного разряда не протекает заметного времени» (там же, с.239).

С.43. Уважаемый профессор приводит свою версию графика, полученного якобы Миллиkenом, и на оси частот обозначает масштаб « $\omega \times 10^{13}$ » - попробуйте угадать, какие же частоты использованы в этих опытах. Аналогичный график, представляющий результаты опытов Милликена по фотоэффекту, в известной книге А.И. Китайгородского «Введение в физику», изданной в 1959г, имеет около оси частот надпись  $\nu \cdot 10^{-15}$  (С.419), что довольно заметно, примерно на двадцать восемь порядков, отличается от масштаба у Делоне на странице 43.

С.185. - профессор Делоне пишет формулу для оценки «радиуса атома из постулатов Бора»:  $r = h^2 / m e^2$ . Если прикинуть, приняв  $h \approx 6,6 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $m \approx 10^{-30}$  кг,  $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$  К, получим что-то вроде сотни метров! Для теоретика погрешность допустимая... Едва ли многие школьники и студенты, которым адресована монография профессора МФТИ, смогут найти ошибку в этих расчётах, да они и читать-то не очень любят, к счастью для её автора.

К этому добавим, что по сведениям Н.Б. Делоне важная статья Н. Бора опубликована в журнале с забавным названием «Phyl. Mag. 1913». (с.188). Любой школьник и студент может открыть, например, третий том «Истории физики» П.С. Кудрявцева, изданный хотя и давно,



зато тиражом 23 тысячи экземпляров, и полюбоваться на титульный лист того номера «PHILOSOPHICAL MAGAZINE», где была статья.

Удерживаясь от цитирования многих замечательных страниц учебного издания, полистаем список «Персоналии».

Дуэн, Ульман – на самом деле его звали Уильям.

Каммерлинг-Оннес. Обычная студенческая ошибка, он был Камерлинг-Оннес.

«Формулы Бальмера, Лаймена и Пашена...» (С.179) и «Лайман, Теодор» - с.198.

Наконец, вкусное описание модели атома: «*Пудинг* – традиционное блюдо английской кухни; классический вариант пудинга – густая рисовая каша, в которой равномерно по ее объему распределены **ягоды изюма**» (184).

Следует признать, что книга Н.Б. Делоне выдержана в свойственном этому автору стиле. Например, опубликованная в Соросовском образовательном журнале статья о ридберговских атомах (1998, №4, С.64-70) точно так же изобилует опечатками, а из приведённых там формул с трудом удаётся найти хотя бы одну правильно написанную, как будто всё написано курсовиком, только что сдавшим ЕГЭ.

Вот как выглядит там формула «для радиуса орбиты электрона»:

$$r_n = \frac{4\pi\hbar\epsilon_0}{m_e} \frac{n^2}{e^2}, \text{ а следует ещё раз}$$

напомнить, что в более новом труде профессора то же самое приобрело инновационный вид:  $r = h^2 / me^2$  (С.185). Знаменатели этих выражений совпадают, но как отличаются числители!

Между прочим, статья Н.Б. Делоне в Соросовском образовательном журнале, №1 за 2001г, сопровождалась рецензией В.П. Крайнова, зато статью В.П. Крайнова в четвёртом номере того же года рецензировал, как может каждый догадаться, естественно, профессор Н.Б. Делоне.

Наталья ИВАНОВА. Цепь.Дуб. Котученый.(Современная словесность в зеркале русской классики). ЗНАМЯ 2011, №1. С.194-199. 12.4.11г.

С.195. «именно она, худлитература, развивает, потому что, читая, человек не только складывает буквы, КАК **СЕЛИФАН** в «Мертвых душах», но и *воображает*, ... Вот зачем читать – чтобы развивать воображение ...»

«...Характера он был больше молчаливого, чем разговорчивого; имел даже благородное побуждение к просвещению, т.-е. чтению книг, содержанием которых не затруднялся: ему было совершенно всё равно, похождение ли влюбленного героя, просто букварь, или молитвенник: - он всё читал с равным вниманием; если бы ему подвернули химию, он и от нее бы не отказался. Ему нравилось не то, о чем читал он, но больше самое чтение, или, лучше сказать, процесс самого чтения, что **вот-де из букв вечно выходит какое-нибудь слово**, которое иной раз чорт знает что и значит...»

ГОГОЛЬ Н.В. Мертвые души. Глава II. –описание слуги Чичикова, малого лет тридцати, **ПЕТРУШКИ**. (С15) сс Т.3, М., 1952.

«...в это время стоявший позади лакей утер посланнику нос и очень хорошо сделал...»(С.24)

«Традиционно, **бывая на** закрытых предприятиях, **НАМ НЕ РАЗРЕШАЛИ** писать, где они находятся, кто ими руководит».

ГУБАРЕВ В.С. Атомная бомба. С.356.

«-В молодости я читал роман американского писателя **Митчелла Уиллиса**. Он подробно описывал ход лучевой болезни у молодого физика. Была какая-то обреченность во всем происходящем...Насколько писатель был точен?»

ГУБАРЕВ В.С. Ат бомба. 2009, С.513. А ведь это Митчел УИЛСОН! И собеседница, профессор А.К. С-ва, задумчиво: «-**Хорошо написано...**».

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

# ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ

*Межвузовский научный сборник*

Выпуск 17

Издательство Саратовского университета  
2010

УДК [53 + 621.37/.39](082)  
ББК 22.3 я 43 + 32 я 43  
В74

**Вопросы прикладной физики:** Межвуз. науч. сб.– Саратов: Изд-во Саратовского университета, 2010.  
В74 – Вып.17– 82 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:

В.С. Кошелев – ответственный редактор  
А.С. Шаповалов – заместитель ответственного редактора  
М.А. Старшов – научный редактор

#### Редакционный совет:

В.М. Аникин	Саратовский государственный университет
В.Б. Байбурин	Саратовский государственный технический университет
В.И. Березин	Саратовский государственный университет
О.Е. Глухова	Саратовский государственный университет
В.С. Кошелев	Саратовский государственный университет
О.Г. Мартыненко	Институт теплообмена Белорусской АН, Минск
Л.М. Минкин	Портландский государственный университет, США
В.В. Новоселов	Саратовский государственный университет
И.Н. Салий	Саратовский государственный университет
Н.И. Синицын	СО ИРЭ РАН, Саратов
М.А. Старшов	Саратовский государственный университет
Г.Н. Тен	Саратовский государственный университет
В.В. Тучин	Саратовский государственный университет
Д.А. Усанов	Саратовский государственный университет
<u>Г.М. Цымбалов</u>	СО ИРЭ РАН, Саратов
А.С. Шаповалов	Саратовский государственный университет

[53 + 621.37/39](082)  
ББК 22.3 я 43 + 32 я 43

ISSN 0868-6238

© Саратовский  
государственный  
университет, 2010

Научное издание

**ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ**

*Межвузовский научный сборник*

Выпуск 17

Группа подготовки номера и компьютерная верстка  
М.А. Старшов, Б.Р. Галицкий, А.М. Старшов

Изд.лиц. ЛР № 020305 от 19.02.97.  
Формат 60×84 1/8. Бумага офсетная.  
Усл.печ.л. 16,27(17,5). Уч.-изд.л. 16,4.

Подписано в печать 18.12.2010.  
Гарнитура Times. Печать офсетная.  
Тираж 450 экз. Заказ

Издательство Саратовского университета. 410026, Саратов, ул. Астраханская, 83.  
Отпечатано с оригинал-макета в РОУ "Народный дом". 410600, Саратов, ул. Горького, 30.



ИЗДАТЕЛЬСТВО  
САРАТОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА