

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. М. АКМУЛЛЫ
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ С ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫМ ЦЕНТРОМ УНЦ РАН
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ РАН
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛОВ УНЦ РАН
ИНСТИТУТ МЕХАНИКИ УНЦ РАН
ИНСТИТУТ НЕФТЕХИМИИ И КАТАЛИЗА РАН**

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ

**Тезисы докладов
VII Международной школы-конференции
для студентов, аспирантов и молодых ученых**

**12-16 октября 2014 г.
г. Уфа**

**У ф а
РИЦ БашГУ
2014**

УДК 51+53
ББК 22.1+22.3
Ф94

*Сборник издан при финансовой поддержке РФФИ
(проект № 14-31-10131_мол_г)
и за счет внебюджетных средств БашГУ*

Редакционная коллегия:

доктор физико-математических наук, профессор **Б.Н. Хабибуллин**
(ответственный редактор);

доктор физико-математических наук, профессор **Е.Г. Екомасов**
(ответственный редактор);

кандидат химических наук, ст. преп. **В.В. Чернова**;
кандидат физико-математических наук, ст. преп. **Ф.Б. Хабибуллин**;
ассистент **Л.А. Габдрахманова**

Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании:
тезисы докладов VII Международной школы-конференции для студентов,
аспирантов и молодых ученых /отв. ред. Б.Н. Хабибуллин, Е.Г. Екомасов. -
Уфа: РИЦ БашГУ, 2014. - 364 с.

ISBN 978-5-74-77-3648-1

В сборнике помещены тезисы докладов участников VII Международной
школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых
«Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании».

Тезисы докладов воспроизводятся с представленных авторами
оригиналов.

УДК 51+53
ББК 22.1+22.3

ISBN 978-5-74-77-3648-1

© БашГУ, 2014 г.

ФИЗИКА

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 537.611.3

ТОПОЛОГИЯ И СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ С НЕБЛОХОВСКОЙ СТРУКТУРОЙ В КРИСТАЛЛАХ–ПЛАСТИНАХ ТИПА (011)

Султанбеков А.А., Вахитов Р.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Как известно, в ферромагнитных кристаллах при определенных условиях образуется конфигурация областей самопроизвольной намагниченности, называемая доменной структурой. Её топология, размеры и другие свойства существенно зависят от симметрии кристалла, его геометрии, от наличия анизотропных взаимодействий высших порядков и т.д. Так, например, в кристаллах ферритов-гранатов, в которых наряду с естественной кубической анизотропией присутствует и наведенная одноосная [1], как правило, имеет место сложная доменная структура. В частности, было показано [2], что в пластине (111) при определенных условиях возникают 180-градусные доменные границы (180°-ДГ) с неблоховской структурой, в которой происходит выход вектора намагниченности из плоскости ДГ. Магнитные неоднородности с такой структурой обладают рядом интересных свойств и могут быть использованы в практических целях.

В данной работе исследуется структура магнитных неоднородностей 180°-ДГ, возможных в пластине (011) с комбинированной анизотропией. Расчеты показывают, что при определенных соотношениях констант наведенной одноосной и кубической анизотропий, в рассматриваемой пластине также возможно существование 180°-ДГ неблоховского типа. Исследованы их характеристики и найдена область их существования. В частности, они возникают как промежуточная структура между 180°-ДГ блоховского типа, но с разными ориентациями плоскости стенки.

Литература

1. Тикадзуми С. Магнитные свойства вещества. Москва: Наука, 1994, 304 с.
2. Плавский В.В., Шамсутдинов М.А., Филлипов Б.Н. //ФММ. 1999. Т.88. №3. С.22-29.

STABILITY OF THE CYLINDRICAL THIN SHELL WORMHOLES

Khaybullina A.R., Yanbekov A.A.

M. Akmullah Bashkir State Pedagogical University, Ufa, Russia

Wormholes are solutions of the equations of gravitation which imply a nontrivial topology of spacetime, connecting two regions of the universe or of two different universes by a traversable throat.

Eiroa and Simeone in [1] have considered a general static cylindrical metric in 3 + 1 dimensions given by

$$ds^2 = B(r)(-dt^2 + dr^2) + C(r)d\varphi^2 + D(r)dz^2 \tag{1}$$

$$B = (1 - 8m - 8\epsilon)^{-1} r^{4m(1+2m)}$$

$$C = r^{4m+2}$$

$$D = r^{-4m}$$

where the constants have been arranged so that m is the mass per specific length and ϵ is the energy per specific length.

The potential of the motion of the throat $V(a)$ reduces to [2]

$$V(a) = \frac{1}{B} - \left(\frac{\sigma}{\zeta}\right)^2$$

where $\sigma = -\left(\frac{D'}{D} + \frac{C'}{C}\right)\sqrt{\Delta}$

for this case $\Delta = \frac{1}{\sqrt{B}}$ and $\zeta = \frac{D'}{D} + \frac{C'}{C}$

whose second derivative at point $a = a_0$ becomes

$$V''_0 = -4a^{-2-4(1+2m)} m(1 + 6m + 16m^2 + 16m^3)(-1 + 8m + 8\epsilon)$$

Stability is sensitive with respect to ϵ .

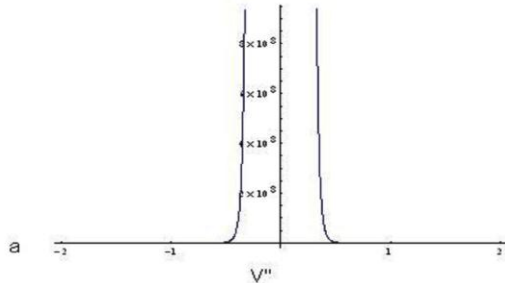


Fig.1. Stability of TSW in spacetime, supported by a linear gas in terms of ϵ . We see that the stability depends on one of the essential parameter i.e. ϵ in (1)

Thin shell wormholes are considered in cylindrical symmetry where the metric functions rely entirely on the radial Weyl coordinate. Such spacetimes may

not be asymptotically at in general so that we expect deviations from the spherically symmetric counterparts.

References

1. E. F. Eiroa and C. Simeone, Phys. Rev. D 81, 084022 (2010).
2. S. Habib Mazharimousavi, M. Halilsoy, y and Z. Amirabiz Stability of generic cylindrical thin shell wormholes Physical Review D 89, 084003 (2014)

© Khaybullina A.R., Yanbekov A.A., 2014 г.

УДК 537.622.6

ВЫСОКОПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Синицын В.Е.

ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»
г. Екатеринбург, Россия

Решение многих задач современной теоретической физики подразумевает постановку численного эксперимента или компьютерное моделирование. От того, насколько быстро и точно проводится этот эксперимент, во многом зависит и научный уровень конечного результата.

Несмотря на значительный прогресс в области доступности суперкомпьютерной техники, машинное время таких вычислительных систем по-прежнему остается весьма ценным ресурсом. Однако, большинство персональных компьютеров, доступных даже студентам младших курсов, оснащено современными графическими процессорами (видеокартами), представляющими собой существенно параллельную вычислительную систему, способную в достаточной степени заменить традиционные суперкомпьютеры для многих задач теоретической физики, включая эволюцию классических нелинейных магнитных систем.

В настоящем докладе будет представлен обзор технологий, позволяющих задействовать графические процессоры для решения задач общего назначения, а также затронут ряд связанных с этим технических вопросов. Применение указанных технологий к актуальной задаче теоретической физики — расчету свойств киральной спиновой системы — иллюстрируется в докладе Синицына Вл. Е. (стр. 6)

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
СВОЙСТВ КИРАЛЬНЫХ ГЕЛИМАГНЕТИКОВ ВО ВНЕШНИХ
МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**Синицын Вл.Е.¹, Овчинников А.С.¹, Бострем И.Г.¹, Кишине Дж.²¹Институт естественных наук, УрФУ, Екатеринбург, Россия²Graduate School of Arts and Sciences, The Open University of Japan, Japan

В последние годы наблюдается устойчивый интерес к киральным магнитным системам, в которых антисимметричный обмен Дзялошинского-Мория приводит к появлению геликоидального магнитного порядка с фиксированным направлением вращения моментов (киральностью). Этот интерес вызван, в основном, возможностью наблюдения стабильных магнитных топологических структур в этих системах. Последние могут быть представлены либо как вихревые структуры (так называемые скирмионы), либо как спиральный гелимагнитный порядок, деформируемый внешним магнитным полем в состояние так называемой магнитной солитонной решетки. Порядок первого типа был обнаружен в соединениях MnSi [1], Fe_{1-x}Co_xSi и Co₂OSeO₃ [2], а солитонная решетка найдена в соединении Cr_{1/3}NbS₂ методом лоренцевской микроскопии [3].

Другой аспект исследований киральных гелимагнетиков связан с использованием нетривиальных магнитных структур в современных устройствах спинтроники [4]. Предшествующие теоретические исследования показали, что солитонная решетка обладает разнообразием интересных свойств, которые открывают новые перспективы в наноматематике и приложениях спинтроники. В частности, в работе [5] было показано, что с помощью движения солитонной решетки можно осуществить транспорт магнитной плотности на макроскопически большие расстояния (бездиссипативный спиновый ток). Очевидно, что запуск трансляционного движения с помощью внешнего магнитного поля представляется крайне важной проблемой.

Преобразование энергии подсистемы локальных моментов в энергию свободных носителей связано с генерацией спин-движущей силы. Генерация спин-движущей силы в киральном гелимагнетике с помощью внешнего магнитного поля является актуальной проблемой, связанной с разработкой спиновых батарей.

Практическая реализация устройств технологий хранения информации требует существенного понимания физических процессов систем конечных размеров.

В настоящее время ведутся активные исследования динамики скирмионов для конечномерных систем [6]. К конечномерным эффектам

относятся и обнаруженные недавно скачки намагниченности в тонких пленках MnSi , интерпретируемые как дискретное раскручивание геликоидального магнитного порядка внешним магнитным полем [7]. Развитие соответствующей теории для ситуаций, применимых к реальному соединению $\text{Cr}_{1/3}\text{NbS}_2$, является актуальной и востребованной задачей.

С помощью прямых численных вычислений, выполненных с применением технологии параллельных вычислений на графическом процессоре NVIDIA CUDA, в работе показана возможность запуска трансляционного движения солитонной решетки как целого в конфигурации двух скрещенных полей – продольного и поперечного геликоидальной оси.

Решена задача о статической деформации солитонной решетки продольным магнитным полем в пространственно-модулированную коническую структуру.

Рассмотрена генерация ЭДС в случаях импульсного и периодического продольного поля, найден эффект топологического усиления суммарной ЭДС. Получена количественная оценка ЭДС на кинк порядка 0.1 мэВ.

Выполнен численный расчет, объясняющий появление скачков намагниченности в киральном гелимагнетике конечного размера. Обнаружен эффект квантования периода солитонной решетки в образцах конечного размера с фиксированными ГУ в поперечном магнитном поле.

Литература

1. S. Muhlbauer, B. Binz, F. Jonietz et al. // *Science*.— 2009.— Vol. 323, no. 5916.— P. 915–919.
2. S. Seki, X. Z. Yu, S. Ishiwata, Y. Tokura // *Science*.— 2012.— Vol. 336, no. 6078.— P. 198–201.
3. Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi et al. // *Phys. Rev. Lett.*— 2012.— Vol. 108, no. 10.— P. 107202.
4. N. S. Kiselev, A. N. Bogdanov, R. Schaffer, U. Rossler // *J. Phys. D:Appl. Phys.*— 2011.— Vol. 44.— P. 392001.
5. I. G. Bostrem, J. Kishine, A. S. Ovchinnikov // *Phys. Rev. B*.— 2008.— Vol. 78, no. 6.—P. 064425.
6. M. N. Wilson, E. A. Karhu, D. P. Lake et al. // *Phys. Rev. B*.— 2013.— Vol. 88.— P. 214420.
7. N. J. Ghimire, M. A. McGuire, D. S. Parker et al. // *Phys. Rev. B*.— 2013.— Vol. 87.— P. 104403.

РЕЛАКСАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ СПЛАВА

 $\text{Ni}_{2-x}\text{Pt}_x\text{MnGa}$

Деревянко С.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия.

В работе с помощью пакета Quantum ESPRESSO [1] рассчитано равновесное значение параметра кристаллической решетки сплава $\text{Ni}_{2-x}\text{Pt}_x\text{MnGa}$ ($x = 0.25, 1.0, 1.25, 2.0$).

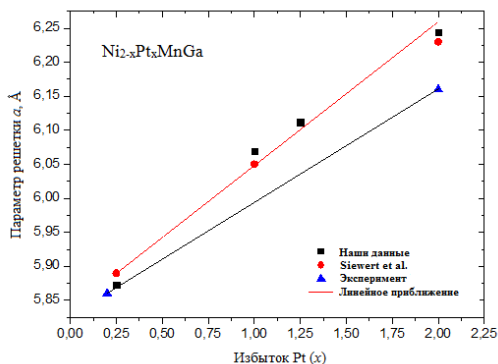


Рис. 1. Зависимость параметра решетки кубической фазы от избытка платины в сплавах $\text{Ni}_{2-x}\text{Pt}_x\text{MnGa}$.

На рис. 1 показана зависимость равновесного параметра решетки от избытка платины в сплавах $\text{Ni}_{2-x}\text{Pt}_x\text{MnGa}$. Кроме того на графике представлены значения равновесного параметра решетки, полученные теоретически [2] и экспериментально [3, 4]. Из полученных значений можно сделать вывод о том, что при увеличении концентрации платины равновесный параметр решетки линейно увеличивается. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с теоретическими и экспериментальными данными [2-4].

Литература

1. Quantum ESPRESSO package Version 5.0. <http://www.pwscf.org>
2. M. Siewert, M.E. Gruner, A. Hucht et al. Adv. Eng. Mat., **14** (2012) 530.
3. S. Singh, S.W. D'Souza, K. Mukherjee et al. Appl. Phys. Lett. **104** (2014) 231909.
4. P.J. Webster and K.R.A. Ziebeck. Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements. Part 2. – Berlin, 1988.

© Деревянко С.А., 2014 г.

РЕЗОНАНСНЫЕ КИНК-ПРИМЕСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА

Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Солитон — уединённая волна, сохраняющая свою форму и скорость при движении и столкновениях с другими уединёнными волнами [1]. Одним из уравнений, имеющих солитонные решения, является уравнение синус-Гордона (УСГ). Солитоны модифицированного УСГ (МУСГ) моделируют различные локализованные динамические возбуждения физических систем [1, 2], например: движение дислокаций в кристаллах, динамику доменных границ в магнетиках, процессы в джозефсоновских сверхпроводящих контактах, поведение волн зарядовой плотности, движение локальных конформационных возмущений вдоль молекулы ДНК и др.

Кинки представляют собой пример топологических солитонов, соединяя между собой два различных стационарных состояния системы [1]. Взаимодействие кинков МУСГ, движущихся по инерции, с точечными примесями может приводить к возбуждению «примесной» моды и к таким резонансным эффектам, как отражение кинка от притягивающего потенциала. Для изучения резонансной динамики кинков была разработана программа [3], реализующая высокую точность численного решения МУСГ. Для случая одной и двух примесей были численно найдены все возможные сценарии кинк-примесных взаимодействий при различных параметрах системы.

С помощью метода коллективных переменных [1] с учетом внешней силы и диссипации нами были получены уравнения движения для координаты центра кинка и амплитуды примесной моды в случае одной и двух точечных примесей. Построенная динамическая система качественно описывает результаты исследованных численно кинк-примесных взаимодействий.

Литература

1. Браун О.М., Кившарь Ю.С. Модель Френкеля-Конторовой. Концепции, методы, приложения // М.: Физматлит, 2008, 536 с.
2. Шамсутдинов М.А., Ломакина И.Ю., Назаров В.Н., Харисов А.Т., Шамсутдинов Д.М. Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны // М.: Наука, 2009, 452 с.
3. Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Екомасов Е.Г. Программный пакет для моделирования нелинейных волн модифицированного уравнения синус-Гордон. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013616082 от 26.06.2013.

© Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н., 2014 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОЛЯРНОСТИ
ЦЕНТРОВ СВЯЗАННЫХ МАГНИТНЫХ ВИХРЕВЫХ
СОСТОЯНИЙ В НАНОСТОЛБЧАТОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ
ТРЕХСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ**

Екомасов А.Е., Степанов С.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Большой интерес, в последнее время, вызывает явление переключения и возбуждения осцилляций намагниченности в магнитных наноструктурах, с помощью тока достаточно большой плотности, поляризованного по спину [1]. Частоты, возбуждаемых с помощью переноса спинового момента осцилляций намагниченности в магнитных наноструктурах, могут быть перенастраиваемы, с помощью приложения внешних магнитных полей и токов, и использованы для создания перспективных радиотехнических приложений. Особенно сильный интерес привлекает Спин-трансферный наногенератор (СТНГ) СВЧ. Большинство таких структур имеет два магнитных слоя, разделенных немагнитной прослойкой.

В работе исследуется СТНГ, состоящий из трёх слоёв (пермаллоевый (Pу) 4 нм/Cu - 10 нм/Pу -15 нм) кругового сечения диаметром 200 и 120 нм. Намагниченности обоих магнитных слоев находятся в вихревом состоянии. Рассматривается случай, когда два магнитных слоя взаимодействуют через поля размагничивания и спин-поляризованный ток и, при этом, система находится во внешнем магнитном поле, перпендикулярном плоскости слоев. С помощью программного пакета SpinPM проведено численное моделирование связанной вихревой динамики. В частности, были изучены процессы динамической трансформации магнитных вихрей (переключение полярности вихревого кора) для различных значений токов и внешнего магнитного поля, перпендикулярного плоскости слоев. Проведено сравнение известных экспериментальных и численных результатов [2].

Литература

1. Звездин А.К., Звездин К.А., Хвальковский А.В. // УФН, 2008, 4, с.178.
2. N. Locatelli et al // Appl. Phys. Lett., 2013, 98, 062501.

© Степанов С.В., 2014 г.

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЙ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ КОНСТАНТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ И ПАРАМЕТРА ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ХАРАКТЕР ДИНАМИКИ СОЛИТОНА

Шафеев Р.Р., Назаров В.Н.*

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

*ИФМК УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

В данной работе проводится сравнение влияний одномерных «дефектов» в виде прямоугольной потенциальной ямы константы магнитной анизотропии и параметра обменного взаимодействия на эволюцию зародыша новой фазы вблизи точки спин-переориентационного фазового перехода I рода для антиферромагнетиков ромбической структуры на основании аналитических и численных методов.

В работах [1] и [2] был изучен вопрос о влиянии неоднородностей параметра обменного взаимодействия и константы магнитной анизотропии соответственно на динамику магнитной неоднородности. Было установлено, что в зависимости от размеров дефекта, ширины и глубины потенциальной ямы, солитон может вести себя по-разному. Были определены области, в которых магнитная неоднородность в виде бризера исчезает (рис. 1), локализуется на дефекте (рис. 2), либо выходит за пределы дефекта (рис. 3), образуя домен новой фазы.

Дальнейшее численное исследование позволило рассмотреть и сравнить поведение зародыша до точки фазового перехода I рода ($g < 0$) и после ($g > 0$), а также дополнить картину областей, в которых эволюция зародыша различается. В случае наличия неоднородности параметра обменного взаимодействия при $g < 0$ наблюдаются два вида динамики зародыша, соответствующие рис. 2 и рис. 3; при $g > 0$ зародыш, в результате сближения доменных стенок, превращается в затухающий бризер (рис. 1). В случае же наличия неоднородности константы магнитной неоднородности при $g < 0$ имеем

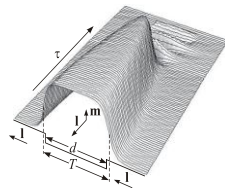


Рис. 1

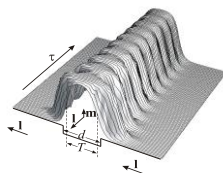


Рис. 2

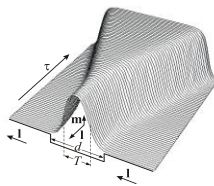


Рис. 3

виды динамики, показанные на рис. 1 и рис. 3, а при $g > 0$ могут существовать все три области.

Литература

1. Р.Р. Шафеев, В.Н. Назаров, М.А. Шамсутдинов. Вестник БашГУ, 2011, т. №16, №2, Уфа, 326 – 329 с.

2. В.Н. Назаров, Р.Р. Шафеев, М.А. Шамсутдинов, И.Ю. Ломакина. ФТТ, 2012, т. №54, 282 – 287 с.

© Шафеев Р.Р., Назаров В.Н., 2014 г.

УДК 523.11

РЕШЕНИЯ КРОВОЙ НОРЫ В ВАКУУМНОЙ ТЕОРИИ БРАНСА-ДИККЕ И В ВАКУУМНОЙ ТЕОРИИ ЭЙНШТЕЙНА

Хайбуллина А.Р., Измаилов Р.Н.

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
г. Уфа, Россия

Кротовая нора представляет собой гипотетическую топологическую особенность пространства-времени, представляющую собой в каждый момент времени «туннель» в пространстве. В настоящий момент кротовым норам посвящена обширная литература. Наиболее исследованными являются статические, сферически симметричные кротовые норы в силу их более высокой симметрии.

В данной работе исследуется решение статических сферически симметричных кротовых нор, а именно решение Бранса-Дикке в картинах Йордана и Эйнштейна с параметрами Робертсона.

Метрика статической сферически симметричной кротовой норы представлена в виде

$$ds^2 = -e^{2\Phi(t)} dt^2 + dl^2 + r(t)^2 [d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2], \quad (1)$$

Отметим, что пространственно-временное многообразие в случае задания в нем скалярно-тензорной теории является картиной Йордана, а в случае задания ОТО картиной Эйнштейна. Картина Йордана и картина Эйнштейна связаны между собой конформными преобразованиями [1].

На сегодняшний день известно регулярное решение в вакуумной теории Эйнштейна только для черной дыры Шварцшильда, а также для картины Йордана в теории Бранса-Дикке, которая представляет собой не черную дыру, а проходимую кротовую нору. Но в этом случае допустимый диапазон для наблюдения поля становится слишком узкой, чтобы получить в слабом

поле параметры Робертсона с положительной стороны горловины. Соответствующее решение в картине Эйнштейна также обеспечивает регулярную кротовую нору, и это дает правильные параметрические значения, но только до порядка «полтора». Мы считаем, что вклад второго порядка в принципе может отличаться между сигнатурами регулярной кротовой норы и особым решением Бугдаля в рамках теории Эйнштейна. Таким образом, на уровне регулярных решений, теория Бранса-Дикке в каждый раз предсказывает эффект, очень отличающийся от теории Эйнштейна. Насколько нам известно, различия между этими теориями до сих пор не получили должного внимания.

Целью нашей работы является сопоставление сингулярного решения с регулярным с общим параметром Робертсона. Мы доказываем, как вклад второго порядка к отклонению, в принципе может отличаться от решения кротовой норы сингулярного решения в картине Эйнштейна. Общий вывод состоит в том, что пространство-время регулярных кротовых нор никогда не сводятся до предела черной дыры Шварцшильда в вакуумной теории Эйнштейна [2].

Литература

1. <http://theor.jinr.ru/~diastp/winter10/lectures/Chernakova>
2. A. Khaybullina, R. Izmailov, K. K. Nandi, C. Cattani Regular Solutions in Vacuum Brans-Dicke Theory Compared to Vacuum Einstein Theory Advances in High Energy Physics Volume 2013, Article ID 367029, 7 pp.

© Хайбуллина А.Р., Измаилов Р.Н., 2014 г.

ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-In В РАМКАХ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОГО ПОДХОДА

Гущарина Н.В.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

В данной работе представлены теоретические исследования структурных и магнитных фазовых превращений в сплаве Ni-Mn-In в рамках феноменологического подхода. Опираясь на экспериментальные данные о существовании магнитного фазового перехода в мартенситной фазе из ферримагнитного в ферромагнитное состояние [1], в работе предложен термодинамический потенциал двухподрешеточного ферримагнетика кубической симметрии с учетом инверсии магнитного взаимодействия. В результате построили фазовую диаграмму в координатах модуль упругости 2-го порядка a – инверсия обменного взаимодействия αI и зависимость намагниченности M от модуля упругости 2-го порядка a на термодинамическом пути LL' :

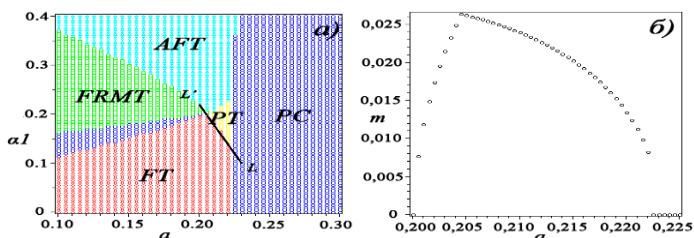


Рис. 1. а) Фазовая диаграмма сплавов Гейслера Ni-Mn-In $\alpha_1 - a$;

б) Зависимость намагниченности M от модуля упругости 2-го порядка a на термодинамическом пути LL'

На рис. 1 приложены следующие фазы: PC – парамагнитная кубическая, PT – парамагнитная тетрагональная, FT – ферромагнитная тетрагональная, AFT – антиферромагнитная тетрагональная, FRMT – ферримагнитная тетрагональная. При определенных параметрах найден термодинамический путь LL' , который описывает последовательность фазовых переходов, наблюдаемых экспериментально [1].

Исследование показало, что в сплавах Гейслера Ni-Mn-In вид фазовых диаграмм зависит от величины параметров свободной энергии системы.

Литература

[1] L.H. Bennett, V. Provenzano. Ferri- to ferro-magnetic transition in the martensitic phase of a Heusler alloy, Elsevier, с.34-37, 2012г.

© Гущарина Н.В., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ КУБИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ НА СВОЙСТВА МАГНИТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА ДЕФЕКТАХ (111)-ОРИЕНТИРОВАННОЙ ПЛАСТИНЫ ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ

Хуснутдинов И.А., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно, что на дефектах магнитных материалов при определенных условиях зарождаются магнитные неоднородности, которые существенно сказываются на их свойствах, в том числе и на их технических характеристиках: коэрцитивной силе, подвижности, предельной скорости и т. д. [1]. Они по структуре соответствуют 0 - градусным доменным границам (0° - ДГ) и бывают двух видов, которые различаются по их размерам (ширине и амплитуде 0° - ДГ) и энергии [2]. Исследования показывают, что второй вид 0° - ДГ (высокоамплитудный), может существовать как метастабильное состояние. Поэтому возникает необходимость в поиске условий, при которых высокоамплитудная неоднородность становится устойчивым образованием. Одним из таких факторов, является учет кубической анизотропией, которая всегда имеет место в эпитаксиально выращенных пленках ферритов-гранатов.

В работе рассматривается структура и устойчивые состояния 0° - ДГ обоих типов в (111)-ориентированной пластине ферритов-гранатов. В термодинамическом потенциале такого магнетика учитывается обменное взаимодействие, наведенная одноосная и естественная кубическая анизотропии, взаимодействие дефекта типа пластинчатого магнитного включения с магнитной подсистемой. Путем решения соответствующих уравнений Эйлера – Лагранжа с корректным учетом граничных условий находим распределение намагниченности, описывающие структуру магнитных неоднородностей. Их анализ показывает, что величина $\alpha = K_1/|K_u|$ (K_1 , K_u – константы, соответственно, кубической и одноосной анизотропии) существенно сказывается как на структуре обоих типов 0° - ДГ, так и на области их устойчивости. Кроме того, она вносит вклад и на величину их энергии. В работе так же исследуется поведение этих неоднородностей в области спин - перориентационного фазового перехода, который имеет место при значениях $\alpha = 4/3$.

Литература

1. Мишин Д.Д. Магнитные материалы. М.: Высшая школа, 1991. 384 с.
2. Вахитов Р.М., Магадеев Е.Б. ФММ, т.115, №9, с. 906-912(2014).

ОСОБЕННОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ МАГНИТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА ДЕФЕКТАХ С ГЛАДКИМ ПРОФИЛЕМ

В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Бурангулова Н.Г., Вахитов Р.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно, что наличие дефектов в магнетиках существенно влияет на их свойства и, в частности, на их доменную структуру. Характер взаимодействия дефектов с различными видами магнитных неоднородностей зависит, прежде всего, от характеристик дефекта.

В работе рассматриваются такие дефекты, которые вносят отрицательный вклад в термодинамический потенциал рассматриваемого ферромагнетика. В этом случае, при определенных условиях на дефектах зарождаются магнитные неоднородности типа 0° доменных границ (0° -ДГ) [1]. Как показано в работе [2], они бывают двух видов: малоамплитудный и высокоамплитудный, и различаются шириной, амплитудой (максимальным углом отклонения вектора намагниченности от его равновесного состояния в доменах) и энергией, причем условия зарождения в высокоамплитудной 0° -ДГ в значительной мере определяется профилем дефекта.

В работе рассматривается дефект с профилем, имеющим вид потенциальной ямы Пешля-Теллера, который относится к гладким функциям. Из расчетов следует, что при ширине дефекта $L < L_1$ на дефекте не образуются магнитные неоднородности, при $L_1 < L < L_2$ на дефекте закрепляются малоамплитудные 0° -ДГ, а при $L > L_2$ – высокоамплитудная 0° -ДГ (L_1, L_2 – характерные размеры дефекта). Полученный результат означает, что высокоамплитудные неоднородности вносят основной вклад в процессы намагничивания и перемагничивания магнитных материалов, содержащих крупные дефекты с гладким профилем.

Литература

1. Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р. ФТТ, т43, №1, с.65-71(2001).
2. Вахитов Р.М., Магадеев Е.Б. ФММ, т.115, №9, с. 906-912(2014).

ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА СТРУКТУРУ 180-ГРАДУСНОЙ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Бойко С.И., Вахитов Р.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Важным свойством ферромагнитных материалов является наличие в них доменной структуры. В настоящее время теоретическое исследование процесса образования доменов, а также их поведения во внешних полях является актуальной задачей, так как подобные явления находят широкое практическое применение в микро- и наноэлектронике.

Отличие реальных магнетиков от их идеализированных моделей заключается прежде всего в том, что в них имеются различного рода дефекты, которые существенно сказываются на их свойствах. Если в магнетиках имеет место доменная структура, то наличие дефектов в образце приводит в её искажению. На некоторых типах дефектов (которые дают отрицательный вклад в энергию магнетика[1]) зарождаются магнитные неоднородности с конфигурацией, подстраивающейся под профиль дефектов.

Существуют однако и другие виды дефектов, на которых не образуются магнитные неоднородности. Они, тем не менее, посредством взаимодействия с доменной границей (ДГ), также приводят к искажению доменной структуры образца, которое проявляется в виде изгиба прямой линии видимого изображения ДГ вблизи дефекта[2].

Такое поведение ДГ будет иметь место при перемагничивании одноосного ферромагнетика в постоянном магнитном поле. В этом случае происходит смещение 180-градусной ДГ и её задержка на дефектах (пиннинг ДГ), что является одной из основных причин магнитного гистерезиса и вносит существенный вклад в величину коэрцитивной силы образца, важной его технической характеристики. Следует отметить, что задача о взаимодействии 180-градусной ДГ с дефектами магнетика несмотря на её актуальность, не получила исчерпывающего решения. Поэтому возникает необходимость в изучении особенности взаимодействия дефектов кристалла с 180-градусной ДГ и его влияния на распределение намагниченности в одноосном ферромагнетике, чему и посвящена данная работа.

Литература

1. Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р. ФТТ 2001
2. A.S. Logginov, G.A. Meshkov, A.V. Nikolaev, E.P. Nikolaeva, A.P. Pyatakov. Journal of applied physics, **93**, p.510 (2008).

УПРАВЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЕМ КИНКА УРАВНЕНИЯ \sin -ГОРДОНА В ПОЛЕ ЧАСТОТНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ

Даукаев Т.Р., Закирьянов Ф.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Модифицированное с учётом диссипации и внешнего воздействия уравнение \sin -Гордона (МУСГ)

$$U_{tt} - U_{xx} + \sin U = -\beta U_t + F(t)$$

имеет множество физических приложений, в том числе в нелинейной физике, биофизике и нанoeлектронике. Движением кинка такого МУСГ можно управлять с помощью периодического внешнего воздействия. Наибольший интерес с точки зрения возможностей управления представляют случаи малых коэффициентов диссипации β и частотно-модулированной внешней силы с малой амплитудой A_0 .

Если рассматривать силу вида $F(t) = A_0 f(t)$, такую, что $|f(t)| \leq 1$, то с помощью метода Маклафлина-Скотта можно получить выражения для положения и скорости кинка. Можно показать, что зависимость скорости кинка от времени представляет собой незатухающие осцилляции в окрестностях кривой тренда (т. н. скорость тренда [1]).

Мы рассматриваем частотно-модулированную внешнюю силу; функция $f(t)$ в этом случае имеет следующий вид:

$$f(t) = \cos(\omega_0 t + A_1 \cos \omega_1 t).$$

Скорость тренда в случае внешнего воздействия такого вида быстро возрастает в начальный момент времени, а затем практически не изменяется. Можно считать, что движение кинка представляет собой осцилляции относительно некоторого положения равновесия, которое в свою очередь движется с постоянной скоростью в определённом направлении.

Если наблюдать за изменением установившегося значения скорости тренда при изменении одного из параметров внешнего воздействия $F(t)$, можно заметить влияние этих параметров на величину скорости. В случае параметров ω_0 и ω_1 даже небольшое их изменение влечёт за собой значительное изменение скорости. Таким образом можно заставить кинк двигаться в определённом направлении либо колебаться относительно неподвижного положения равновесия.

Литература

1. Шаповалов А. В., Краснобаева Л. А. Солитоны уравнения синус-Гордона. – Томск: Томский государственный университет, 2009. 192 стр.

© Даукаев Т.Р., 2014 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ ДИНАМИКИ ДОМЕННЫХ СТЕНОК В МНОГОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

Абакумова Н.Н., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Кудрявцев Р.В.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Многослойные магнитные структуры [1,2] часто представляют собой чередующиеся слои двух материалов. Изучается динамика спиновых волн и магнитных неоднородностей, распространяющихся в таких системах перпендикулярно границам раздела слоев [3,4]. Наличие тонкого слоя с параметрами магнитной анизотропии меньшей, чем в соседних слоях, может приводить к новым динамическим эффектам, таким как отражение движущейся доменной границы (ДГ) от «притягивающего потенциала».

В настоящей работе исследуется влияние пространственной модуляции параметров магнитной анизотропии и обмена на динамику ДГ в трех- и пятислойном ферромагнетике с учетом возбуждения локализованных магнитных неоднородностей, внутренних мод колебаний ДГ и излучения объемных волн. Найдены возможные частоты колебаний генерируемых в тонких слоях локализованных магнитных неоднородностей. Показано, что коллективные эффекты влияния слоев на динамику ДГ во многом связаны с резонансным обменом энергией между локализованными волнами. Найдено наличие критического расстояния между двумя тонкими слоями, разделяющего две области с качественно различным поведением системы. Доказана возможность существования диапазона параметров, в котором для прохождения ДГ через оба слоя требуется существенно меньше энергии. Показано, что затухание и внешняя сила противодействуют возникновению резонансного отражения ДГ от притягивающего тонкого слоя, однако вызывающая его причина – резонансный обмен энергией между локализованными волнами – по-прежнему имеет место.

Литература

1. A. Hubert, R. Schafer. *Magnetic domains*. Springer-Verlag // Hedelberg, Berlin, 1998.
2. М.А. Шамсутдинов и другие. Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны // Москва: Наука, 2009.
3. Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р. // *Физика металлов и металловедение*, 2009, **108**(6), с. 532.
4. E.G. Ekomasov, R.R. Murtazin, O.B. Bogomazova, A.M. Gumerov // *J. Magn. Magn. Mater.*, 2013, **339**, с. 133.

© Абакумова Н.Н., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р.,
Кудрявцев Р.В., 2014 г.

БЕЗРЕДКОЗЕМЕЛЬНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ МАГНИТЫ

Таскаев С.В.

Челябинский государственный университет, г.Челябинск

Постоянные магниты являются стратегической продукцией, обладающей широчайшей областью применения: начиная от МЭМС и НЭМС технологий, в которых применение ограничивается милли- и микрограммами магнито жесткого материала, заканчивая высокомоощными генераторами электроэнергии в которых используются тонны современных постоянных магнитов.

Во всех современных постоянных магнитах с высокой энергией (см. рис.1) используются редкоземельные элементы, что является на сегодняшний день основным фактором, сдерживающим или удорожающим производство продукции, содержащей такого рода материалы. Альтернативы постоянным магнитам на основе сплавов Sm-Co или Nd-Fe-B на сегодняшний день нет, это самые используемые магнито жесткие материалы, однако существуют также и другие магнитные сплавы, но со значительно меньшим энергетическим производением.

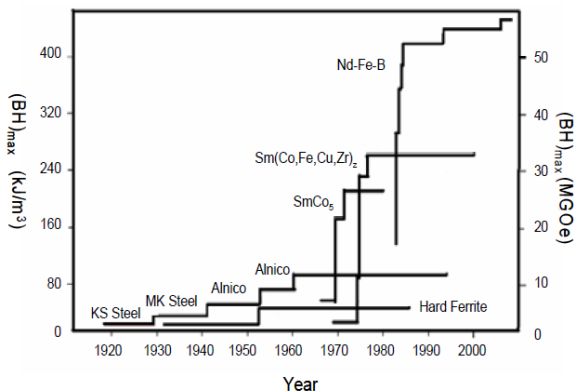


Рис. 1. Энергетическое производство семейств постоянных магнитов

Однако, как показывают исследования, существуют сплавы, не содержащие редкоземельных элементов, и одновременно обладающие свойствами хорошего магнито жесткого материала [1]. В то время как кристаллическая решетка основного множества сильномагнитных переходных металлов является высокосимметричной и, как следствие эти материалы показывают малые величины магнитокристаллической анизотропии, некоторые соединения переходных металлов формируют

сверхструктуру $L1_0$ (пространственная группа $P4/mmm$ или структура типа $CuAu I$) проявляющую одноосную магнитную анизотропию (см. рис.2).

Среди такого рода материалов выделяются два наиболее интересных соединения, обладающие сверхструктурой типа $L1_0$, это соединения $FeNi$ и $MnAl$ (см. Табл. 1). Синтез соединения $FeNi$ со структурой $L1_0$ достаточно сложен и предполагает использования интенсивных потоков нейтронов (Л.Неель, 1964), однако оно часто встречается в метеоритах (фаза тетратенита).

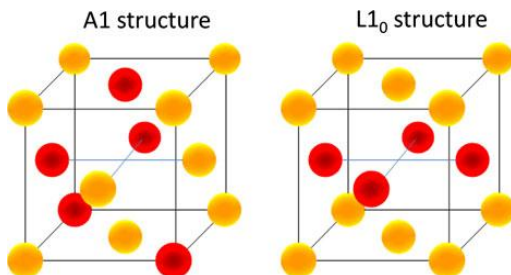


Рис. 2. Схематическое изображение гранцентрированной кубической (слева) и $L1_0$ (справа) кристаллических решеток

К перспективным соединениям, на основе которых возможно будут разработаны новые типы безредкоземельных постоянных магнитов, также относятся следующие семейства сплавов: $Fe-X$ ($X=Pb, Ni, Bi$), $Mn-X$ ($X=Ga, Ge, Al, Bi$). В докладе обсуждаются возможные пути синтеза и характеристики этих интерметаллидов.

Таблица 1. Характеристики сплавов $FeNi$ и $MnAl$

Composition	Saturation Magnetization $4\pi M_S$ (kG)	Anisotropy Constant K_U (ergs/cm ³)	Curie Temperature T_C	Theoretical Maximum Energy Product $(BH)_{max}$ MGOe
$L1_0$ FeNi	16	$0.32 \times (10)^7$	-500 °C/-770 K	40*
MnAl	7.5	$1.7 \times (10)^7$	250 °C/-520 K	14

Calculated as $(BH)_{max} = H_C(M_S - H_C) \sim H_A^ M_S$.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-07-00676-a и гранта Президента МД-770.2014.2.

Литература

1. L.H.Lewis and F.Jimenez-Villacorata. Perspectives on Permanent Magnetic Materials for Energy Conversion and Power Generation. Metallurgical and Materials Transactions A. 44A (2013) S1-S20.

© Таскаев С.В., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ ТИПА ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ

Халилова Я.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из активно развиваемых в последнее время направлений в магнетизме является исследования свойств материалов, в которых происходит магнитное и электрическое упорядочение. Скорее всего, они найдут широкое применение в спинтронике. К таким материалам, проявляющим магнитоэлектрические свойства, относятся пленки ферритов-гранатов, в которых был обнаружен эффект смещения доменных границ под действием неоднородного электрического поля, создаваемого заостренным электродом. Он вызван неоднородным магнитоэлектрическим взаимодействием. Неоднородное электрическое поле может создать в области локализации доменной границы неоднородно наведенную анизотропию, которая проявляется как «дефект».

В работе рассматривается флексомагнитоэлектрический механизм влияния электрического поля на структуру 180-градусной доменной границы в одноосном ферромагнетике. В общем, наличие неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия в магнетике приводит к тому, что под действием электрического поля меняется топология 180-градусной доменной границы, то есть в стенке появляются «магнитные заряды», которые способствуют появлению электрической поляризации. Стенка заряжается и притягивается к заряженному электроду. Величина поляризации прямо пропорционально константам неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия и обратно пропорциональна ширине доменной границы, а знак определяется киральностью доменной границы и направлением напряженности электрического поля.

Литература

1. Р.М. Вахитов, А.Т. Харисов, Ю.Е. Николаев // Доклады академии наук. 2014. Т. 455. №2. 150-152.
2. А.П. Пятаков, А.К. Звездин // УФН. 2012. Т. 182. № 6. С. 593-620.

© Халилова Я.А., 2014 г.

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПЕРОВСКИТОВЫХ СТРУКТУРАХ В ОБЛАСТИ МАГНИТОАКУСТИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА

Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Теория магнитоэлектрического взаимодействия или магнитоэлектрического эффекта в мультиферроиках является одной из наиболее актуальных областей физики конденсированного состояния.

В данной работе, исходя из модельного гамильтониана, состоящего из энергий магнитной, сегнетоэлектрической, упругой подсистем и энергии их взаимодействия ведется расчет мацубаровской функции Грина

$$G(\tau) = G(\bar{k}_1 \tau_1; \bar{k}_2 \tau_2) = -\langle T_\tau c_{k1}(\tau_1) c_{k2}^+(\tau_2) \rangle,$$

где $c_k(\tau) = e^{H\tau} c_k e^{-H\tau}$, T_τ - оператор хронологического упорядочения, а c_k, c_k^+ - бозе-операторы. По этим данным проводится вычисление плотности состояний $A(\omega)$, которая выражается через мацубаровскую функцию Грина с помощью соотношения

$$G(\tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} A(\omega). \quad (1)$$

Оно связывает спектральную плотность с мацубаровской функцией Грина как функцией термодинамического времени. Следует отметить, что извлечение $A(\omega)$ из последнего соотношения (1) представляет собой трудную задачу. Мы решаем ее с помощью метода максимальной энтропии. Этот метод был развит и детально описан в работах [1]. Из физических соображений величину $A(\omega)$ (нормированную на единицу) можно рассматривать как некоторое распределение вероятности. Это позволяет рассматривать решение уравнения (1) при статическом наборе множества значений $G(\tau)$ как наиболее вероятную функцию $A(\omega)$. Критерий, по которому выбирается такая $A(\omega)$, устанавливается в рамках метода максимальной энтропии.

Литература

1. Silver R.N., Sivia D.S. and Gubernatis J.E. Maximum –entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data // Phys. Rev. B, 1990, 41, 2380.

© Нугуманов А.Г., 2014 г.

**РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОХОЖДЕНИЯ СПИНОВОЙ ВОЛНЫ
В МУЛЬТИСЛОЙНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ**

Ахметова А.А., Харисов А.Т.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Спиновые волны, распространяющиеся в ферромагнитных пленках, используются для создания приборов аналоговой обработки сигналов в диапазоне сверхвысоких частот. Такие волны обладают рядом преимуществ, например, малые потери при распространении, большие возможности управления дисперсионными характеристиками, широкий диапазон рабочих частот и т.д. [1]. В связи с чем, такие мультислойные структуры, называемые также магнитными кристаллами, считаются перспективными материалами в современной микроэлектронике. По данной причине представляется важным исследование особенностей распространения спиновых волн в данных структурах.

В работе было рассмотрено прохождение спиновой волны в мультислойной ферромагнитной структуре. Для решения данной задачи используют два метода: квантово-механический подход и феноменологический метод [2], применённый в данной работе. Согласно [2], для описания распространения спиновой волны применяется уравнение Ландау-Лифшица. Первоначально осуществляется расчет коэффициента отражения спиновой волны от отдельного периода, при этом представляется интересным использование граничного условия нового типа, приведенного в [3]. Для расчета коэффициента прохождения спиновой волны в мультислойной структуре была использована методика, предложенная в [4]. В данной работе были получены выражения для коэффициента прохождения спиновой волны в мультислойной структуре, рассмотрена его зависимость от модуляции некоторых параметров ферромагнитной структуры при учете граничного условия нового типа.

Литература

1. Nikitov S.A., Tailhadesa Ph., Tsaib C.S. // J. Magn. Magn. Mater. 2001. V. 236. P. 320–330.
2. Гуревич А.Г., Мелков Г.А. Магнитные колебания и волны. М: Наука, 1994. 462 с.
3. Шамсутдинов М.А., Хабибуллин И.Т., Харисов А.Т., Танкеев А.П. // ФММ. 2009. Т. 108. №. 4. С. 345–358.
4. Игнатович В.К. // УФН. 1986. Т.150. №1. С. 145–158

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОФИЗИКА»

УДК 61:53+681.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСНОВНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПУЛЬСОВОЙ ВОЛНЫ

Ганеев Д.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Работа сердечно-сосудистой системы человека является сложным колебательным процессом. Характерная вариабельность частоты сердечных сокращений свидетельствует о том, что данная система функционирует в нерегулярном режиме [1]. В связи с этим представляет интерес получения опытных данных основных статистических характеристик пульсовой волны.

Для исследования была привлечена небольшая группа лиц. У каждого были сняты пульсограммы и рассчитаны следующие характеристики: спектральная плотность мощности, автокорреляционная функция. Было установлено, что спектр колебаний пульсовой волны содержит дополнительные высшие гармоники, причем их число увеличивается с увеличением времени измерения. Автокорреляционная функция пульсограммы демонстрирует, что существует влияние предыдущего сокращения сердца на последующее.

Измерение пульсовой волны осуществлялось с помощью web-камеры. Метод регистрации основан на том, что интенсивность светового излучения, прошедшего через область исследуемой ткани (концевая фаланга пальца), зависит от кровенапонения.

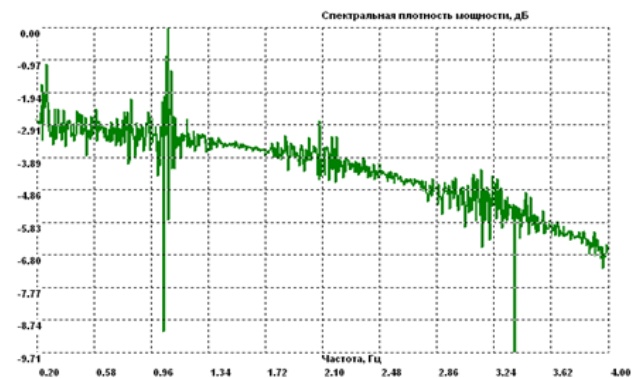


Рис. 1. Спектральная плотность мощности пульсовой волны

Литература

1. Анищенко В. С. Знакомство с нелинейной динамикой: Лекции соросовского профессора: Учеб. пособие. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002. 144 с. © Ганеев Д.Б., 2014 г.

РАСЧЁТ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ОБЪЁМНЫХ ЗАРЯДОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Захаров Ю.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Во многих практических приложениях приходится иметь дело с сформированными из органических соединений коллоидными растворами, содержащими наночастицы. Примерами таких растворов являются нефтяные эмульсии, содержащие глобулы, сформированные каплями воды, обтянутыми тонкой плёнкой. Размеры таких глобул обычно составляют десятые доли микрона. Один из часто применяемых способов разрушения водонефтяной эмульсии – электрический способ (разрушение плёнок переменным электрическим полем). Большой интерес представляет математическое моделирование процессов формирования глобул и их взаимодействия с электромагнитными полями.

Целью данной исследовательской работы является создание предназначенной для инженерных расчётов простой математической модели взаимодействия субмикронных наночастиц в коллоидных растворах с электрическими и электромагнитными полями. В работе использованы 3 одномерные электростатические модели описания электронных процессов.

1. Модель со сферической симметрией локализации неравновесных зарядов. В этом приближении можно предположить, что все неравновесные заряды сконцентрированы на поверхности сферы радиуса r_0 .

2. Модель с радиальной симметрией локализации неравновесных зарядов. В этом приближении можно предположить, что все неравновесные заряды сконцентрированы на поверхности цилиндра радиуса r_0 .

3. Модель однородного электрического поля. В этом приближении можно предположить, что все неравновесные заряды сконцентрированы на 2 параллельных плоскостях, находящихся на расстоянии d .

Во всех 3 моделях получаются одинаковые формулы для расчёта времени релаксации τ , но разные формулы для сопротивлений и ёмкостей. Проведены расчёты времён релаксации и резонансных частот для разных значений удельных сопротивлений водопроводной воды, взятых из [1]. Полученные величины резонансных частот хорошо согласуются с экспериментальными данными по частотам максимальных потерь в воде.

Литература

1. Статья «Электрическая часть электростанций», страница «Удельное сопротивление грунта и воды» с сайта <http://forca.ru/knigi/arhivy/elektricheskaya-chast-elektrostanciy-108.html>

© Захаров Ю.А., 2014 г.

СЕКЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ РАДИОТЕХНИКИ И СВЯЗИ»

УДК 621.391.63

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ

Гайсина Д.Ф., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Волоконная оптика в настоящее время получила широкое развитие и находит применение в различных областях науки и производства. В данной работе мы рассмотрим одномодовое волокно SMF 28e и рассчитаем необходимые параметры линии связи на участке Салават –Кумертау. Энергетическая длина участка $L_э$ рассчитывается по формуле:

$$P_{им} - \alpha_{и-вс} - N_H \alpha_H - \alpha L_э - \alpha_{вс-сд} \geq P_{фдм} + \Theta$$

$$-0,44L_э \geq -24$$

$$L_э = 54 \quad \text{км- энергетическая длина участка.}$$

Так как длина трассы Салават –Кумертау 76 км, что больше рассчитанной длины, то необходимо применить оптический усилитель.

Применим усилитель на примесном волокне. Он обеспечивает усиление большого числа каналов в широкой области длин волн одновременно.

Длина регенерационного участка определяется из выражения:

$$L_d = \frac{\pi \times c}{8\lambda^2 \times |D| \times B^2} =$$
$$= \frac{3.14 \times 3 \times 10^8 \text{ м/с}}{8 \times 1550 \times 10^9 \text{ м} \times 0.85 \times 10^{-15} \text{ с/м} \times 10000 \text{ Мбт/с}} = 38 \text{ км}$$

Значение данного выражения указывает на необходимость компенсации дисперсии. Компенсатор дисперсии содержит катушку волокна с отрицательной дисперсией. Данный проект поможет предоставить потребителям весь спектр необходимых услуг связи.

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК X-ОБРАЗНОГО ОПТИЧЕСКОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ С ОБЛАСТЬЮ СУЖЕНИЯ

Гайфуллина А.С., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Разветвители широко используются при построении распределенных волоконно-коаксиальных сетей кабельного телевидения, а также в проектах полностью оптических сетей и при использовании технологий WDM и DWDM. В общем случае, оптический разветвитель представляет собой многопортовое устройство, в котором излучение, подаваемое на часть входных оптических портов, распределяется между его остальными оптическими портами. Исследуем X-образный ответвитель с областью сужения.

В формате основной программы САПРа VeamPROF внешний вид такого разветвителя показан на рисунке 1.

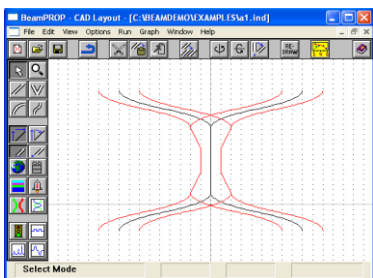


Рис. 1. Оптический разветвитель в формате САПР-а

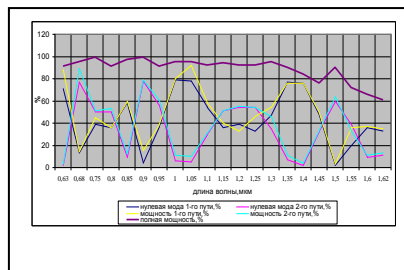


Рис. 2. График зависимости мощности от длины волны

Мы исследуем зависимость выходной мощности от длины волны (рис.2).

Полная мощность, переносимая вдоль сложного волновода, которым является направленный ответвитель, остается неизменной. Кроме того, она осциллирует из одного световода в другой. Поведение такого волновода подобно поведению двух связанных одинаковых маятников.

Длина биений возрастает по экспоненциальному закону, если увеличить расстояния между световодами. Физической причиной перекачки мощности является интерференция, или биения, полей основных мод, определяющих полной поле.

Посредством САПР VeamPROF можно исследовать различные модели ответвителей и спроектировать требуемый. В будущем можно приступить к его изготовлению, что позволит избежать лишних затрат.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАЗВЕТВИТЕЛЯ С РАЗЛИЧНЫМИ ТИПАМИ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ

Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время на основе разветвителей строятся распределенные волоконно-оптические сети передачи данных, а также полностью оптические сети с использованием технологии DWDM. Многоканальный разветвитель состоит из семи х-образных ответвителей, полученных имплантацией протонов в GaAs или в кристалле LiNbO₃ при легировании Ti. Рассмотрим распространение излучения в планарном оптическом разветвителе. Как видно на рис. 1, мощность в выходных каналах распределяется неравномерно, в первом случае ~ 60 % приходится на первые четыре канала, во втором случае мощность растекается по всем восьми каналам.

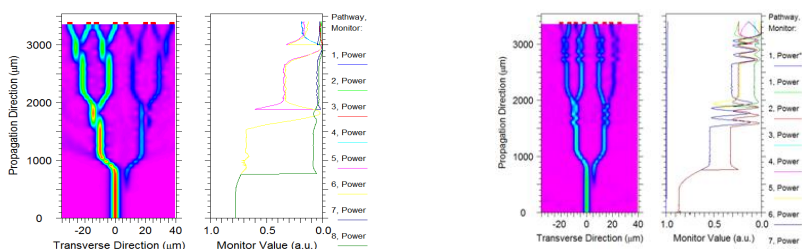
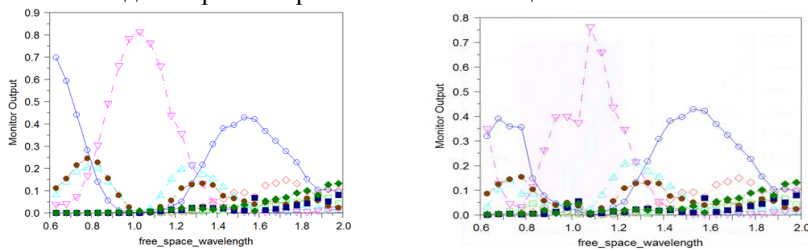


Рис.1. Распространение излучения в многоканальном оптическом разветвителе

Исследуем, как меняется распределение излучения в разветвителе в зависимости от типа применяемого источника излучения. При сравнении одномодового и многомодового источника в диапазонах 630 – 800 нм и 1310 – 1550 нм видим неравномерное изменение мощности каналов.



Это объясняется тем, что кроме нулевой моды распространяются моды высших порядков, которые вносят свой вклад в распределение мощности.

УДК 517.9, 519.633

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИОДНЫХ ЛАЗЕРОВ ПРИ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Тажетдинов З.Ф., Вальшин А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Диодный лазер — полупроводниковый лазер, построенный на базе диода. Его работа основана на возникновении инверсии населённости в области р-п перехода при инжекции носителей заряда. Длина волны излучения лазерного диода зависит от ширины запрещённой зоны между энергетическими уровнями р- и п-областей полупроводника.

Коэффициент полезного действия лазера – это эффективность преобразования электрической энергии в оптическую. Лазерные системы, в которых используются только диодные лазеры, могут достигнуть самой высокой эффективности, около 60 %. КПД твердотельных лазеров с накачкой диодного лазера достигает ~25%.

В настоящее время диодные лазеры находят широкое применение как источники накачки твердотельных лазеров. В связи с этим возникает необходимость измерения электрических и оптических параметров диодных лазеров.

Нами проведены измерения электрических и оптических параметров диодных лазеров.

В частности, в качестве образца была использована лазерная указка на $\lambda=650$ нм выходной мощностью 300 мВт.

Измерены зависимости выходной мощности излучения диодного лазера от мощности накачки в непрерывном, импульсном и ВЧ импульсно-периодическом режимах. Определены оптимальные режимы работы в непрерывном, в импульсном режимах.

Показана перспективность ВЧ импульсно-периодического режима для увеличения импульса выходной мощности диодного лазера по сравнению с импульсным режимом без существенного уменьшения коэффициента светоотдачи.

© Тажетдинов З.Ф., Вальшин А.М. 2014 г.

УДК 517.9, 519.633

ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕТОДИОДОВ ПРИ ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Абулкарамов В.В., Вальшин А.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Светодиод или светоизлучающий диод(СИД) - полупроводниковый прибор, излучающий некогерентный свет при пропускании через него электрического тока. Полупроводниковые светоизлучающие диоды - класс твердотельных приборов, в которых электрическая энергия непосредственно преобразуется в световую. В основе их действия лежит инжекционная электролюминесценция. СИД решают задачу преобразования электрических сигналов оптические, а так же служат эффективными по КПД источниками света.

КПД светодиодов, который у первых промышленных устройств был меньше 1%, удалось поднять выше 50%, а светоотдача выросла с 1 до 150 люмен на ватт, что вдвое больше, чем у энергосберегающих люминесцентных ламп. Теоретический максимум светоотдачи для совершенно идеального источника белого света около 250 лм/Вт, так что до предела осталось не так уж и далеко. Производители светодиодов декларируют срок службы до 100 тысяч часов, или 11 лет непрерывной работы.

Нами проведены измерения электрических и оптических параметров светодиодов.

Измерены зависимости выходной мощности излучения светодиода от мощности накачки в непрерывном, импульсном и ВЧ импульсно-периодическом режимах. Определены оптимальные режимы работы в непрерывном, в импульсном режимах.

Показана перспективность ВЧ импульсно-периодического режима для увеличения импульса выходной мощности светодиода по сравнению с импульсным режимом без существенного уменьшения коэффициента светоотдачи.

© Абулкарамов В.В., Вальшин А.М. 2014 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ С УСИЛИТЕЛЕМ EDFA

Кудабаева З.Ю., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из основных узлов современных волоконно-оптических систем передачи со спектральным уплотнением каналов (WDM- и DWDM-систем) является оптический усилитель. Наиболее распространенными в настоящее время являются эрбиевые волоконные усилители.

В работе рассмотрено использование Bitline EDFA Calculator для моделирования усилителя мощности. Типичное значение выходной мощности для усилителей с одним лазером накачки доходит до 16 дБм, с двумя лазерами накачки до 26 дБм. Обычно усилитель мощности работает в режиме насыщения, при котором уровень сигнала на входе усилителя достаточно большой. Входной сигнал для усилителя мощности на длине волны $\lambda=1550$ нм равен -4 дБм. Усилитель мощности, как первый каскад усиления в линии связи, должен вносить минимальный шум. Это обеспечивается при использовании длины волны накачки 980 нм.

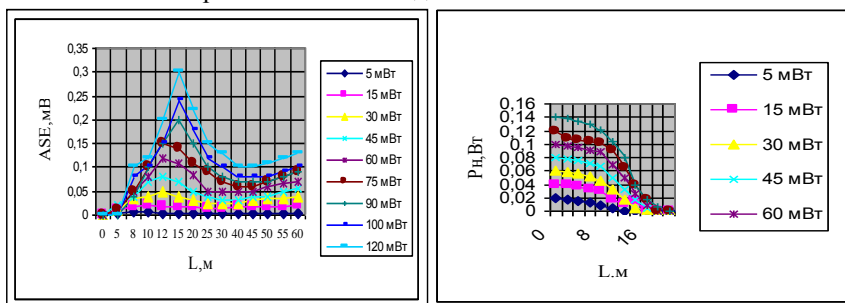


Рис.1. а) Распределение мощности шума ASE по длине волокна при различных уровнях накачки для модели усилителя мощности б) Распределение мощности накачки по длине волокна при его различных уровнях для модели усилителя мощности

Уровень вносимых шумов оптическим усилителем также зависит от длины легированного волокна. На рис.1а представлено распределение мощности шума ASE по длине волокна при различных уровнях накачки для усилителя мощности. Зависимость была вычислена в Bitline EDFA Calculator при следующих параметрах оптического усилителя: $D=100$ ppm, $L=60$ м, $P_H=5 \div 120$ мВт, $\lambda_H=980$ нм, $\lambda_C=1550$ нм и $P_{вх}=-4$ дБм.

Полученные модели при реальных волоконно-оптических линиях связи можно использовать при проектировании.

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОГО РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С

Мухаметдинова О.Э.¹, Автократова Е.В.¹, Исанбердина Л.Р.²,
Ситдииков О.Ш.^{1,3}, Маркушев М.В.¹

¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия,

²Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

³Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исследовали параметры сверхпластичности (СП) алюминиевого сплава 1570С (Al-5Mg-0,2Sc-0,08Zr) в двух структурных состояниях, полученных равноканальным угловым прессованием (РКУП) гомогенизированного слитка за 3 и 8 проходов при температуре 325 °С. Испытания на растяжение проводили в интервале температур 350-520 °С и начальных скоростей деформации 10^{-3} - 10^{-1} с⁻¹ на образцах с размерами рабочей части 1,5×3×6 мм, ось которых совпадала с направлением последнего цикла прессования. Структуру сплава исследовали методами оптической и электронной микроскопии.

Установлено, что в результате 3 проходов РКУП, исходная структура с равноосными зернами размером ~ 25 мкм трансформировалась в структуру, содержащую около 30% новых зерен размером 1-2 мкм, формирующихся вдоль границ исходных зерен. Даже с такой структурой сплав демонстрировал высокоскоростную СП с удлинениями более 2000% при скоростях деформации $\sim 1 \times 10^{-2}$ с⁻¹ и температурах выше 475 °С.

В результате РКУП до 8 проходов в заготовках была сформирована структура на 70% состоящая из ультрамелких зерен размером ~1 мкм. Формирование такой структуры обеспечило достижение как высокоскоростной, так и низкотемпературной СП с еще большими удлинениями и при больших скоростях деформации. Удлинения ~ 3300 % были получены при температуре 475 °С и скорости $\sim 5 \times 10^{-2}$ с⁻¹, а при температуре 350 °С и скорости $\sim 1 \times 10^{-2}$ с⁻¹ они составили более 1000 %.

Обсуждено влияние типа структуры, формирующейся при РКУП, на особенности его механического поведения при растяжении в широком температурно-скоростном интервале.

© Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Исанбердина Л.Р.,
Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В. 2014 г.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СРЕДНЕУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ

Протасова Е.О., Абрамова М.М., Караваева М.В.

Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

Стали широко применяются в качестве конструкционных материалов благодаря их относительной дешевизне и хорошим эксплуатационным свойствам. Развитие методов интенсивной пластической деформации (ИПД) позволяет добиться уникальных свойств в результате формирования нанокристаллической структуры (НК) в объемных материалах [1-3]. Создание НК материалов является одним из перспективных направлений в области материаловедения из-за их уникальных физико-механических свойств.

В работе среднеуглеродистая сталь 45 подвергалась ИПД методом равноканального углового прессования (РКУП) мартенситной структуры, сформированной закалкой в воду с температуры 800 °С. РКУП проводили при температуре 350 °С по режиму Вс, количество проходов 8, угол пересечения между каналами 120 °. После РКУП размер зерна феррита составил 237±18 нм, размер карбидов оказался равным 17±1 нм. После отжига при температуре 350 °С в течение 1 часа размер ферритного зерна стали составил 285±22 нм, размер карбидов 39±2 нм. Микротвердость стали 45 в состоянии поставки составляла 260±12 НВ, после закалки возросла в 2,6 раза. После РКУП микротвердость уменьшилась в 1,6 раза и составила 430±15 НВ. После отжига при температуре 350 °С микротвердость оказалась равной 340±13 НВ.

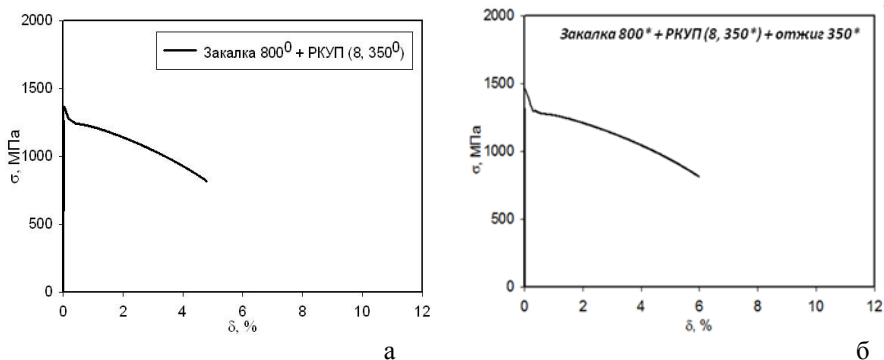


Рис. 1. Результаты проведения механических испытаний на одноосное растяжение стали 45; а – после РКУП, б – после РКУП и отжига при температуре 350°C

Проведенные механические испытания на одноосное растяжение показали, что после РКУП и после РКУП и отжига появляется зуб текучести, вероятно связанный с образованием атмосфер Коттрелла, затем, как видно на рис. 1, следует снижение напряжения из-за локализации деформации.

Также была дана оценка вкладов упрочнения в пределы текучести стали 45 после РКУП и после РКУП и отжига при температуре 350 °С в соответствии с законом Холла-Петча:

$$\sigma_T = \sigma_0 + \sigma_{\text{Дисл}} + \sigma_{\text{ЗГ}} + \sigma_{\text{Дисп}} + \sigma_{\text{ГР}} \quad (1)$$

Оказалось, что наибольшие вклады в предел текучести стали 45 после деформации вносят зернограничное, дисперсионное и дислокационное упрочнения, которые составили 56 %, 22 % и 15 % от предела текучести соответственно. Степень накопленной деформации в результате прохождения 8 проходов РКУП составляет $\epsilon=5$, что приводит к увеличению общей протяженности границ зерен и измельчению карбидных частиц.

Последующий отжиг после деформации заметно уменьшает дислокационное упрочнение, вероятно из-за активизации процессов рекристаллизации и возврата. В основном в предел текучести вносят вклады: зернограничный и дисперсионный, которые составляют 63 % и 24 % от предела текучести соответственно.

Таким образом, РКУП мартенситной структуры стали 45 формирует НК структуру, а также повышает уровень микротвердости. Основные вклады упрочнения в предел текучести среднеуглеродистой стали после РКУП – это зернограничный, дисперсионный и дислокационный; после РКУП и отжига при температуре 350 °С основными вкладками упрочнения в предел текучести стали 45 являются зернограничный и дисперсионный.

Литература

1. Валиев Р. З., Александров И. В. Объемные наноструктурные металлические материалы. М.: ИКЦ «Академкнига», 2007. 398 с.
2. Добаткин С. В., Арсенкин А. М., Попов М. А. и др. Получение объемных нано- и субмикроструктурных материалов методом интенсивной пластической деформации // МиТОМ. 2005. №5. с. 29-34
3. Valiev R. Z., Islamgaliev R. Люб Alexandrov I. V. // Progress in Material Science. 2000. V.45, No. 2. P. 102-189

КЛАССИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ ГРАФИНОВЫХ СЛОЕВ

Беленкова Т.Е., Чернов В.М.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Исследования гибридных соединений углерода, состоящих из атомов в состояниях с различной гибридизацией, представляют большой научный и практический интерес, так как, меняя соотношение атомов в различных состояниях можно изменять свойства материалов без изменения их химического состава. Одной из разновидностей таких углеродных материалов являются материалы, состоящие из sp и sp^2 гибридизированных атомов, получивших название графиты (*graphyne*), потому, что в их структуре имеются фрагменты полииновых (*poliune*) цепочек. Экспериментально синтезировать первую из структурных разновидностей графиты – графидин удалось только в 2010 году. В работе разработана структурная классификация графитовых слоев, на основе которых описан ряд новых структурных разновидностей не известных ранее.

Формально, структура графитов может быть описана как структура плоских сеток, образованных узлами, связанными двумя или тремя связями с соседними узлами. Модельное получение графитовых слоев возможно из графеновых слоев, в которых все атомы находятся в sp^2 трехкоординированных состояниях. Для получения графиты необходимо заменять углерод-углеродные связи между атомами в трехкоординированных sp^2 состояниях на фрагменты полииновых цепочек. В результате замен одной, двух и трех связей у каждого sp^2 атома графенового слоя получаются соответственно γ , β , и α структурные разновидности графиты. Возможно существование семи основных структурных разновидностей графиты: α , β_1 , β_2 , β_3 , γ_1 , γ_2 и γ_3 . Основные полиморфы графиты состоят из атомов в двух кристаллографически эквивалентных состояниях. Другие разновидности графиты можно построить, варьируя длины карбиновых цепочек полииновой разновидности или в результате комбинации семи основных полиморфов графиты, получая структуры α - β , β - γ , α - γ -графитов и др. Расчет геометрически оптимизированной структуры основных полиморфных разновидностей графиты был выполнен полуэмпирическими квантово-механическими методами MNDO, AM1, PM3 и *ab initio* расчетами. В результате расчетов были найдены значения их структурных параметров и энергии сублимации. Энергии сублимации у графитовых слоев меньше чем у слоя гексагонального графена, однако, выше энергии сублимации фуллерена C_{20} , который экспериментально синтезирован и устойчив при нормальных условиях.

© Беленкова Т.Е., Чернов В.М., 2014 г.

ПОЛУЧЕНИЕ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ФАЗ ИЗ 3D-ГРАФИТОВ

Грешняков В.А., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

В настоящее время активно развиваются различные подходы поиска новых углеродных кристаллических структур. Одним из таких современных подходов является методика получения фаз и наноструктур, базирующаяся на кристаллографической размерности предшественника и его атомном координационном числе [1]. В данной методике предложен новый способ получения структур алмазоподобных фаз в процессе сшивки новой группы предшественников [3D_c,3] – трехмерных графитов, состоящих из 3-координированных атомов.

В результате проведенного теоретического анализа и модельных расчетов установлены структуры трех новых алмазоподобных фаз LA9, LA10 и CA12, получаемых из 3D-графитов [2]. Для фаз LA9, LA10 и CA12 при использовании метода LDA-DFT были рассчитаны длины связей, углы между связями, деформационный параметр, параметры элементарных ячеек, плотности, полные энергии, плотности электронных состояний и ширины запрещенных зон [2]. Значения некоторых структурных характеристик и свойств приведены в таблице.

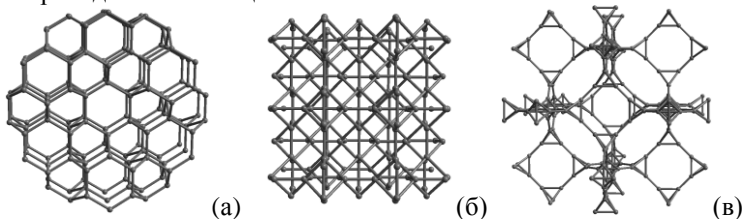


Рис. 1. Кристаллические структуры алмазоподобных фаз: (а) LA9; (б) LA10; (в) CA12

Таблица. Структурные параметры и свойства углеродных фаз

Фаза	Кольцевой параметр	Пространственная группа	a, Å	c, Å	Z, ат.	ρ, г/см ³	E _{total} , эВ/ат.	Δ, эВ
LA1 (алмаз)	6 ⁶	Fd3̄m	3.554	3.554	8	3.556	-157.87	5.7
LA9	6 ⁶	R3̄m	7.027	2.518	18	3.335	-157.26	2.1
LA10	4 ¹ 5 ³ 8 ²	I4 ₁ /amd	3.575	8.595	16	2.904	-157.26	4.3
CA12	3 ³ 8 ¹ 12 ²	Im3̄m	9.153	9.153	48	1.248	-156.17	2.0

Литература

1. Беленков, Е. А. Классификация структурных разновидностей углерода / Е. А. Беленков, В. А. Грешняков // ФТТ, 2013, т. 55, с. 1640-1650.
2. Беленков, Е. А. Новые структурные модификации алмаза: LA9, LA10, CA12 / Е. А. Беленков, В. А. Грешняков // ЖЭТФ, т. 146, с. 116-122.

© Грешняков В.А., Беленков Е.А., 2014 г.

**РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМОРФНЫХ
РАЗНОВИДНОСТЕЙ ГРАФЕНА**

Коченгин А. Е., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

В качестве графена обычно рассматривают гексагональные слои из трехкоординированных углеродных атомов, находящихся в состоянии sp^2 гибридизации. Однако структура таких слоев может быть не только гексагональной. Эти полиморфные разновидности графена пока не синтезированы и исследуются теоретически. Отдельные слои гексагонального графена (L_6) впервые получены сравнительно недавно в 2004 году. В природе слои L_6 графена существуют в качестве структурных единиц графитовых кристаллов. Поэтому новые полиморфные разновидности графена вероятно можно синтезировать в виде кристаллов, состоящих из негексагональных слоев. Какова структура таких кристаллов до сих пор остаётся неясным.

Модельно различные слои графена могут быть получены в результате сшивки и последующей геометрической оптимизации карбиновых цепочек или карбиновых наноколец. Теоретический анализ показывает, что возможно существование только четыре структурных разновидности графеновых слоев L_6 , L_{3-12} , L_{4-8} и L_{4-6-12} в которых атомы находятся в кристаллографически эквивалентных состояниях. Именно эти структурные разновидности графена представляют наибольший интерес, т.к. они должны быть более устойчивыми по сравнению с графеновыми слоями из атомов в неэквивалентных состояниях. Расчет структуры слоев L_6 , L_{3-12} , L_{4-8} и L_{4-6-12} был выполнен полуэмпирическими квантово-механическими методами MNDO, AM1 и PM3. Для каждого из слоев были найдены длины связей, углы между связями и параметры элементарных ячеек. Найденные значения структурных параметров были использованы для расчетов трехмерной структуры кристаллов, состоящих из таких слоев.

Расчеты трехмерной структуры были выполнены методом атом-атомного потенциала. Корректность расчетов была проверена при сопоставлении расчетных значений структурных параметров кристаллов L_6 и экспериментальных значений для кристаллов графита – расхождение значений менее 0.1%. Межслоевые расстояния в кристаллах полиморфов L_{3-12} , L_{4-8} и L_{4-6-12} больше чем в кристаллах графита 3.470, 3.406, 3.424 Å соответственно. Кристаллические решетки полиморфных разновидностей L_{3-12} и L_{4-6-12} относятся к гексагональной сингонии, а L_{4-8} – к тетрагональной. Число атомов в элементарных ячейках полиморфов L_{3-12} , L_{4-8} и L_{4-6-12} – 12, 8 и 24 атома соответственно. Период повторяемости слоев в кристаллах через слои. Удельные энергии межслоевых связей полиморфов на 10 – 20 % меньше энергии связи в кристаллах L_6 .

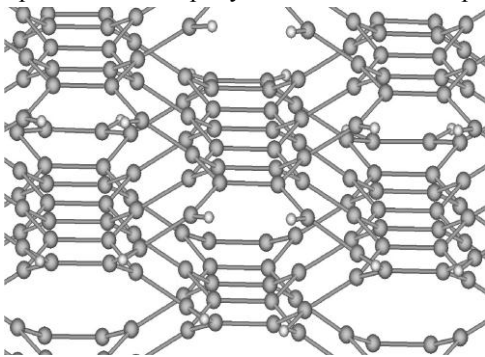
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ 3D-ГРАФИТОВЫХ ФАЗ

Миннибаев И.Н., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Атомы углерода в состоянии sp^2 гибридизации находятся в соединениях в трехкоординированных состояниях и образуют ковалентные связи с соседними атомами, лежащими в плоскости. Поэтому соединения из трехкоординированных атомов углерода имеют, как правило, слоевую структуру. Однако, возможно существование трехмерных жесткосвязанных фаз из sp^2 гибридизированных атомов – так называемых 3D-графитов. В данной работе выполнен теоретический анализ возможной структуры таких соединений.

Модельно структура любой 3D-графитовой фазы может быть получена в результате частичной деструкции алмазоподобных фаз. В данной работе были изучены фазы, получающиеся в результате деструкции алмазоподобных фаз с тубулановой структурой. В исходных алмазоподобных фазах из четырех ковалентных связей, образуемых каждым атомом, удалялась одна из связей. В процессе такой частичной деструкции кристалл алмазоподобной фазы трансформировался в цепочки, слои, нанотрубки или 3D-графитовые фазы, которые геометрически оптимизировали методом молекулярной механики ММ+. В результате выполненных исследований установлено, что из 7 тубулановых алмазоподобных фаз могут быть получены 22 фазы из трехкоординированных атомов с трехмерной жесткосвязанной структурой. Изображение геометрически оптимизированной структуры одной из таких фаз, полученной в результате деструкции алмазоподобной структуры ТА6, приведено на рисунке 1. Таким образом, в результате выполненных исследований



установлена возможность существования ряда новых углеродных фаз. Эти фазы могут быть использованы в качестве конструкционных материалов с механическими свойствами, превосходящими свойства алмазов из-за того, что прочность углерод-углеродных связей в таких соединений выше прочности межатомных связей в алмазе.

Рис.1. Структура фазы GTA6b.

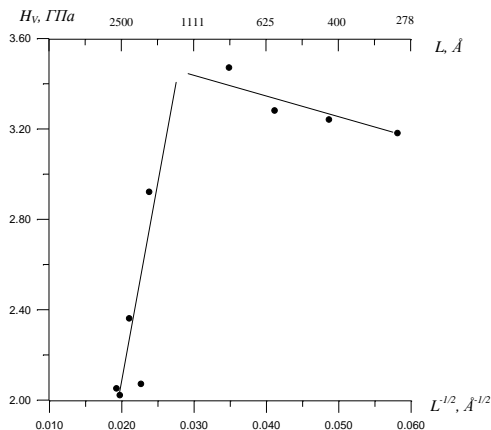
© Миннибаев И.Н., Беленков Е.А., 2014 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОТВЕРДОСТИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОБАЛЬТА

Габдрахманова Л.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе приведены результаты исследований микротвердости нанокристаллического (НК) кобальта, полученного интенсивной пластической деформацией (ИПД) кручением, в зависимости от температуры отжига.



Зависимость средней микротвердости НК кобальта от среднего размера ОКР в координатах $H_V - L^{-1/2}$.

По верхней горизонтальной оси отложены средние размеры ОКР

Микроструктуру образцов варьировали путем отжига при различных температурах в аргоне. Размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) определяли методом аппроксимаций. Установлено, что средняя по образцу микротвердость в зависимости от размеров (ОКР) в координатах $H_V - f(L^{-1/2})$ состоит из двух прямолинейных ветвей. При уменьшении размеров ОКР до $L \sim 1000 \text{Å}$ микротвердость растет примерно линейно, что объясняется ростом плотности дислокаций. В этой области выполняется соотношение, аналогичное соотношению

Холла-Петча. Нами установлено, что данная область соответствует области рекристаллизации.

При уменьшении размеров ОКР ниже $L \sim 1000 \text{Å}$ микротвердость падает. Нами показано, что эта область соответствует области возврата. Уменьшение микротвердости при уменьшении размеров кристаллитов ниже некоторого критического размера $L_{кр}$ ранее наблюдали и обсуждали в ряде работ. Мы это объясняем тем, что в исходном НК кобальте, полученном ИПД, плотность дислокаций велика и микротвердость в основном определяется скоростью диффузии (область возврата). С ростом температуры отжига размеры кристаллитов растут, плотность дислокаций уменьшается, что приводит к росту их подвижности и к уменьшению микротвердости (область рекристаллизации).

© Габдрахманова Л.А., 2014 г.

СТРУКТУРА НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ ФАЗ, СОСТОЯЩИХ ИЗ sp^2 И sp^3 ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ АТОМОВ

Тиньгаев М. И., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Разработка технологий синтеза материалов с заданными свойствами – основная задача современного материаловедения. Варьировать свойства материалов возможно без изменения химического состава за счет изменения структуры. Например, графит и алмаз состоят из атомов углерода, но имеют совершенно различные свойства. В графите атомы углерода находятся в состояниях sp^2 гибридизации, в алмазе в состоянии sp^3 . Возможно создание углеродных материалов, состоящих из атомов обоих типов. Свойства таких гибридных материалов должны изменяться в зависимости от изменения соотношения атомов в разных состояниях. Закономерности формирования таких фаз до сих пор слабо изучены. В данной работе выполнен теоретический анализ закономерностей формирования sp^2 - sp^3 соединений и сделаны модельные расчеты структур гибридных фаз.

Анализ, выполненный в работе, показал, что структуры гибридных sp^2 - sp^3 фаз возможно получить путем совмещения или сшивки углеродных структур-предшественников, состоящих из sp^2 атомов. В работе были модельно исследованы углеродные фазы, получаемые из графеновых слоев L_6 и однослойных углеродных нанотрубок. Сшивка графеновых слоев и углеродных нанотрубок (УНТ) выполнялась так, что часть атомов оставалась в sp^2 , а другая часть переходила в sp^3 состояние. После сшивки структуры подвергались оптимизации методами MM+, AM1, PM3 или MNDO. В результате были рассчитаны геометрически оптимизированные структуры 37 фаз, полученных из нанотрубок и 8 фаз полученных из графеновых слоев L_6 .

Таким образом, была установлена возможность существования ряда новых гибридных углеродных sp^2 - sp^3 соединений и разработан метод модельного получения структуры sp^2 - sp^3 фаз, в которых все позиции sp^2 или sp^3 атомов кристаллографически эквивалентны. Для всех гибридных соединений также были вычислены параметры элементарных ячеек, энергии сублимации и структурные параметры Уэллса. Энергии сублимации таких соединений меньше чем у графита, однако больше энергий сублимаций экспериментально синтезированных фуллеренов. Это указывает на то, что такие фазы должны быть устойчивыми при нормальных условиях. Соотношение sp^3 и sp^2 атомов в изученных фазах изменяется от 2:1 до 1:4, значения углов между связями у sp^3 атомов от 60° до 130.72° , для sp^2 атомов – от 108.65° до 126.89° . Плотности изученных sp^2 - sp^3 фаз лежат в диапазоне значений от 1.72 до 3.24 г/см³. © Тиньгаев М.И., Беленков Е.А., 2014 г.

ЭФФЕКТ ВРАЩЕНИЯ КАПЕЛЬ НЕМАТОХОЛЕСТЕРИКА В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Басырова Е.Р., Тимиров Ю. И., Скалдин О.А.
ИФМК УНЦ РАН, г.Уфа, Россия

В последнее время особый интерес вызывают наблюдаемые в жидких кристаллах эффекты вращения микрокапель под действием внешних воздействий в анизотропных системах, обладающих хиральностью [1]. Хотя работа положившая начало этому направлению была сделана достаточно давно [2], единой теории по объяснению механизма вращения до сих пор не построена. В связи с этим в данной работе экспериментально изучается динамика ориентационных превращений в нематохолестерических каплях (НХЖК), находящихся в изотропном окружении, под действием внешнего постоянного электрического поля. Рассматриваются капли с равновесным

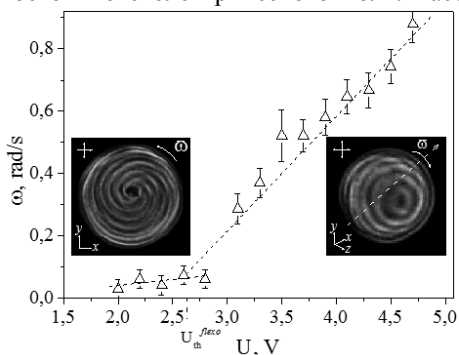


Рис.1. Зависимость угловой скорости вращения НХЖК капель от приложенного постоянного электрического поля. На вставках показаны спиральные структуры характерные для первой области с напряжением $U \leq 2.5$ В и второй –

$$U \geq 2.5 \text{ В.}$$

значению напряжения $U \approx 2.5$ В, которое достаточно хорошо совпадает с величиной порогового напряжения U_{th} для флексоэффекта. На основании полученных данных можно утверждать, что вращательные процессы НХЖК связаны с флексоэлектрическим механизмом.

Работа выполнена при финансовой поддержке проектов РФФИ № 13-02-01117, 14-02-97014 и стипендии президента РФ СП-904.2013.1.

- [1] Oswald P. // Eur. Phys. J. E, 2012. V. 35. P.10
[3] Lehmann O. // Ann. Phys. 1900. V.2. P. 649.

**ТЕРМО-ЭДС И ПРОВОДИМОСТЬ КИСЛОРОД - ИОННЫХ
ПРОВОДНИКОВ $Ba_{0,5}Sr_{0,5}Co_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$**

Басырова Р.М., Бабаева Л.Е., Балапанов М.Х., Боева М.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе исследованы температурные зависимости коэффициента электронной термо-эдс и электронной проводимости перовскитных кислородных проводников $Ba_{0,5}Sr_{0,5}Co_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$, приготовленных при разных режимах синтеза на химическом факультете БашГУ. Эти материалы могут быть использованы как мембраны для отделения кислорода из воздуха, в реакторах каталитического окисления органических веществ, а также в качестве электродов в твердотельных оксидных топливных элементах (ТОТЭ) [1].

Синтез производился из водных нитратных растворов кальция, стронция, бария и железа (3) с использованием комплексообразования с нитратами аминов. В качестве последних применяли нитрат хинолина состава $C_7H_9N \cdot HNO_3$ ($Hq-HNO_3$). При смешивании исходных солевых компонентов нитратов кальция, стронция, бария и железа (3) и нитрата хинолина после вакуумной перегонки получают твердые кристаллы. При нагревании соответствующие комплексные соединения интенсивно разлагаются с одновременным окислением до CO_2 , NO_2 и с образованием оксидов соответствующих металлов, которые далее, взаимодействуя между собой, образуют сложные оксидные системы типа $Ba_{0,5}Sr_{0,5}Co_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$. Порошки, получаемые в результате последующего обжига, характеризуются повышенной дисперсностью (в зависимости от природы нитрата амина и условий термообработки).

Было синтезировано четыре партии образцов при различных условиях термообработки (отжиг при 500, 700, 850, 950 °С). Последняя партия синтеза включала получение $Ba_{0,5}Sr_{0,5}Co_{0,8}Fe_{0,2}O_{3-\delta}$ с применением хинолина и с применением пиридина в качестве растворителей. Отжиг на воздухе при температуре 950 °С в течение трех часов и один час при температуре 1000 °С был предпринят, чтобы достичь гомогенности синтезируемого порошка.

Наибольшие значения проводимости ($0.06 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ при 500 °С) достигнуты для образцов 4-й партии синтеза, отожженных при 1100 °С (рис.1). Энергия активации проводимости в области температур 125 - 305°С составила 0.34 эВ.

Знак коэффициента электронной термо-эдс соответствует n-типу проводимости, что согласуется с типом разупорядоченности кристаллической решетки – вакансии в кислородной подрешетке. Аномалия в температурной зависимости термо-эдс (рис.2) вблизи температуры 70 °С,

возможно, связана с пересечением уровнем Ферми узкой примесной зоны в запрещенной зоне полупроводника.

Полученные материалы могут представлять интерес как мембраны для отделения кислорода из воздуха, в реакторах каталитического окисления органических веществ, а также в качестве электродов в твердотельных оксидных топливных элементах (ТОТЭ).

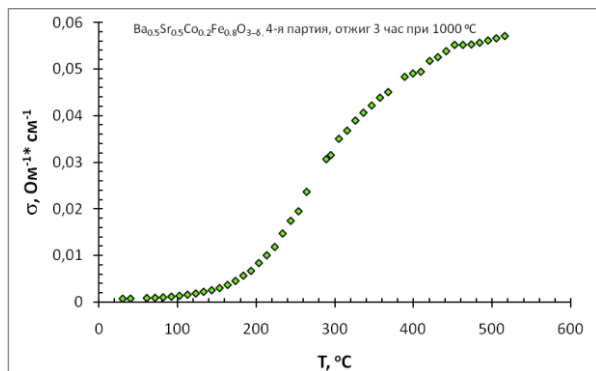


Рис. 1. Температурная зависимость проводимости образца 4-й партии синтеза Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-δ}

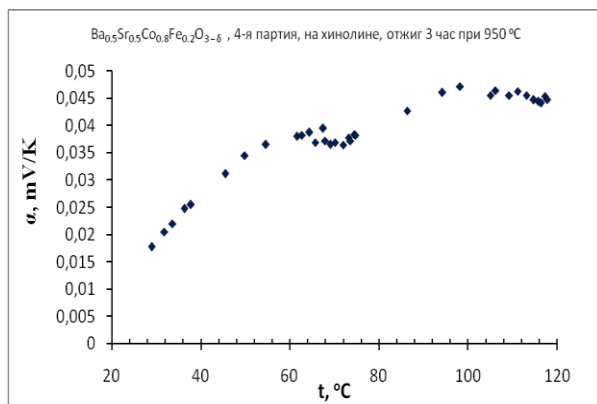


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента электронной термо-эдс

Литература

1. D. Chen and Z. Shao. Surface Exchange and Bulk Diffusion Properties of Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-δ} Mixed Conductors // *International Journal of Hydrogen Energy*, 2011. Vol. 36, No. 11. P. 6948-6956.

© Бакирова Р.М., Бабаева Л.Е., Балапанов М.Х., Боева М.К., 2014 г.

**СТРУКТУРА И ТВЕРДОСТЬ СВАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ
АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 01570 ПРИ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМАХ
СВАРКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ**

Ильясов Р.Р., Автокротова Е.В., Маркушев М.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

Методами оптической металлографии, просвечивающей и растровой электронной микроскопии изучена структура сварных соединений листов алюминиевого сплава 01570 (Al-5,9Mg-0,42Mn-0,24Sc-0,1Zr, вес.%), полученных сваркой трением с перемешиванием (СТП) с различной скоростью перемещения инструмента.

Обнаружено, что при СТП с малой скоростью перемещения инструмента в зоне сварного соединения формируется типичная для сварки алюминиевых сплавов макроструктура «луковых колец» (onion rings). При этом частично рекристаллизованная, преимущественно волокнистая структура листа трансформируется в равноосную ультрамелкозернистую с размером зерна 1-2 мкм, а темные и светлые кольца, незначительно отличаясь размером зерна, имеют одинаковый химический состав, соответствующий номинальному составу сплава. Анализ тонкой структуры шва показал, что (суб)зерна имеют низкую плотность дислокаций, а дисперсные выделения алюминидов переходных металлов преимущественно сохранили когерентность с матрицей, несмотря на их больший размер, чем в основном материале. В верхней части шва был обнаружен макродефект в виде несплошности сварного соединения.

С ростом скорости перемещения инструмента изменяется форма и размер ядра шва (луковицы) и устраняется непровар в зоне контакта с инструментом. При этом в кольцах шва фиксируется более грубая структура с несколько подросшими зернами и большей долей некогерентных дисперсоидов.

Оценка микротвердости СТП соединений показала, что с повышением скорости перемещения инструмента микротвердость сплава в зоне шва снижается и становится на 10-15% ниже твердости исходного металла.

Обсуждены механизмы трансформации зеренной структуры сплава при СТП в зоне шва и в зоне термомеханического влияния.

Рассмотрены причины и механизмы потери дисперсоидами когерентности, а также роли этих процессов в формировании структуры и прочности СТП соединений сплава.

Сделан вывод о том, что одним из основных факторов формирования оптического контраста луковых колец является их разнородность.

УДК 669.715: 620.192.22

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ Al-Si, ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ

Швец К.С.¹, Халикова Г.Р.², Трифонов В.Г.²

¹ФГБОУ ВПО Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Российской академии наук Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, г. Уфа, Россия

Из жидкоштампованных заготовок вырезали образцы диаметром 8 мм и толщиной 0,45 мм и подвергли кручению под давлением 4 ГПа в 5 оборотов при комнатной температуре на наковальне Бриджмана. Последующий отжиг проводили при температурах 300, 400 и 500 °С в течение 5 минут.

Структурные изменения сплава исследовали на деформированных и отожженных образцах в центре, на $\frac{1}{2}$ радиуса и на периферии. Измерения микротвердости проводили по диагонали образцов. Все точки, лежащие в одном направлении, имели расстояние 0,72 мм между двумя соседними отпечатками.

Интенсивная пластическая деформация привела к дроблению всех имеющихся в исходном состоянии частиц во всем объеме сплава. Чем дальше от центра и ближе к периферии, тем меньше размер частиц и выше их плотность распределения. Последующий отжиг привел к выделению частиц вторых фаз и кремния из пересыщенного твердого раствора, размер и объемная доля которых зависела от температуры обработки.

Кратковременный отжиг привел к формированию зеренной структуры во всем объеме исследуемого сплава. Количественная оценка показала, что с ростом температуры отжига средний размер зерен в центре, $\frac{1}{2}$ радиуса и на периферии образца увеличивался. Формирование при высокотемпературном отжиге в исследуемом сплаве зеренной структуры подтверждены результатами EBSD анализа.

В деформированном состоянии микротвердость менялась по радиусу образца: чем дальше от центра и ближе к его краю, тем больше значения HV. Последующий отжиг привел к релаксации напряжений и значения микротвердости снижались.

В работе обсуждена природа трансформации структуры и изменения микротвердости сплава системы Al-Si, имеющие место в процессе интенсивной пластической деформации и последующего отжига.

© Швец К.С., Халикова Г.Р., Трифонов В.Г., 2014 г.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ СРАА/ NaH₂PO₄

Неустроев А.С. Нечехина Л.В.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Для композитов СРАА/NaH₂PO₄ (полисурьмяная кислота/дигидрофосфат натрия) наблюдается увеличение проводимости при объемной доле NaH₂PO₄ около 15%. [1] При этом, значения проводимости в максимуме на порядки величины превышает проводимость чистых компонентов. Авторы объясняли это образованием на границе раздела фаз переходного слоя, обеспечивающего быстрый протонный транспорт. Для уточнения механизма увеличения проводимости были исследованы диэлектрические характеристики композитов СРАА/NaH₂PO₄. Значения их диэлектрической проницаемости значительно выше, чем у чистых СРАА или NaH₂PO₄, хотя форма спектров примерно одинакова (рис.1). Таким образом диэлектрические характеристики изучаемых композитах также существенно отличаются от характеристик исходных компонент, однако подобие спектров не позволяет сделать однозначное заключение о механизме такого поведения.

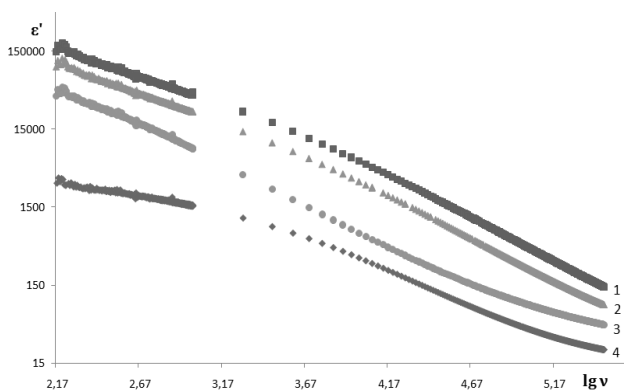


Рис. 1. Спектры диэлектрической проницаемости композитов при различных массовых соотношениях СРАА/ NaH₂PO₄ (1 – 0.12/0.88; 2 – 0.15/0.85; 3 – 0.4/0.6; 4 - ПСКК)

Литература

[1] Zakharyevich D.A., Neustroev A.S., Proton Conduction through Interface Phase of CPAA/KDP Composites // in Functional Oxide Nanostructures and Heterostructures, Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 1256E, 1256-N16-42 (2010).

ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВДИМОСТЬ И ТЕРМО-ЭДС $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.99}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.98}\text{Se}$

¹Халилова Г.Г., ¹Ишембетов Р.Х., ²Кутербеков К.А.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
г. Астана, Казахстан

Для изучения влияния замещения части атомов меди атомами серебра в селениде меди на термоэлектрические свойства были синтезированы твердые растворы $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.99}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.02}\text{Cu}_{1.98}\text{Se}$. Образцы были получены методом твердотельного синтеза при температуре 500°C в среде аргона. Обзор литературы показал, что электропроводность тройных халькогенидов меди изучена слабо или недостаточно полно[1].

В работе использовался метод измерения парциальной электронной проводимости, предложенный японским исследователем Йокотой в 60-х годах прошлого века (см., например, [2,3]). Существенным предположением, лежащим в основе применимости метода, является допущение о постоянстве химического потенциала катионов при протекании электронного тока через смешанный электронно-ионный проводник типа Cu_2S в ячейке



Исследуемые материалы имеют смешанную электронно-ионную проводимость. Однако число переноса ионов обычно не превышает нескольких процентов, и определяющим механизмом электропроводности является электронный перенос. Как показали измерения, состав $\text{Ag}_{0.02}\text{Cu}_{1.98}\text{Se}$ имеет меньшую электропроводимость, чем состав $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.99}\text{Se}$, что может быть связано с уменьшением числа носителей тока при замещении меди серебром.

Погрешность определения коэффициента термо-ЭДС составляла 2-5%.

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х. Абрикосова. - М.: Наука, 1975. - 219 с.
2. I. Yokota. On the Theory of Mixed Conduction with Special Reference to the Conduction in Silver Sulfide Group Semiconductors // J. Phys. Soc. Japan. 1961. V.16, N 11. P.2213 - 2220.
3. Чеботин В.Н., Перфильев М.В. Электрохимия твердых электролитов. М.: Химия. 1978. 312 с.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ТЕРМО-ЭДС $Ag_{0.03}Cu_{1.97}Se$, $Ag_{0.04}Cu_{1.96}Se$

¹Янбарисова Ф.Ф., ¹Ишембетов Р.Х., ²Нуриахметов Т.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
г. Астана, Казахстан

В данной работе исследована зависимость парциальной электронной проводимости и коэффициента электронной термо-эдс от замещения части атомов меди атомами серебра и температуры. Известно, что термоэлектрическая эффективность материала зависит от трех факторов: коэффициентов электронной термо-эдс и теплопроводности, а также величины электронной проводимости. Целью является максимальное приближение к оптимальной величине концентрации носителей при которой термоэлектрическая эффективность будет наибольшей.

В работе использовался метод измерения парциальной электронной проводимости, предложенный японским исследователем Йокотой в 60-х годах прошлого века (см., например, [2,3]). Существенным предположением, лежащим в основе применимости метода, является допущение о постоянстве химического потенциала катионов при протекании электронного тока через смешанный электронно-ионный проводник типа Cu_2S в ячейке



Основанием для такого предположения служит структурная разупорядоченность изучаемых материалов, которая обеспечивает практическую независимость степени разупорядоченности катионов от небольших изменений концентрации металла по длине образца.

Коэффициент электронной термо-ЭДС определяли как $\alpha_c = \Delta U_c / \Delta T$, где $\Delta T = T_2 - T_1$ – разность температур в изотермических сечениях образца в месте расположения электронных зондов.

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х. Абрикосова. - М.: Наука, 1975. - 219 с.
2. Iokota. On the Theory of Mixed Conduction with Special Reference to the Conduction in Silver Sulfide Group Semiconductors // J. Phys. Soc. Japan. 1961. V.16, N 11. P.2213 - 2220.
3. Чебогин В.Н., Перфильев М.В. Электрохимия твердых электролитов. М.: Химия. 1978. 312 с.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

$Gd_{100-x}Y_x$ ($x = 0..15$)

Ульянов М.Н.^{1*}, Таскаев С.В.^{1,3,4}, Скоков К.П.², Карпенков Д.Ю.²,

Ховайло В.В.³, Батаев Д.С.¹, Пелленен А.П.⁴

¹⁾ Челябинский государственный университет, г. Челябинск

²⁾ Тверской государственный университет, г. Тверь

³⁾ НИТУ «Московский институт стали и сплавов», г. Москва

⁴⁾ НИУ «Южно-Уральский государственный университет», г. Челябинск

Интенсивная пластическая деформация (ИПД) является многообещающим методом для разработки новых функциональных материалов. Как показано в предыдущих работах, ИПД может приводить к значительному изменению магнитных и термодинамических свойств, например, в сильно деформированных образцах чистого Gd [1]. Однако изменение магнитных свойств происходит не во всех материалах: как показали проведенные нами исследования, для многих сплавов 3d-металлов не наблюдается сколь-нибудь значительного изменения магнитных характеристик.

В этой работе мы продолжаем наше предыдущее исследование по изучению серии сплавов $Gd_{100-x}Y_x$ ($x = 0, 5, 10, 15$), которые являются достаточно простыми и удобными материалами для магнитного охлаждения при комнатной температуре. МКЭ в холоднокатаных образцах существует в широком интервале температур 258-295 К и сравним с МКЭ, наблюдаемом в недеформированном образце чистого гадолиния.

Как показано в работе, холодная прокатка является перспективным методом получения тонких форм магнитокалорических материалов, пригодных для изготовления теплообменников охлаждающих устройств, работающих на магнитокалорическом эффекте.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-07-00676-а и гранта Президента МД-770.2014.2.

Литература

1. S.V.Taskaev, M.D.Kuz`min, K.P.Skokov, D.Yu.Karpenkov, A.P.Pellenen, V.D.Buchelnikov and O.Gutfleisch, JMMM **331**, 33 (2013).

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

$Gd_{100-x}Zr_x$ ($x = 0..3$)

Ульянов М.Н.^{1*}, Таскаев С.В.^{1,3,4}, Скоков К.П.², Карпенков Д.Ю.²,

Ховайло В.В.³, Батаев Д.С.¹, Пелленен А.П.⁴

¹⁾ Челябинский государственный университет, г. Челябинск

²⁾ Тверской государственный университет, г. Тверь

³⁾ НИТУ «Московский институт стали и сплавов», г. Москва

⁴⁾ НИУ «Южно-Уральский государственный университет», г. Челябинск

Работа посвящена изучению магнитных свойств тонких лент $Gd_{100-x}Zr_x$ ($x = 0, 1, 2, 3$), подвергнутых интенсивной пластической деформации (ИПД). Метод ИПД является перспективным для разработки новых функциональных материалов. В зависимости от степени деформации, магнитные, структурные или термодинамические свойства могут значительно изменяться.

Однако, как показано в предыдущих работах, ИПД может приводить к значительному ухудшению магнитных и термодинамических свойств, например, в сильно деформированных образцах Gd [1]. Это приводит к новым термодинамическим и магнитным свойствам, которые делают материалы неприменимыми для магнитокалорических приложений без дополнительной процедуры термообработки.

Как показали измерения, температура Кюри линейно уменьшается с увеличением концентрации Zr в интервале 279-295 К. Снижение температуры Кюри связано с уменьшением обменного взаимодействия в материале в результате замещения атомов Gd немагнитными атомами Zr. МКЭ имеет максимум в интервале $\Delta T_C = 16$ К, однако, величина его составляет примерно 50% от величины МКЭ недеформированных сплавов. Улучшение свойств может быть достигнуто последующей термообработкой.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 12-07-00676-а и гранта Президента МД-770.2014.2.

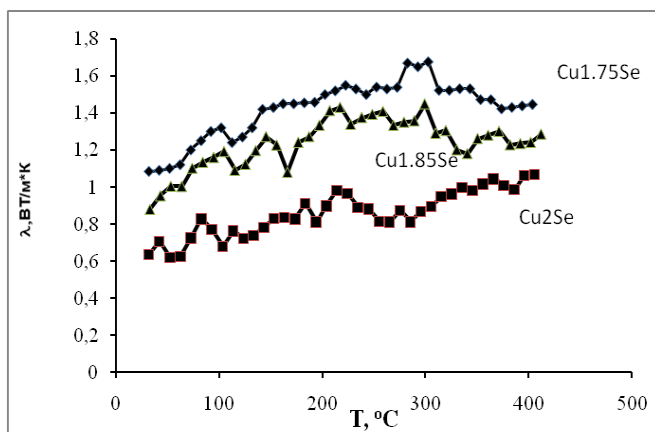
Литература

1. S.V.Taskaev, M.D.Kuz`min, K.P.Skokov, D.Yu.Karpenkov, A.P.Pellenen, V.D.Buchelnikov and O.Gutfleisch, JMMM **331**, 33 (2013).

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ХАЛЬКОГЕНИДОВ $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,85}\text{Se}$, Cu_2Se ¹Ишкаев А.А., ¹Ишембетов Р.Х., ¹Ниязгулов А., ²Кутербеков К.А.¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,

г. Астана, Казахстан

В данной работе исследовалась влияние количества атомов меди на теплопроводность халькогенидов $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,85}\text{Se}$, Cu_2Se . Для измерений теплопроводности готовили таблетки диаметром 1 см и толщиной 3-5 мм. Измерения проводили методом сравнения, эталоном служила пластинка плавленого кварца. При расчетах использовалась калибровочная температурная зависимость теплопроводности эталона. Чтобы исключить окисление образца и деталей установки при высоких температурах, все измерения проводились в кварцевой трубке, заполненной осушенным аргоном. Для предотвращения химического взаимодействия исследуемого



образца при высоких температурах с деталями прибора, прилегающие к образцу детали были изготовлены из химически стойкого и высоко-теплопроводящего графита. На рис. приведена

температурные зависимости теплопроводности крупнокристаллических сплавов $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1,85}\text{Se}$, Cu_2Se . Увеличение коэффициента теплопроводности можно было бы объяснить влиянием ионного переноса, термической активацией подвижных катионов меди, что приводит к увеличению ионной проводимости и теплопроводности. Из рис. видно, что самые низкие значения коэффициента теплопроводности у твердого раствора Cu_2Se . Думаем, что есть корреляция между увеличением количества подвижных атомов меди и уменьшением теплопроводности.

УДК 538.93

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ В ДВУМЕРНЫХ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКАХ CuCrS_2 - AgCrS_2

Самарбаева Г.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изучение сплавов халькогенидов переходных и одновалентных металлов представляют большой интерес. Особенностью подобных систем является то, что одновалентные ионы обладают высокой подвижностью в базисных плоскостях гексагональной решетки и явление суперионной проводимости в них имеет двумерный характер. Типичными представителями данного класса систем являются соединения CuCrS_2 и AgCrS_2 , обладающие гексагональной структурой (пространственная группа $R3m$) и смешанной ионно-электронной проводимостью.

В данной работе представлены результаты исследований ионного переноса и диффузионных явлений двумерных суперионных проводников CuCrS_2 , AgCrS_2 и их сплавов.

Однофазные образцы для исследований были получены спеканием при температуре 1000°C из чистых элементов, взятых в соответствующих весовых пропорциях, в вакуированных ампулах. Аттестация образцов проводилась методами рентгенофазового анализа. Высокотемпературные рентгеновские исследования показали, что соединения CuCrS_2 , AgCrS_2 претерпевают фазовый переход при 400°C , связанный с полным разупорядочением подрешеток меди и серебра.

Ионная проводимость соединений измерялась на постоянном токе методом подавления электронной составляющей с использованием сложных ионных электродов, блокирующих электронный ток, в температурном интервале $250\text{--}430^\circ\text{C}$. Величины ионной проводимости при 400°C для CuCrS_2 равна $0,08 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$, для соединения AgCrS_2 величина ионной проводимости - $0,35 \text{ Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$.

Для всех исследуемых соединений $\text{Cu}_x\text{Ag}_{1-x}\text{CrS}_2$ из кривых установления и спада концентрационной поляризации при пропуске тока через образец определялся коэффициент химической диффузии, который с увеличением содержания меди в твердом растворе уменьшался. Методом радиоактивных изотопов были определены коэффициенты самодиффузии серебра при 420°C в данных соединениях. Коэффициент диффузии, определенный из измерений ионной проводимости с помощью соотношения Нернста-Эйнштейна, связан с коэффициентом диффузии радиоактивных изотопов фактором корреляции. Для соединения AgCrS_2 он равен $0,62$ и эта величина близка к теоретически рассчитанной для плоской гексагональной решетки величине, равной $0,56$.

УДК 669.1

ИССЛЕДОВАНИЕ СКОРОСТНОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ДЕФОРМАЦИИ КРУПНОЗЕРНИСТЫХ И НАНОСТРУКТУРНЫХ СПЛАВОВ TiNi

Гундеров Д.В.^{1,2}, Чуракова А.А.^{1,2}, Заманова Г.И.³, МаксUTOва Г.Ю.¹,
Фазлыева З.Ч.², Шайхутдинова Л.Н.², Лукьянов А.В.²,

¹Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН;

²Уфимский государственный авиационный технический университет;

³Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сплавы на основе никелида титана (TiNi) относятся к классу функциональных материалов с эффектами памяти формы (ЭПФ), обусловленными термоупругими мартенситными превращениями [1,2]. Эти сплавы широко используются в качестве конструкционных и функциональных материалов в технике и медицине. Перспективным направлением повышения служебных свойств сплавов TiNi является создание в них наноструктурного (НС) состояния, включая ультрамелкозернистое (УМЗ) и нанокристаллическое (НК), методами интенсивной пластической деформации (ИПД).

Получить новые данные о механизмах, ответственных за пластическое течение материала при различных температурах, возможно на основе данных о скоростной чувствительности деформации m и рассчитанным по ним значениям эффективной энергии активации $U_{эф}$ и эффективного активационного объема ΔV деформации. В данной работе проведены исследования скоростной чувствительности и активационного объема сплавов TiNi в исходном крупнозернистом состоянии с размером зерна 200 мкм и после ИПД с размером зерна 300 нм.

В работе показано, что ИПД приводит к заметному повышению предела прочности и, особенно, предела текучести (σ_T) сплавов по сравнению с исходным закаленным состоянием.

Литература

1. Хачин В.Н., Пушин В.Г., Кондратьев В.В. Никелид титана, структура и свойства. М.: Наука, 1992. - 161 с.
2. Shape Memory Alloys: Fundamentals, Modeling and Applications. / Ed. by: V. Brailovski, S. Prokoshkin, P. Terriault and F. Trochu. Montreal: Ecole de technologie superieure (ETS), Universite du Quebec, CANADA, 2003. -851 p.

© Гундеров Д.В., Чуракова А.А., Заманова Г.И., МаксUTOва Г.Ю.,
Фазлыева З.Ч., Шайхутдинова Л.Н., Лукьянов А.В., 2014 г.

СЕКЦИЯ «НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОЭЛЕКТРОНИКА»

УДК 538.911

РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ ГРАФАНОВЫХ СЛОЕВ И КЛАСТЕРОВ

Абдрахманов Э.К., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Кроме кристаллических форм углерода возможно существование углеродных наноструктур. Атомы углерода в этих наноструктурах находятся в трехкоординированном состоянии, т.е. состоянии гибридизации близком к sp^2 , так что атомы образуют прочные ковалентные связи с тремя соседними атомами лежащими в плоскости. В результате наноструктуры, образующиеся из таких атомов, имеют слоевую каркасную структуру. Весьма вероятно, что наноструктуры аналогичные фуллеренам, нанотрубкам и графеновым слоям могут быть получены из четырехкоординированных атомов углерода, находящихся в состояниях sp^3 . Какова структура новых углеродных наноструктур из четырехкоординированных атомов, до сих пор остается неясным.

В качестве исходных структур для построения графеновых слоев брали фрагменты слоев гексагонального графена L_6 . Оборванные связи на краях фрагментов графеновых слоев были компенсированы атомами водорода. Построение графеновых слоев выполняли, сшивая атомы пары соседних графеновых слоев. После сшивки двух графеновых слоев, в которых все углеродные атомы находятся в четырехкоординированных состояниях были геометрически оптимизированы методом ММ+. Расчет графеновых нанотрубок выполняли путем построения кольцевых структур из углеродных атомов в трехкоординированных состояниях, которые затем сшивали в трубчатые структуры. Графеновые алмазоподобные кластеры были построены так, что атомы, из которых они состоят, находились на сферической поверхности. С математической точки зрения такие структуры являются выпуклыми многогранниками. Всего возможно существование шести графеновых кластеров содержащих от 6 до 12 атомов. Для всех изученных наноструктур была рассчитана геометрически оптимизированная структура, найдены структурные параметры: длины связей, углы между связями, деформационные параметры и параметры Уэллса.

В результате исследований выполненных в работе, был выполнен расчет ряда новых слоевых, трубчатых и кластерных углеродных наноструктур, не изучавшихся ранее, сформированных из углеродных атомов в четырехкоординированных состояниях. Энергии сублимации большинства этих наноструктур меньше энергии сублимации фуллерена C_{24} который синтезирован экспериментально, поэтому изученные в работе наноструктуры, по-видимому, должны устойчиво существовать при нормальных условиях.

© Абдрахманов Э.К., Беленков Е.А., 2014 г.

ИЗМЕНЕНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУР ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ПЕРВОГО РОДА НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕР В СТРУКТУРЕ «СЭНДВИЧ»

Миниахметов А.А., Пономарев А.Ф.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,
г. Бирск, Россия

В последние годы в несопряженных полимерных материалах ученые физики реализуют металлоподобное состояние за счет изменения условий на границе металл-полимер, которая приводит к переключению пленки полимера полидифениленфталид (ПДФ) в высокопроводящее состояние (ВПС). В работе [1] такое изменение на интерфейсе металл-полимер осуществлялось путем инициации фазового перехода в контактирующем с полимерной пленкой (ПДФ) металле (индий).

Целью настоящей работы явилось исследование изменения величины потенциального барьера на границе металл-полимер в результате фазового перехода первого рода в структуре металл-полимер-металл.

В качестве объекта исследования был выбран полимер ПДФ с толщиной 1 мкм. В качестве металла использовался легкоплавкий металл индий. Ранее в [1] уже сообщалось, что в структуре «сэндвич» (индий-ПДФ-медь) наблюдается электронное переключение при температуре плавления индия.

Мы считаем, что на интерфейсе металл-полимер возникает туннельно-прозрачный потенциальный барьер. Вероятность туннелирования электронов из металла (индий) экспоненциально зависит от разности уровня Ферми исследуемого металла (индий) и транспортного уровня полимера (ПДФ).

Высоту потенциального барьера до температуры плавления металла (индий) определяли методом энергии активации, которая составила $\varphi_{b1} \sim 0.39$ eV. Так как после температуры плавления индия механизм переноса заряда через исследуемую структуру сохраняется, то величина потенциального барьера для этого участка составил $\varphi_{b2} \sim 0.57$ eV. Из этого следует, что при плавлении индия происходит изменение его эффективной работы выхода (ЭРВ) на величину $D\varphi \sim 0.18$ eV.

Таким образом, изменение проводимости в структуре «сэндвич» при фазовых превращениях происходит за счет изменения положения уровня Ферми в металле относительно узкой зоны проводимости в полимере.

Литература

1. Миниахметов А.А., Чернов П.П., Пономарев А.Ф. Исследование эффекта электронного переключения тонкой полимерной пленки полидифениленфталид в зависимости от внешних воздействий. // *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения "Intermatic – 2013"*. – Москва, 2013. – С.183-185.

УДК 537.9

ИНДИКАЦИЯ ОГРОМНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРЕ НИКЕЛЬ-ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИД ПРИ ПОМОЩИ КОНТАКТНОГО НАПРЯЖЕНИЯ

Султанов И.Ф.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Ранее было показано, что гетероструктура типа никель-полидифениленфталидная пленка может изменить свое сопротивление на 6-8 порядков при изменении внешнего магнитного поля [1].

В экспериментах, проведенных до настоящей работы (например, [1,2]) наличие источника напряжения в измерительной схеме создавала дополнительное воздействие, которое усложняло физическую картину эффекта. В связи с этим для уменьшения количества воздействующих факторов была поставлена задача выяснить возможно ли переключение проводимости в магнитном поле без источника электрического напряжения (на контактной разности потенциалов).

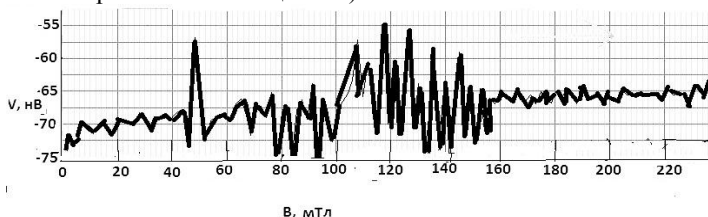


Рис.1. Изменение характера шумов прибора при возрастании внешнего магнитного поля

При воспроизведении эксперимента из [1] без внешнего электрического поля для гетероструктуры никель-полидифениленфталидная пленка, находящийся в метастабильном предпереходном состоянии был идентифицирован переход структуры в высокопроводящее состояние при значении внешнего магнитного поля 155 мТл по изменению характера шумов прибора Aglient 34401A (рис. 1).

В докладе обсуждается природа полученного эффекта.

Литература

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В., Лачинов А.А. Особенности гигантского магнитосопротивления в системе ферромагнетик – полимер // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т.84, №11. С.720-722.

2. Воробьева Н.В., Лачинов А. Н., Jan Genoe., Лачинов А.А., Корнилов В.М. Особенности инжекционного гигантского магнитосопротивления в системе Ni-полимер-Cu // Известия РАН.Серия физическая. 2009. Т73. №1. С.18-22.

© Султанов И.Ф., 2014 г.

УДК 537.9

ИНДИКАЦИЯ МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА $Y_3Fe_5O_{12}$ С МАЛОЙ ПРИМЕСЬЮ ИОНОВ ИРИДИЯ ПРИ ПОМОЩИ ПЛЕНКИ ПОЛИМЕРА С ШИРОКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ

Якупова А.Р., Воробьева Н.В., Лачинов А.Н.

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
г. Уфа, Россия

Ранее было показано, что гетероструктура из пленка полимера с широкой запрещенной зоной на подложке с сильным магнитным моментом может проявлять магнитосопротивление [1]. Это явление было связано с инъекцией спин-поляризованных носителей в полимерный диэлектрик. В настоящей работе продемонстрирована возможность получения магниторезистивных эффектов в полимерной пленке на диэлектрической ферромагнитной подложке без инъекции носителей.

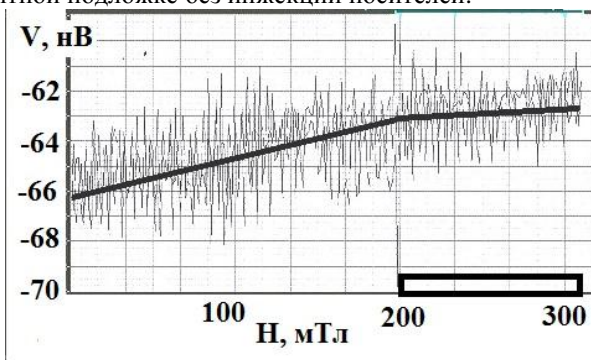


Рис. 1. Индикация перемагничивания диэлектрической ферромагнитной подложки ИЖГ (Ir) при помощи пленки ПДФ. По оси ординат отложено напряжение на индикаторном резисторе 2000 Ом. Прямоугольник указывает на наличие освещения в отмеченном диапазоне

В настоящей работе показана возможность индикации магнитного (включая фотоманитное) состояние подложки из ферромагнитного диэлектрика – монокристаллического иттрий-железистого граната (рис. 1).

Литература

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В., Лачинов А.А. Особенности гигантского магнитосопротивления в системе ферромагнетик – полимер // Письма в ЖЭТФ. 2006. Т.84, №11. С.720-722.

© Якупова А.Р., 2014 г.

УДК 538.911

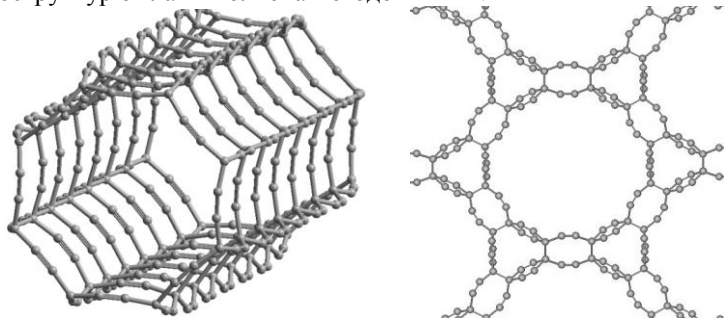
МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ИЗ sp И sp^3 ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ АТОМОВ

Бухалов А.В., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Углеродные материалы, состоящие из sp^3 гибридных атомов, имеют трехмерную жестко связанную структуру, в то время как структура углеродных соединений из sp гибридных атомов цепочечная. Возможен синтез материалов, состоящих из атомов как в sp так и в sp^3 состояниях. Свойства таких материалов можно изменять, меняя в них соотношение атомов в различных состояниях гибридизации. Кроме sp - sp^3 материалов с кристаллической структурой, возможно существование sp - sp^3 наноструктур, теоретическое исследование которых выполнено в данной работе.

Модельное построение гибридных наноструктур было выполнено в результате сшивки sp^3 гибридных атомов фрагментами карбиновых цепочек полииновой разновидности, состоящих из sp гибридных атомов углерода. Были выполнены расчеты трубчатых и слоистых гибридных наноструктур. Геометрическая оптимизация наноструктур была выполнена методом MM+.



В результате выполненных расчетов была найдена геометрически оптимизированная структура десяти sp - sp^3 углеродных нанотрубок и десяти гибридных sp - sp^3 слоев. Изображение геометрически оптимизированных структур одной из полученных нанотрубок и одного слоя приведены на рисунке. Для всех рассчитанных наноструктур были измерены структурные параметры: длины связей, углы между связями, кольцевые и деформационные параметры, а также найдены средние удельные энергии атомизации соединений. Установлено, что энергии атомизации увеличиваются с увеличением диаметра нанотрубок стремясь в пределе к значениям характерным для слоев.

© Бухалов А.В., Беленков Е.А., 2014 г.

НАНОСОРБЕНТ НА ОСНОВЕ ГЕТИТА ДЛЯ СОРБЦИИ КАДМИЯ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Абдуллина А.Р., Назарова Д.Ф., Ильясова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Загрязнение окружающей среды сточными водами всех видов промышленного производства к началу XXI в. приобрело глобальный характер. Загрязняющие вещества в составе отходов многочисленны и разнообразны. Например, значительные количества кадмия поступают в водные объекты со сточными водами промышленных предприятий, отходами обогатительных фабрик и т.д.

Соединения кадмия опасны, потому что имеют тенденцию к биоаккумуляции. По своей токсичности кадмий аналогичен ртути или мышьяку. При этом его соединения в биологических системах накапливаются быстрее, чем разрушаются или преобразуются, в результате приводя к возникновению различных заболеваний: печени, пищеварительной системы, сердца и др.

В настоящее время наряду с кристаллизацией, коагуляцией и др. методами очистки воды применяется и сорбция с использованием в качестве сорбентов углеродных материалов, кремнеземов, оксидов металлов и т.д.

Несмотря на широкое практическое использование сорбционных методов очистки производственных сточных вод, в этой области существует ряд проблем, например, недостаточная сорбционная емкость материалов, отсутствие надежных способов регенерации сорбентов, ресурсосберегающих экологизированных технологий очистки с использованием сорбентов, способов утилизации тяжелых металлов из отходов. Поэтому изучение сорбционных свойств современных материалов с особыми свойствами (наноматериалов) представляет интерес и является весьма перспективным.

Цель работы заключалась в разработке доступного и экономичного способа синтеза стабилизированного наноразмерного гетита и изучения его сорбционных свойств по отношению к катионам кадмия с целью разработки сорбента нового поколения для очистки сточных вод.

Изучены факторы, влияющие на установление сорбционного равновесия катионов кадмия: температура, время извлечения, pH.

Установлено, что полученный наносорбент на основе гетита – одной из форм оксида железа (III) обладает высокими сорбционными свойствами: при этом степень извлечения катионов кадмия – 78%, что выше по сравнению со степенью извлечения указанных катионов при использовании в качестве сорбента обычного оксида железа (III) – 42%.

УДК 544.2

ПРИМЕНЕНИЕ ОТХОДОВ СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНОЙ СЕРЫ ИЗ ПОЛИСУЛЬФИДА КАЛЬЦИЯ В СЕЛЬСКОМ ХОЗЯЙСТВЕ

Арсланбаева Г.А., Абдуллина А.Р., Ильясова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время все большую актуальность приобретают проблемы разработки и внедрения мало- и безотходных технологий, что связано с образованием огромного количества отходов промышленного производства. Внедрение безотходного технологического цикла обеспечивает максимально полное использование перерабатываемого сырья и образующихся при этом отходов.

Следует отметить, что ежегодно образуется около 10-15 тонн отходов синтеза наносеры из полисульфида кальция на опытном производстве Технологического института гербицидов и регуляторов роста растений ГНУ НИИ АН РБ, г.Уфа. Однако указанные отходы содержат необходимые для сельхозкультур вещества, а именно около 92 % серы в наноразмерном состоянии. Наряду с азотом, калием, фосфором и др., сера - биогенный элемент, необходимый для роста и развития растений, способствующий синтезу углеводов, витаминов, аминокислот и др.

В связи с этим перспективным становится изучение возможности использования отходов синтеза наноразмерной серы из полисульфида кальция в качестве источника минерального питания для растений при внесении ее в почву и влияния указанного фактора на аминокислотный состав тканей растений фасоли зерновой и повышение урожайности.

Настоящая работа посвящена изучению возможности применения отходов синтеза наносеры из полисульфида кальция в смеси с аквакомплексом марганца (2+) для создания благоприятных условий развития фасоли зерновой.

Установлено, что оптимальным вариантом питательной смеси, способствующим увеличению всхожести семян фасоли, а также повышенному содержанию пяти свободных аминокислот в ее тканях, является аквакомплекс марганца (2+) с наносерой с соотношением компонентов 1:10. При этом содержание аминокислот во всходах увеличивается; например, гистидина – в 3 раза, валина, метионина, лейцина, изолейцина - в 1,5-2 раза.

Таким образом, на основании полученных результатов можно рекомендовать в качестве питательной смеси отходы синтеза наносеры из полисульфида кальция и хлорида марганца в соотношении 1:10 для увеличения всхожести семян фасоли зерновой.

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Музыка А.С., Файрузова Д.Р., Ильясова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время одно из современных, активно развивающихся направлений науки – это нанотехнологии. Нанотехнологи занимаются созданием материалов с размерами частиц не более 100 нм на основе металлов, неметаллов, их оксидов и др. Особый интерес представляют разработки препаратов из наноразмерного серебра [1].

Серебро – металл I группы таблицы Д.И. Менделеева, с атомным номером 47. Области применения серебра – это электротехника, электроника, тяжелая промышленность и т.д. При этом чистого серебра ежегодно во всем мире добывают около 850 тысяч килограммов и спрос на него возрастает. Однако уже сейчас наблюдается нехватка серебра, что сдерживает развитие новейших технологий. Поэтому развитие нанотехнологий может способствовать решению этой проблемы, т.к. наноматериалы как продукт высоких технологий не требуют многотоннажного производства, и даже один грамм такого вещества способен решить множество проблем.

Целью работы состояла в разработке способа синтеза наночастиц серебра с использованием доступных, простых в неорганической химии реакций окисления-восстановления из комплексных соединений для дальнейшего изучения каталитических свойств.

Авторами изучена реакция синтеза наносеребра по реакции восстановления металлов из аммиачных комплексов с помощью различных восстановителей: гидразина солянокислого, гидроксилamina солянокислого, тиосульфата натрия, муравьиного альдегида, глюкозы.

Установлено, что при использовании в качестве восстановителей гидразина солянокислого, гидроксилamina солянокислого реакции восстановления серебра протекали быстрее; выход продукта составил $\approx 75\%$; наблюдался меньший размер наночастиц серебра: в случае использования гидразина солянокислого – 50 нм, гидроксилamina солянокислого – 37 нм. Результаты показали, что на размер наночастиц влияет и количество восстановителя, например, в случае применения гидразина солянокислого двукратное увеличение его количества привело к уменьшению размера наночастиц серебра до 2-7 нм.

Таким образом, авторами синтезированы наночастицы серебра доступным и простым способом, не требующим оператора высокой квалификации или сложного и дорогого оборудования.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОАТОМНЫХ СЛОЕВ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ АТОМОВ В СОСТОЯНИЯХ ИЗ SP И SP² ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ АТОМОВ

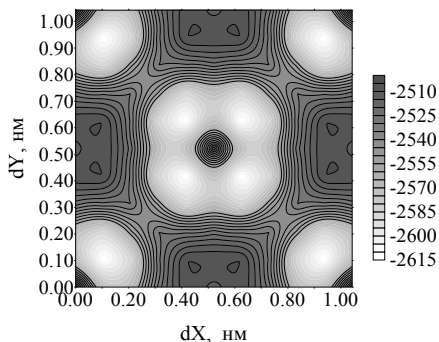
Богатырев Б.Д., Шеповалов И.И., Беленков Е.А.

Южно-Уральский Государственный университет, г. Челябинск, Россия

Свойства гибридных углеродных материалов можно варьировать, изменяя соотношение атомов в различных гибридизированных состояниях. Из различных гибридных материалов графиновые sp-sp²- соединения имеют слоевую структуру. Свойства моноатомных слоев из sp-sp² углеродных атомов близки к свойствам слоев графена. До настоящего времени исследовались графиновые слои, модельно получаемые из графена L₆. В данной работе исследована структура графиновых соединений, получаемых из графенового слоя L₄₋₈.

Структура графиновых слоев была получена в результате замены углерод-углеродных связей в графеновом слое L₄₋₈ полииновыми цепочками из двух атомов. Были построены β- и γ-полиморфные разновидности в результате замены на карбиновые цепочки двух и одной углерод-углеродной связи у каждого sp²-гибридизированного атома графенового слоя. Структуры слоев были получены в предположении, что длины одинарных, двойных и тройных связей имеют величины 0.154, 0.132 и 0.120 нм, соответствующие экспериментально измеренным значениям. Трехмерная структура кристаллов из слоев графина была рассчитана методом атом-атомного потенциала.

В результате расчетов установлено, что межслоевые расстояния, соответствующие минимуму энергии межслоевых связей, имеют значения 0.3479 и 0.3499 нм для кристаллов γ- и β-графина соответственно. Также был выполнен расчет энергии межслоевых связей при различных относительных сдвигах слоев в кристаллах графина. График зависимости энергии связи слоев от относительных сдвигов приведен на рисунке. По таким графикам были найдены относительные сдвиги, соответствующие минимумам энергии связи. Удельные энергии межслоевых связей в кристаллах графина составляют порядка 25% от энергии связей в кристаллах графита.



© Богатырев Б.Д., Шеповалов И.И., Беленков Е.А., 2014 г.

УДК 537.9

РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ СТРУКТУР СТЕКЛО/ ЖЕЛЕЗО/ПДФ/ ЖЕЛЕЗО С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ТОЛЩИНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО И ПОЛИМЕРНОГО СЛОЕВ

Ямалеев А.А., Воробьева Н.В., Галиев А.Ф.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М.Акумоллы, г. Уфа, Россия

В настоящей работе была поставлена задача получить структуру железо/полидифениленфталид (ПДФ)/ железо, пригодную для оптических исследований. Для таких исследований структур, содержащих слой полимера с широкой запрещенной зоной, требуется создание образцов с тонким (менее 10 нм) слоем железа. Кроме того, слой полимера также должен быть менее 10 нм, причем требуется ряд толщин от 2 до 10 нм. Слой железа, напыленный на полимер сверху также должен не превышать 10 нм. То есть, толщина структуры должна быть менее 30 нм. Задача получения металлических слоев осуществлялась на вакуумном универсальном poste (ВУП5). В качестве подложек были выбраны образцы кремния и стекла, они обрезались до квадрата со стороной 1 см. Условия напыления выбирались согласно [1], скорость напыления составляла 3 нм/с. Толщину слоя полимера изменяли при помощи изменения концентрации в исходном растворе. Полимер наносился методом центрифугирования.

Готовые подложки проходили тщательную очистку в ультразвуковой ванночке. В небольшую посуду, в которую наливался спирт, помещались все образцы подложек и ставились на ультразвуковую ванночку на 5 мин. Затем такая же процедура повторялась с дистиллированной водой. После этого образцы подложек доставались пинцетом и помещались в печь для сушки. После сушки кремниевые и стеклянные подложки помещались в вакуумную камеру и крепились подложкодержателями. Напыляемое вещество железо помещалась внутрь вольфрамовой спирали и было готово к напылению. Оставалось подождать, пока давление в камере достигнет необходимого уровня 10^{-5} мм рт. ст. Затем на 2-3 с. открывалась заслонка, где находился образец металла и через окошки наблюдался яркий просвет. Это означало, что образец начал испаряться и атомы железа, достигая подложек, оседали, создавая тонкопленочную структуру. Подложки крепились на разных расстояниях от испарителя, и, следовательно, толщины этих пленок были получены разные. Контроль толщин проводился на атомно-силовом микроскопе.

Литература

1. Антонен И.В., Котов Л.Н., Некипелов С.В., Голубев Е.А. Особенности наноструктуры и удельной проводимости тонких пленок различных металлов // ЖТФ. 2004. Т.74, №3. С.24-27. © Ямалеев А.А., 2014 г.

УДК 537.9

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА

Фазылов А.И., Юсупов А.Р.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Подвижность носителей заряда является одним из важных параметров полупроводниковых и диэлектрических материалов. Она определяет величину электропроводности а также свойства полупроводниковых приборов, такие, как инерционность, частотные характеристики и др.

Целью данной работы является изучение влияние гидростатического давления на подвижность носителей заряда в пленках полидифениленфталида (ПДФ).

В качестве метода измерения подвижности носителей заряда, был использован метод CELIV (Экстракция носителей заряда под действием линейно увеличивающегося напряжения) [1]. Данный метод широко используется для исследования полимерных материалов. Для измерения подвижности носителей заряда использовались образцы следующей структуры: Al - ПДФ - Si - Au.

Ранее в работе [2] было показано, что под действием одноосного механического давления пленка полидифениленфталида переключается из диэлектрического в высокопроводящее состояние. Использование гидростатического давления для изучения влияния на подвижность носителей заряда в пленках полидифениленфталида, упрощает задачу по влиянию неоднородности пленки по толщине на результаты измерения. В тоже время данный метод позволяет исключить повреждение пленки в ходе эксперимента, что зачастую происходит при неаккуратном воздействии на образец.

В докладе обсуждаются полученные результаты и их интерпретации.

Литература

[1] Juška G., Arlauskas K., Viliunas M., and Koeka J., Extraction current transients: New method of study of charge transport in microcrystalline silicon, Phys. Rev. Lett. 84, 4946-4949 (2000).

[2] Лачинов А.Н., Жеребов А.Ю, Корнилов В.М. Аномальная электронная неустойчивость полимеров при одноосном давлении // Письма в ЖЭТФ, том 52, вып. 2, 1990, с.742-745.

ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНТЕРФЕЙСА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР

Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Галиев А.Ф., Набиуллин И.Р.

БГПУ им М. Акмуллы, г.Уфа, Россия

Границы раздела различных материалов нашли широкое применение в электронике и фотонике. Это связано с тем фактом, что сочетание определённых условий, поверхностных эффектов и особенностей строения поверхности позволяет получать уникальные электронные свойства в области контакта двух поверхностей, образующих границу раздела [1].

Равновесная структура поверхности и объема полимерной пленки определяются конкуренцией процессов уменьшения поверхностной энергии и уменьшения энергии связи блоков. Полная свободная энергия может быть представлена как сумма поверхностной свободной энергии и суммы энергий натяжения молекул в объеме. Поверхностная энергия учитывает вклад взаимодействия полимера с воздухом и взаимодействие молекул друг с другом. Следует предположить, что лишь часть боковых групп молекул полимера в поверхностном слое будут принимать участие в формировании дипольно упорядоченного поверхностного слоя пленки.

Возникновение на границе раздела двух полимерных пленок области с более высоким значением электропроводности [1] может объясняться наличием спонтанной поляризации поверхностного слоя полимерной пленки, по аналогии с механизмом "поляризационной катастрофы" [2] в пределах одного монослоя молекул. Взаимодействие в объеме очевидно является слабым из-за разупорядочения молекул. Для описания спонтанной поляризации в двумерных полимерных пленках, где движение диполей ограничивается вращением боковых групп вокруг оси скелетной части молекулы полимера, обычно используется модель Изинга. При таком подходе случайные процессы не должны разрушать упорядочение, так как взаимодействие анизотропно и вращение диполей имеет одну степень свободы.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки России.

Литература

[1] Gadiev R.M., Lachinov A.N., Salikhov R.B., Rakhmееv R.G., Kornilov V.M. and Yusupov A.R., Appl. Phys. Lett.98, 173305 (2011).

[2] Ohtomo A. and Hwang H.Y., Nature 427, 423 (2004).

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ АМПЛИТУД НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО НИКЕЛЯ

Мухаметгалина А.А.¹, Самигуллина А.А.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Ультрамелкозернистые (УМЗ) материалы, полученные интенсивной пластической деформацией, обладают высокой прочностью, твердостью, однако для них характерны значительные искажения кристаллической решетки, источниками которых являются неравновесные границы зерен [1]. В результате пластичность материала падает. Стабилизация структуры осуществляется обычно путем отжига, однако этот способ не всегда может обеспечить необходимое улучшение механических свойств материала. Поэтому большой интерес представляют иные способы физического воздействия на материалы, одним из которых является ультразвуковая обработка (УЗО).

В данной работе было установлено влияние амплитуды ультразвуковых колебаний на механические свойства УМЗ никеля.

Результаты работы установили характер зависимости механических свойств от амплитуды ультразвука: показано, что существует оптимальная амплитуда, при которой релаксационный эффект УЗО максимален и приводит к значительному повышению пластичности УМЗ никеля, подвергнутого РКУП при одновременном повышении предела прочности. При использовании УЗО с амплитудой выше этого значения эффект ослабевает и исчезает, что связано с увеличением вклада от размножения дислокаций.

Показано, что УЗО с амплитудами напряжения, использованными в работе, как и отжиг, оказывает заметное релаксирующее воздействие на структуру УМЗ никеля, подвергнутого ИПД методом РКУП. При этом, как показали эксперименты, рост пластичности за счет УЗО может происходить одновременно с ростом прочности.

Результаты исследования подтверждают, таким образом, принципиальную возможность влияния УЗО на механическое поведение материала с целью улучшения его свойств.

Литература

[1] Nazarov A.A., Mulyukov R.R. Nanostructured Materials. In: Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology, Ed. Goddard W., Brenner D., Lyshevski S., Iafrate G., CRC Press. 2003. Chapter 22. P. 1-41.

УДК 537.9

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОДНООСНОГО МЕХАНИЧЕСКОГО
ДАВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК
ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА ДОПИРОВАННЫЕ
НАНОЧАСТИЦАМИ PbS**

Киан Мохаммадамин, Поленов С.А.

Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,
г. Уфа, Россия

В настоящее время повышенный научный интерес вызывают структуры, основанные на использовании высокопроводящих полимеров. Причина этого – обширные возможности применения таких структур для разработки и конструирования нового класса электронных приборов на основе полимерных материалов. Ранее [1], было показано, что в тонких пленках полимера полидифениленфталида наблюдается эффект переключения в высокопроводящее состояние под действием одноосного механического давления. Авторами работы указывается, что эффект переключения наблюдается на пленках толщиной меньше некоторого предельного значения. Целью данной работы, является изучения влияния толщины полимерной пленки допированной наночастицами PbS на эффект переключения в высокопроводящего состояния под действием одноосного механического давления.

Для достижения поставленной цели, были изучены вольтамперные характеристики на экспериментальных пленочных образцах с введенными наночастицами PbS (наночастицы PbS были получены в лаборатории БГПУ им.М.Акмуллы) и на образцах без наночастиц, при различных значениях одноосного механического давления. Измерения вольтамперных характеристик проводились на образцах, толщиной меньше критического значения.

Установлено, что для переключения пленок полидифениленфталида с наночастицами PbS необходимо прикладывать большее механическое давление, чем на пленки без PbS.

В докладе обсуждаются результаты полученные в данной работе, а также возможная их интерпретация.

Литература

[1] Лачинов А.Н., Жеребов А.Ю., Корнилов В.М. Аномальная электронная неустойчивость полимеров при одноосном давлении // Письма в ЖЭТФ, том 52, вып. 2, 1990, с.742-745.

ИНФРАКРАСНО-АКТИВНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ ДЕФЕКТОВ И ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Рыжов А.М.

Магнитогорский государственный технический университет,
г. Магнитогорск, Россия

Углеродные нанотрубки (УНТ) применяются в различных областях науки, техники и производства. Это связано с уникальными физико-химическими свойствами УНТ, на которые оказывают влияние дефекты структуры и примеси.

В работе рассмотрены методы ИК-Фурье - спектроскопии и возможность применение их для диагностики дефектности нанотрубок, контроля примесей кислорода и водорода в них. Объектом изучения служил порошкообразный углеродный наноматериал «Таунит», представляющий смесь многослойных УНТ, с примесью углерода негубулированной структуры [1]. Образцы для исследования в режиме диффузного отражения (ДР), готовились методом прессования таунита и хлорида натрия (марки ХЧ), в концентрациях (С) таунита 0,1;0,2;0,4;0,8 %. Полученный спектр ДР обрабатывался с помощью функции Кубелки –Мунка:

$$f(R_{\infty}) = \frac{(1 - R_{\infty})^2}{2R_{\infty}} = \frac{k}{s},$$

где R_{∞} - коэффициент диффузного отражения излучения от бесконечно толстого слоя, k и s –коэффициенты поглощения и рассеяния соответственно, слоем единичной толщины. В спектрах ДР таунита, нами были выделены широкие полосы селективного поглощения $4000-3600 \text{ см}^{-1}$, $2845-2385 \text{ см}^{-1}$, $2100-1700 \text{ см}^{-1}$, $1600-1300 \text{ см}^{-1}$, $900 - 700 \text{ см}^{-1}$ ($C=0,8\%$). Максимумы в области $2900-2800 \text{ см}^{-1}$ интерпретированы как валентные колебания –С-Н групп в ароматических структурах, слабые полосы избирательного поглощения в области $1700 - 1650 \text{ см}^{-1}$ обусловлены наличием карбоксильных групп в образцах, селективное поглощение в областях 1300 см^{-1} и 1500 см^{-1} наиболее вероятно свидетельствует о наличие дефектов структуры, которые вызваны нарушением трансляционной симметрии в углеродных сетках малых размеров и внутрислойной деформации графитоподобных структур соответственно.

Литература

1. Мищенко С.В. Углеродные наноматериалы. Производство, свойства, применение/С.В.Мищенко, А.Г. Ткачев.– М.: Машиностроение, 2008. – 320 с.

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ВДОЛЬ ИНТЕРФЕЙСА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР ОТ ТОЛЩИНЫ ВЕРХНЕЙ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКИ

Любцов В.С., Лачинов А.Н.

Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

После того, как была опубликована работа [1], где говорилось, что на основе перовскитов SrTiO_3 и LaTiO_3 , можно изготовить гетероструктуру, которая будет обладать металлоподобной проводимостью, обусловленной двумерным электронным газом. В 2009 году было обнаружено, что вдоль границы двух полярных изоляторов также можно сформировать двумерный электронный газ [2]. Эта работа вызвала большой интерес к изучению свойств границы раздела двух полярных изоляторов на основе полимерных материалов. Хорошо известно, что подобные квантоворазмерные системы используются в качестве сенсоров различных веществ. До сегодняшнего дня не известно ни одной работы, где рассматривалось влияние толщины верхней полимерной пленки границы раздела полимер/полимер на электрофизические свойства структуры. Целью настоящей работы явилось изучение зависимости электропроводности вдоль интерфейса полимер/полимер от толщины верхней полимерной пленки.

В качестве органического изолятора был выбран полимерный материал полидифениленфталид (ПДФ).

Верхняя полимерная пленка была получена методом центрифугирования из различных концентраций растворов ПДФ, а нижняя пленка из одной концентрации полимера. Металлические электроды наносились методом термического вакуумного напыления. Толщину верхней полимерной пленки определяли методом атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Было установлено, что при уменьшении толщины верхней полимерной пленки электропроводность возрастала, причем, существенно.

По-видимому, это может быть связано с высокой степенью упорядочения боковых функциональных групп вовнутрь слоя и более высокой однородностью границы раздела.

Литература

1. Ohtomo A., Muller D. A., Grazul J. L. and Hwang H. Y. Artificial chargemodulation in atomic-scale perovskite titanate superlattices. // Nature, 2002, V.419, pp.378-380.
2. Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Корнилов В.М., Салихов Р.Б., Рахмеев Р.Г., Юсупов А.Р. Письма в ЖЭТФ, 2009 –Т 90, В.11 – С.821-825.

ВЛИЯНИЕ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СВОЙСТВА ОБЪЕМНЫХ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Рысаева Л.Х.¹, Баимова Ю.А.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Институт проблемы сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

В настоящее время активно развивается технология создания новых объемных углеродных наноматериалов, состоящих, например, из молекул фуллерена (фуллериты), из углеродных нанотрубок (УНТ), смятых чешуек графена и др. [1,2]. Большой интерес представляют такие свойства этих материалов, как высокая сверхпроводимость, полевая эмиссия, несмачиваемость поверхности, ультравысокая удельная поверхность в сочетании с электропроводностью. Графит, а также объемные углеродные наноматериалы на основе фуллерена, УНТ, и чешуек графена, образованы действием слабых межатомных сил Ван-дер-Ваальса, соединяющих структурные элементы, связанные ковалентными связями.

В данной работе методом молекулярной динамики исследуются влияние сдвиговой деформации на механические свойства объемного углеродного наноматериала при различных гидростатическом давлении и температуре.

Расчетная ячейка включает 5x5x5 структурных единиц (каждая из которых представляет собой кольцо из 6 атомов углерода), расположенных вдоль направлений x, y, z соответственно. Структурные элементы материала были ориентированы в пространстве случайным образом. Начальная плотность структуры 1.86 g/cm³. Моделирование проводилось с использованием пакета моделирования LAMMPS с адаптированным эмпирическим потенциалом межмолекулярного взаимодействия AIREBO.

В работе было исследовано влияние начальных параметров моделирования (температура, гидростатическое давление и т.д.) на формирование аморфного углерода. Было показано, что сдвиговая деформация оказывает значительное влияние на аморфизацию углерода.

Литература

1. Vaimova J.A., Liu B., Dmitriev S.V. // Phis Status Solidi RRL, 2014, v. 8, p. 336.
2. Баимова Ю.А., Мурзаев Р., Дмитриев С.В. // ФТТ, 2014, v. 56(10), p. 1946.

КЛАСТЕРЫ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ГРАФЕНЕСултангужина А.Б.¹, Баимова Ю.А.²¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия²Институт проблем сверхпластичности металлов, РАН, г. Уфа, Россия

Графен представляет собой плоский моноатомный слой углерода, в котором каждый атом связан валентной связью с тремя соседями. Физические свойства графена такие как теплопроводность, оптическая проводимость, электронный спектр, упругие свойства и скорости звука могут легко изменяться под действием упругой деформации.

Дискретные бризеры (ДБ) это сильно локализованные в пространстве нелинейные колебательные моды большой амплитуды в бездефектной решетке [1]. Существование ДБ в термодинамическом равновесии в кристалле NaI было показано экспериментально. Согласно результатам компьютерного моделирования, ДБ так же могут быть обнаружены в графене [2]. Линейные и нелинейные колебательные моды могут существовать на краях графеновых нанолент и в других наноплимоформах углерода. Известно, что ДБ могут существовать только если их частота лежит выше фононного спектра или в его щели. В недеформированном графене могут быть обнаружены только дискретные бризеры с частотой выше фононного спектра. Приложение однородного растяжения открывает щель в фононном спектре в результате чего могут быть легко возбуждены так называемые щелевые ДБ имеющие частоту в щели фононного спектра или кластеры ДБ [3].

Взаимодействие между атомами углерода в данной работе описывалось стандартным набором межатомных потенциалов, который учитывает валентные связи и углы между ними, а так же углы поворота. Данный потенциал с успехом использовался для решения многих задач и, в частности для описания морщин, возникающих в нанолентах графена под действием упругой деформации. ДБ в деформированном графене представляет собой два соседних атома, колеблющихся в противофазе с большой амплитудой вдоль оси u .

В данной работе исследовались кластеры ДБ различной конфигурации. Было показано, что кластеры ДБ в графене могут перестраиваться от одного вида к другому. В кластерах происходит активный обмен энергией между ДБ в кластере.

Литература

1. A. Sievers, S. Takeno, Phys. Rev. Lett. 61, 970 (1988).
2. L. Khadeeva, S. Dmitriev and Yu. Kivshar, JETP Lett. 94, 539 (2011).
3. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou, EPL, 100 36005(2012).

ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИАНИЛИНА

Салихов Т.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее время интенсивно исследуются электрофизические свойства высокомолекулярных полисопряженных соединений – электроактивных полимеров. Показано, что представители этого класса – полианилины (PANI), а именно тонкопленочные структуры на их основе, перспективны для создания различных наноэлектронных устройств в виде светодиодных источников, солнечных элементов и полевых транзисторов. Для обеспечения оптимальной работы электронных устройств актуальны разработки специальных технологий нанесения полимерных слоев с контролируемой толщиной и заданной морфологией на различные типы носителей (подложек). Эта задача сложна, поскольку PANI, как и другие электропроводящие полимеры, относится к категории перерабатываемых материалов. Полимер не плавится и практически нерастворим, поэтому традиционные технология нанесения слоев из расплава или раствора для него неприменимы. В данном исследовании проведены измерения электропроводности тонких пленок PANI, полученных вакуумным способом. Для этого в работе была отработана методика получения тонких пленок полианилинов методом термического вакуумного напыления из эффузионной ячейки Кнудсена. Длина цилиндрической ячейки 25 mm, внутренний диаметр 4 mm, рабочая температура варьировалась в интервале 600-650K. Морфология поверхности и толщина осаждаемых пленок контролировалась на основе анализа АСМ изображений, полученных с помощью «Наноскан 3D». Толщина исследованных пленок варьировалась и принимала значения в диапазоне 100 - 300 nm. Все полученные пленки были однородными по толщине и имели удельную проводимость порядка 1.0 $\mu\text{S}/\text{cm}$. Для увеличения проводимости полианилиновых слоев подбирался температурный режим напыления из ячейки Кнудсена. Наиболее оптимальным оказался температурный диапазон 500-550K. Кроме того, осуществлялось протонирование свежеприготовленных пленок в парах раствора соляной кислоты [1]. В результате достигалась удельная электропроводность пленок PANI порядка 1.0 mS/cm и выше. На основе исследованных пленок получены экспериментальные образцы солнечных элементов и полевых транзисторов.

Литература

1. Ivanov, V.F., Nekrasov, A.A., Gribkova, O.L., Vannikov, A.A. Spectroelectrochemical, EPR and conductivity investigations of thin films of vacuum deposited polyaniline // *Electrochimica Acta.*, 1996, v. 41, pp. 1811-1814.

© Салихов Т.Р., 2014 г.

УДК 538.9

**РОЛЬ МАТЕРИАЛА ЭЛЕКТРОДОВ В ЭФФЕКТЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ
ПОД ДЕЙСТВИЕМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ СТРУКТУРЫ
МЕТАЛЛ/ПОЛИМЕР/МЕТАЛЛ**

Лачинов А.А.

БГПУ им М. Акмуллы; ИФМК УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Огромное магнетосопротивление (в англоязычной интерпретации Huge Magnetoresistance) до сих пор наблюдалось в двух типах структур. В структуре с магнитными наночастицами в полупроводниковой матрице и пленочной гетероструктуре ферромагнетик/полимер/немагнитный металл. Удивительно большой коэффициент магнетосопротивления связывают со специфическими свойствами потенциального барьера, сформированного на границе с ферромагнитным материалом. В общем виде ситуация подобна явлению резонансного туннелирования при котором положением инжектирующего уровня управляют дополнительным воздействием магнитного поля.

В подобной модели важное значение должна играть начальная выбранная структура потенциального барьера, то есть не только магнитные свойства материала, но и работа выхода электронов из него. В связи с этим, в настоящей работе проведено исследование огромного магнетосопротивления в структуре ферромагнетик/полимер/немагнитный металл в зависимости от работы выхода электрона ферромагнитного электрода. В качестве полимера был использован полидифениленфталид (ПДФ). В работе были исследованы структуры Ni/ПДФ/Cu, Ni/ПДФ/Al, Ru/ПДФ/Al (Ru – пермаллой).

Было установлено, что на всех структурах наблюдается эффект огромного магнетосопротивления. Но смена материалов электродов в экспериментальной структуре ферромагнетик/ПДФ/немагнитный металл приводит к изменению типа наблюдаемого эффекта магнетосопротивления. Если разница работ выхода материалов электродов небольшая (~0.1 эВ), то наблюдается моностабильное переключение проводимости. Если такая разница порядка больше 0,1 эВ, то наблюдается бистабильное переключение проводимости.

МЕТАНОФУЛЛЕРЕНЫ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО СЛОЯ В СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЯХ

Акбулатов А.Ф., Басырова Р.И., Биглова Ю.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Фотопреобразователи в настоящее время представлены следующими типами солнечных батарей: 1) на основе неорганических полупроводниковых материалов, прежде всего кремния и 2) органические солнечные элементы. Хотя КПД лучших устройств в первом случае доведен до 25 %, сложная технология их производства приводит к существенному удорожанию генерируемой электроэнергии. Предпочтителен второй вариант в силу следующих преимуществ: а) отсутствие токсичных веществ в органических солнечных батареях, выливающееся, в целом, в экологически безопасное производство; б) химическая устойчивость и легкость, позволяющая придавать готовому устройству любую форму; в) небезынтесен медицинский аспект: присутствие обозначенных батарей в различных тканях. Несмотря на интенсификацию работ во многих лабораториях мира именно в данной области, эффективность органических солнечных батарей уступает кремниевым и пока достигает 10,7 %

Как правило, органические солнечные батареи состоят из субстрат-носителя, анода, катода, фотоактивного и буферного (зарядо-транспортного) слоев. В разрабатываемых нами солнечных батареях в качестве фотоактивного слоя применяли композит из фуллерен-содержащего РСВМ[60] и полимера РСДТВТ, в качестве катода выступал ИТО (оксид индия и олова) и как анод – серебро, покрытое оксидом молибдена. При этом в роли буферного слоя мы впервые использовали производное фуллерена – {(1-метоксикарбонил-1-[2-(акрилоилокси)этилоксикарбонил]-1,2-метано]}-1,2-дигидро- C_{60} -фуллерен (MAF) (Рис. 1).

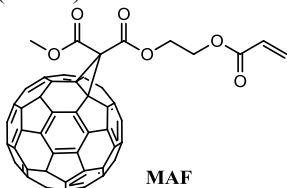


Рис. 1. Формула производного фуллерена, используемого в солнечных батареях

В результате, имело место увеличение эффективности преобразования света в солнечных батареях с 1,6 % до 3,0 %. Изыскания, направленные на синтез новых производных из ряда метанофуллеренов и их применение в солнечных батареях для увеличения эффективности преобразования света, продолжаются.

© Акбулатов А.Ф., Басырова Р.И., Биглова Ю.Н., 2014.

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

УДК 004.93

ПРОГРАММНОЕ РАСПОЗНАВАНИЕ КАРОТАЖНЫХ ДИАГРАММ

Хашпер А.Л., Линд Ю.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В архивах многих проектных институтов нефтяных компаний хранятся каротажные диаграммы на бумажных носителях, полученные аналоговым способом, и каротажные диаграммы, полученные программно, но для которых утеряны исходные данные. Для компьютерной обработки и интерпретации таких данных их необходимо представить в цифровой форме, т.е. в виде последовательности чисел, соответствующих показаниям скважинных приборов на различной глубине [1].

Поэтому актуальной является задача разработки программного обеспечения, позволяющего в автоматическом режиме осуществлять корректную оцифровку каротажных диаграмм с целью их последующего анализа.

В настоящее время авторами разработана программа, реализующая алгоритмы распознавания и оцифровки каротажных диаграмм, созданных на компьютере. Эти диаграммы характеризуются такими особенностями как различное начертание кривых, совпадение цветов, неоднозначность кривых, наличие надписей и лишних цветов.

Разработанная программа производит попиксельное считывание графического TIFF-файла, используя функции обработки растровых изображений программной среды Borland C++ Builder, распознает цветные пиксели с помощью RGB-модели, создает массивы данных по числу цветов и оцифровывает изображение с учетом вышеперечисленных особенностей на основе математических методов усреднения, интерполяции и нормировки.

В дальнейшем планируется реализовать оцифровку каротажных диаграмм с бумажных носителей. Характерными проблемами при оцифровке изображений такого типа являются необходимость считывания рукописного текста, которым подписаны глубины и «шапка» диаграммы, и неоднородность масштаба по глубине, возникающая при сканировании с бумажных носителей. Для решения этих проблем планируется применять искусственные нейронные сети.

Полученные результаты позволяют учитывать скважины, по которым оцифрованы данные ГИС, при построении геологической модели месторождения и подсчете запасов углеводородов, что увеличивает точность указанных операций и в целом повышает технико-экономические показатели проектирования разработки месторождений нефти и газа.

© Хашпер А.Л., Линд Ю.Б., 2014 г.

ГЕОФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПРИ РЕКОНСТРУКЦИИ ГАЗОПРОВОДА

Рахматуллин И.И., Егоров Д.В., Романов В.В.

Российский государственный геологоразведочный университет
имени Серго Орджоникидзе, Москва, Россия

Рассматриваемые результаты были получены ООО «ГазпромИнжиниринг» в ноябре 2013 года на участке газопровода Привольное-Моздок (Ставропольский край, РФ) с целью уточнения инженерно-геологических условий для последующей реконструкции сооружения. В состав комплекса работ входили изыскания методами сейсморазведки и электроразведки. В геологическом строении участка до глубины 10–20 м принимают участие элювиальные и аллювиальные песчано-глинистые и гравийные грунты четвертичного возраста [1].

В ходе электроразведки сверху вниз по разрезу были выделены геоэлектрические слои: высокоомный слой плотных маловлажных суглинков мощностью 2 м и УЭС 175 Ом·м, слой обводнённых суглинков пониженного сопротивления 30 Ом·м и мощностью до 8 м, хорошо проводящий слой суглинков с прослоями песка мощностью до 7 м и средним УЭС 10 Ом·м, слой гравийно-галечных грунтов с УЭС 30 Ом·м и мощностью до 10 м, низкоомный слой песков высокого водонасыщения с сопротивлением 10 Ом·м с мощностью до 12 м. В основании разреза залегают обводнённые глины с минимальным по толщине удельным сопротивлением (около 5 Ом·м). Изучаемый объект хорошо дифференцирован по электрическим свойствам и имеет пониженное сопротивление слоёв, что позволило выделить слои мощностью до 2–3 м.

Применение метода преломлённых волн позволило разделить разрез на два сейсмозлектрических слоя. Скорость продольных волн в первом слое составила 240 м/с, скорость поперечных волн — 120 м/с. Второй слой характеризуется граничной скоростью продольных волн 1800 м/с, поперечных — 700 м/с. Выделенная граница связана с подземными водами, залегающими в гравийно-галечном грунте.

При помощи геофизических методов были выделены геолого-геофизические границы и уточнены сейсмозлектрические свойства выделенных слоёв. Полученные материалы были проинтерпретированы с использованием всей имеющейся геологической информации, фондовых источников и нормативных документов, установлено наличие блуждающих токов, проведено сейсмическое микрорайонирование участка работ.

Литература

1. Романов В.В., Рахматуллин И.И. Инженерная сейсморазведка при проектировании газопроводов // Научный журнал Российского газового общества. — 2013. — № 0. — С. 56–63.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ АНАЛОГОВЫХ ДИАГРАММ ГИС В ЦИФРОВЫЕ МАССИВЫ

Камалиев А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В наше время работа геолога, геофизика, специалиста по разработке месторождений немислима без использования геолого-геофизической информации в цифровой форме. В данной статье рассматривается задача преобразования каротажных диаграмм, изображенных на бумаге, в цифровой вид при помощи программы ScanDigit 4.5.

Оцифровка каротажных диаграмм – это преобразование каротажных кривых, изображенных на бумаге, в векторную форму, т.е. перевод их в цифровой вид, пригодный для записи на электронные носители.

Существуют несколько программ, предназначенных для оцифровки каротажных диаграмм, такие как NeuraLog , MapInfo, ScanDigit, GetData Graph Digitizer. Я использовал программный комплекс ScanDigit 4.5.

Процесс оцифровки диаграмм ГИС можно разделить на следующие этапы:

1. Трассировка (векторизация) кривых;
2. Редактирование;
3. Контроль качества оцифровки;
4. Запись данных в LAS-файл.

Одной из моих задач в научной работе была оцифровка нескольких скважин. Действительно, я оцифровал 2 скважины площади «Нижнесуяновская», а именно, скважины 19НСУу и 20НСУу. Каждая скважина включала несколько методов ГИС: БК, БКЗ, МКЗ, СК (ДС, БКЗ, ПС, резистивиметрия) и РК (ГК, НГК). Полученные мной оцифрованные данные в виде LAS-файлов были проверены в интегрированной системе ПРАЙМ, которая показала очень хорошее соответствие оцифрованных каротажных диаграмм с аналоговыми.

Умение преобразовывать аналоговые диаграммы ГИС в цифровые массивы для геофизика-интерпретатора остается актуальной задачей, так как в архивах хранится еще много рулонов каротажных диаграмм, которых нужно оцифровать и передать для дальнейшей интерпретации и подсчета запасов нефти.

Литература

[1] ScanDigit 4.6 for Windows. Программа сканирования и оцифровки диаграмм геофизических исследований скважин. Версия 4.6. Руководство пользователя. НТП «Норд Софт», Дубна, 2002. - 29 с.

ПРЯМАЯ ЗАДАЧА О ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА ВНУТРИ ПЕРЕСЕКАЮЩЕЙ ПЛАСТ ВЕРТИКАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ

Рахимова З.Х.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Задача определения поля постоянного электрического тока в скважине, пересекающей горизонтальный пласт является актуальной в геофизике.

Математическая модель потенциального поля точечного источника постоянного тока внутри скважины (рис. 1) имеет следующий вид:

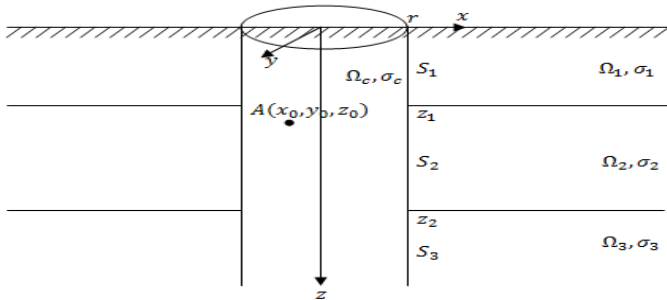


Рис. 1. Вертикальная скважина в слоистом полупространстве

$$\Delta u_c(P) = -\frac{I}{\sigma_c} \delta(P-A); \Delta u_i(P) = 0, \quad i = 1, 2, 3; \tag{1}$$

$$u_i(P)|_{z=z_i} = u_{i+1}(P)|_{z=z_i}, \quad \sigma_i \frac{\partial u_i(P)}{\partial z} \Big|_{z=z_i} = \sigma_{i+1} \frac{\partial u_{i+1}(P)}{\partial z} \Big|_{z=z_i}, \quad i = 1, 2; \tag{2}$$

$$u_i(P)|_{S_i} = u_c(P)|_{S_i}, \quad \sigma_i \frac{\partial u_i(P)}{\partial n} \Big|_{S_i} = \sigma_c \frac{\partial u_c(P)}{\partial n} \Big|_{S_i}, \quad i = 1, 2, 3; \tag{3}$$

$$u_c(P) \rightarrow 0, \quad u_i(P) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2, 3. \tag{4}$$

Для решения задачи (1)-(4) применяется метод интегральных преобразований [1].

Литература

1. Кризский В.Н., Иванов В.Т., Герасимов И.А., Викторов С.В. Определение границы тела вращения в горизонтально-слоистых средах методами геоэлектроразведки//ФизикаЗемли. 2004.№9. С.86-94.

© Рахимова З.Х., 2014 г.

УДК 550.3

ЦИФРОВАЯ ОБРАБОТКА ИСХОДНОГО СИГНАЛА МЕТОДА АШ В СКВАЖИННОЙ ГЕОФИЗИКЕ

Чернякова Е.В. Хайбуллин Т.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Акустическая шумометрия позволяет измерить звуковые колебания в потоке флюида, и по записанным диаграммам выделять интервалы пласта, места нарушения обсадной колонны и колонны НКТ, ЗКЦ вниз и вверх.

В настоящее время используется два способа регистрации шумов: интегральный и спектральный. При первом способе измеряется средняя мощность всего спектра шумовых сигналов в течении конечного интервала Т. Во втором случае измерения проводят в нескольких диапазонах частот, а интерпретация результатов измерений основана на сравнении спектральной плотности мощности в этих диапазонах. Данная методика интерпретации разработана на основе теоретических и экспериментальных исследований.

Акустический приемник в канале шумометрии представляет собой пьезоэлектрический микрофон, имеющий в качестве датчика давления пластину из вещества, обладающего пьезоэлектрическими свойствами, т. е. индуцирующего под действием деформации электрический заряд на своей поверхности.

В функциональную схему канала шумометрии входит общий блок приема акустических сигналов, в ней используется акустический приемник и предварительный усилитель ПУ, в котором увеличивается коэффициент усиления. После усиления происходит через четыре полосовых фильтра, усредняется через мультиплексор поочередно оцифровывается в АЦП и по каналам телеметрии отправляется в ККС для регистрации и последующей обработки.

Автономный геофизический прибор ASM-8, регистрируя гидродинамические и технологические шумы, создаваемые в колонне скважины, преобразует полученные данные в файлы форматов snm и gst. Затем с помощью приложения «Спектральный шумомер» оценивается качество полученного материала и производится его преобразование в las-формат. После чего возможна обработка данных шумометрии в системе ПРАЙМ.

Литература

1. Коровин, В.М. Лобанков, В.М. Миллер, А.В. Миллер, А.А. Сулейманов, А.А. Барышев, В.И. Соломина, И.Л. Шайсламова, Г.Г. Геофизические исследования и работы в скважинах: в 7 т. Т. 4. Контроль технического состояния скважин. - Уфа: Информреклама, 2010. - С. 269-271 ил.

© Чернякова Е.В., Хайбуллин Т.Ф., 2014 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОКАРОТАЖА СКВАЖИНЫ В СЛОИСТОЙ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Гаврилов А.К.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Определение геофизических характеристик пластов осуществляется на основе каротажа скважин зондами. Применение глинистых буровых растворов влечет образование глинистой корки вокруг канала скважины, значительно влияющей на результаты каротажа, поэтому задача электрокаротажа актуальна в разведочной геофизике [1].

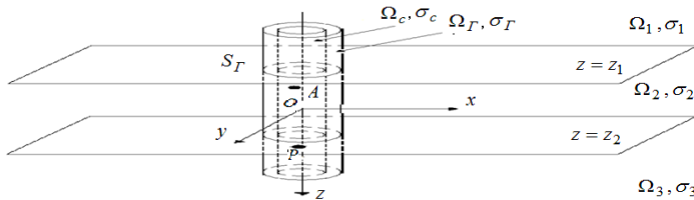


Рис. 1. Скважина в слоистой среде

Математическая модель потенциального поля точечного источника постоянного тока в 3-х-слойной среде (рис. 1) имеет следующий вид:

$$\Delta u_C(P) = -\frac{I}{\sigma_C} \delta(P-A); \quad \Delta u_\Gamma(P) = 0; \quad \Delta u_i(P) = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad (1)$$

$$u_i(P)|_{z=z_i} = u_{i+1}(P)|_{z=z_i}; \quad (\sigma_i \cdot \vec{\nabla} u_i(P), \vec{n}) \Big|_{z=z_i} = (\sigma_{i+1} \cdot \vec{\nabla} u_{i+1}(P), \vec{n}) \Big|_{z=z_i+1}, \quad i = 1, 2; \quad (2)$$

$$u_i(P)|_{S_{\Gamma_i}} = u_\Gamma(P)|_{S_{\Gamma_i}}, \quad (\sigma_i \cdot \vec{\nabla} u_i(P), \vec{n}) \Big|_{S_{\Gamma_i}} = (\sigma_\Gamma \cdot \vec{\nabla} u_\Gamma(P), \vec{n}) \Big|_{S_{\Gamma_i}}, \quad i = 1, 2, 3; \quad (3)$$

$$u_C(P)|_{S_C} = u_\Gamma(P)|_{S_C}, \quad (\sigma_C \cdot \vec{\nabla} u_C(P), \vec{n}) \Big|_{S_C} = (\sigma_\Gamma \cdot \vec{\nabla} u_\Gamma(P), \vec{n}) \Big|_{S_C}; \quad (4)$$

$$u_C(P) \rightarrow 0, \quad u_\Gamma(P) \rightarrow 0, \quad u_i(P) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5)$$

Литература

1. *Крузский В.Н., Викторов С.В.* Поле точечного источника постоянного тока в пересекающей пласт скважине при наличии глинистой корки // Матер. 35-ой сессии междуна. сем. им. Д.Г.Успенского «Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей». – Ухта: УГТУ, 2008. – С.154-159.

© Гаврилов А.К., 2014 г.

МЕДНО-КОЛЧЕДАНЫЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ

Хайбуллин А.Р.

Российский геологоразведочный университет им. Серго Орджоникидзе,
г. Москва, Россия

Колчеданные месторождения – залежи сернистых (сульфидных) соединений металлов в недрах Земли, имеющие промышленное значение. Разделяются на серно-колчеданные, медно-колчеданные и полиметаллически-колчеданные месторождения. В рудах серно-колчеданных месторождений преобладают сульфиды железа – пирит, пирротин, марказит. В рудах медно-колчеданных месторождений, кроме того, присутствуют минералы меди – халькопирит, борнит, халькозин. В рудах полиметаллически-колчеданных месторождений находятся минералы цинка и свинца, а также барита, иногда гипса.

В данной работе рассматриваются общие характеристики медно-колчеданных месторождений находящиеся в Республике Башкортостан. В России разведаны и готовятся к освоению 30 медных объектов, одним из этих крупных месторождений является Подольское (Хайбуллинский район). Руды месторождения по составу относятся к трем разновидностям: медно-колчеданные со средним содержанием меди 2,28 %, медно-цинковые колчеданные с 2,44% меди и серно-колчеданные, содержащие 0,24% меди [2].

Рудной базой Учалинской обогатительной фабрики являются медные и медно-цинковые руды Узельгинского месторождения, медно-цинковые руды Учалинского и Молодежного месторождений и руды Талганского, Западно-Озерного и Султановского месторождений.

Общий вывод данной работы состоит в том, что месторождения медно-цинково-колчеданной формации на различных участках одного и того же месторождения могут существенно различаться по составу и технологическим свойствам. Например, минеральный состав руд Учалинского, Молодежного и верхних рудных тел Сибайского и Узельгинского месторождений характеризуется как сфалерит-халькопирит-пиритовый. Сульфиды меди в них представлены халькопиритом.

Литература

1. Р.А. Ягудин, Ю.Р. Ягудина, Е.А. Емельянико, Технологические решения при переработке медно-колчеданных руд, Горный журнал, 2014, №7

2. А.П. Ставский, Минеральное сырье: от недр до рынка, - Т.2, М.: Научный мир, 2011, с. 169.

© Хайбуллин А.Р., 2014 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОПРОСЛУШИВАНИЯ СКВАЖИН

Исламов Д.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Гидропрослушивание заключается в изучении особенностей распространения возмущения в пласте между различными скважинами. Для этого в одной из скважин, называемой возмущающей скважиной, изменяют режим работы; это может быть остановка скважины, ее пуск в работу с постоянным дебитом или изменение забойного давления и дебита. После создания импульса в возмущающей скважине наблюдают за изменением давления в соседних реагирующих скважинах. Совершенно очевидно, что изменение давления в реагирующих скважинах обусловлено как импульсом в возмущающей скважине, так и параметрами пласта в направлении каждой реагирующей скважины. Таким образом, гидропрослушивание позволяет выявить особенности строения пласта, которые не всегда представляется возможным установить в процессе разведки и геологического изучения месторождения.

Целью нашей работы было разработать математическую модель, которая позволит получать и визуализировать решение прямой задачи для давления в возмущающей и реагирующей скважинах, в зависимости от параметров пласта и скважины.

В пространстве изображений Лапласа получено аналитическое решение:

$$p^L(s) = \frac{Q^L(s)}{G(s)} K_0 \left(\sqrt{\frac{s}{\chi}} r \right)$$

где

$$G(s) = 2\pi\sigma r_w \sqrt{\frac{s}{\chi}} K_1 \left(\sqrt{\frac{s}{\chi}} r_w \right) + C_s s F$$
$$F = K_0 \left(\sqrt{\frac{s}{\chi}} r_w \right) + S r_w \sqrt{\frac{s}{\chi}} K_1 \left(\sqrt{\frac{s}{\chi}} r_w \right)$$

$p^L(s)$ - изменение давления в реагирующей скважине (в изображении Лапласа), $Q^L(s)$ - дебит в возмущающей скважине (в изображении Лапласа), r - расстояние до реагирующей скважины, r_w - радиус возмущающей скважины, K_0 , K_1 - функции Бесселя 0-го и 1-го порядков, s - параметр преобразования Лапласа, χ - коэффициент пьезопроводности, σ - коэффициент гидропроводности, C_s - параметр влияния ствола скважины в возмущающей скважине.

Для обратного перехода к оригиналу решения используется численное преобразование Лапласа с помощью алгоритма Стефеста. На основании полученного решения задачи разработана диалоговая компьютерная программа для получения модельных кривых изменения давления в возмущающей и реагирующей скважинах.

Выводы:

1. Разработана математическая модель для расчета поля давления в возмущающей и реагирующей скважинах для ГДИ по технологии гидропрослушивания. Достоверность расчетов подтверждена путем сравнения с известными аналитическими решениями в частных случаях.
2. Данная модель и диалоговая программа использовались при планировании ГДИ методом гидропрослушивания на одном из месторождений Республики Татарстан.
3. Математическая модель будет использоваться в Системе обработки ГДИ Гидрозонд для обработки данных гидропрослушивания методом нелинейной регрессии.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ИНТЕРВАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ ПРОБЕГА ЗВУКА НА ОСНОВЕ НЕЙТРОННОЙ ПОРИСТОСТИ

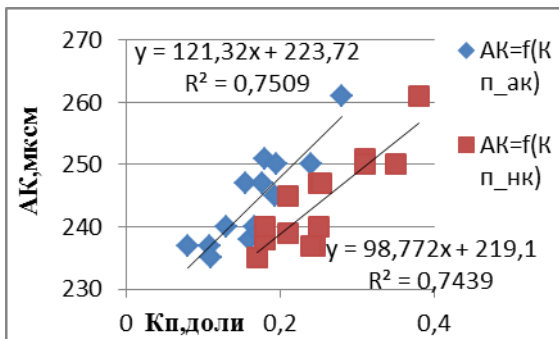
Гафуров А. И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Практически все "старые" объекты месторождений в Башкирии уже выработаны и характеризуются высокой степенью обводненности. Те "старые" структуры, которые были выделены ранее и разрабатывались до сих пор, исчерпали свои запасы. Теперь идет поиск новых, пропущенных горизонтов и новых объектов, на которые раньше не обращалось внимания, и которыми раньше никто не занимался. Поэтому сейчас стоит задача уточнить "старые" структуры (расширить границы), выделить новые структуры по данным сейсморазведочных работ.

Для того чтобы сейсмики могли оконтурить новые структуры по результатам своих моделей, нужны геофизические параметры пластов: пористость, нефтенасыщенная толщина, коэффициент нефтенасыщенности и т. д., а так же необходимо восстановить акустические свойства по всему разрезу месторождения. Это очень важная проблема, так как без интервального времени пробега звука невозможно строить сейсмические модели и структурные карты. В связи с этим, цель моей работы - прогнозирование интервального времени пробега звука.

Мной был проведен анализ 18 скважин Кальшалинского месторождения. Из них в 12 скважинах были спрогнозированы синтетические кривые АК с высокой долей достоверности (рис. 1).



Для оценки качества полученных результатов и вычисления коэффициента достоверности псевдо акустических кривых, по пяти горизонтам были построены зависимости $AK=F(K_{п_ак})$ и $AK=F(K_{п_нк})$ (Рис. 2).

Рис. 1. Зависимость $AK=F(K_{п})$ на Кыновском горизонте

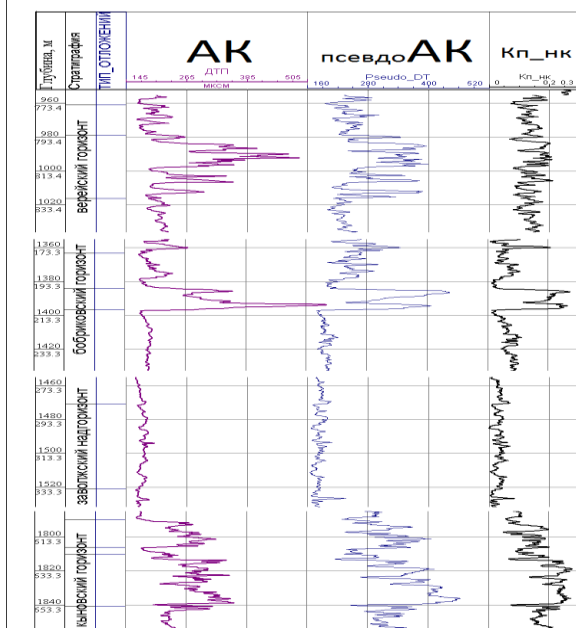


Рис. 2. Планшет скв. 105ИСМ со сравнением синтетической и истинной АК

Литература

1. Сковородников И.Г. Геофизические исследования скважин: Курс лекций. - Екатеринбург: УПТА, 2003. 294 с.
2. Ларионов В.В. Радиометрия скважин. М.: Недра, 1969. 328с.
3. Руководство пользователя системы «ПРАЙМ». Уфа, 2013
4. Подсчет запасов нефти и газа Кальшалинского месторождения за 2010 г. Тема № 2094, с. 291.

DEFINITION OF CRITERIA FOR IDENTIFICATION OF PRODUCTIVE INTERVALS IN THE BAZHENOV FORMATION ACCORDING TO THE WELL LOGGING DATA PROCESSING

Nafikova R.A.

Bashkir State University, Ufa, Russian Federation

Decrease of conventional oil reserves is forcing oil companies to pay more attention to alternative sources of hydrocarbons of the oil and gas. One of them is Bazhenov Formation due to a large number of mineral reserves. The Formation is in depths over 2 kilometers and it is distributed in more than one million square kilometers

Bazhenov Formation features:

- Uneven distribution of wells in a field with high initial flow rate. However, the difference of flow rate could be two orders - from the first tons per day to several hundred per day.
- Wells with oil inflow are characterized by elevated temperatures (95 - 130 °C) and abnormally high reservoir pressure, which may be bigger than the hydrostatic in 1.8 times. Because of these, it leads to an automatic breaking fluid and the formation, and it leads to an increase in pressure/
- Significant increase of production rates following after hydraulic fracturing (HF);
- Sufficiently sharp decline of flow rate: during the year it could be decreased for flow rate order.

The research work is associated with shale oil of Bazhenov Formation on example of Black field (6 wells) in Western Siberia (Russian Federation). According to the inflow data and well logging, we have got mutual features for reservoir identification. There are:

- Relative minimum of gamma-ray logging
- Relative maximum of neutron gamma logging (thermal neutron)
- Relative maximum of travel time (min DT)

The Bazhenov formation is a good way of nonconventional resources due to a large number of mineral reserves. Also the disadvantage of shale oil is short time of high flow rate which is a problem all over the world. Moreover, it needs more proper explorations because these techniques are not widely available of Russian petroleum area.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОМЕТРИИ ПРИ ДИАГНОСТИКЕ РЕЖИМОВ ТЕЧЕНИЯ В ПЛАСТЕ С ГРП

Акчури Р.З.

Башкирский государственный университет

В настоящее время очень активно используется многостадийный ГРП. В результате в пласте могут возникать участки с различными режимами течения. В интервале с ГРП наблюдается линейный приток, в невозмущенной зоне - радиальный. Для диагностики режимов течения могут применяться гидродинамические исследования, но они не эффективны в случае нескольких интервалов притока. Термометрия не обладает таким недостатком, можно диагностировать режимы течения для многопластовых систем.

Температура на забое при линейном режиме изменяется следующим образом:

$$T(t) = T_0 + \varepsilon * \frac{Q\mu}{4Lhk} * \frac{c_{жс}}{c_{пл}} * \frac{Q}{4Lh} * t$$

Температура на забое при радиальном режиме изменяется следующим образом:

$$T(t) = T_0 + \varepsilon * \frac{\Delta p}{\ln \frac{R_k}{r_{скв}}} * \ln \left(1 + \frac{c_{жс}}{c_{пл}} * \frac{Qt}{\pi h r_{скв}^2} \right)$$

Расчеты показали, что температура при линейном режиме потока изменяется медленнее, чем при радиальном (рис.1).

Так же были получены диагностические признаки. Для радиального режима течения: $\frac{dT}{d \ln t} = \varepsilon * \frac{Q}{4 * \pi * \sigma} = const$

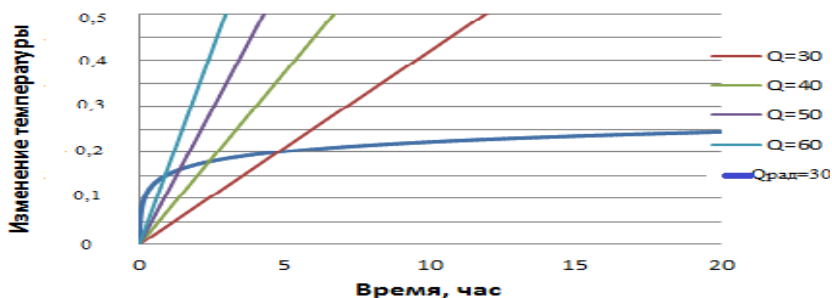


Рис. 1. Изменение температуры на забое скважины со временем

Для линейного режима: $\frac{dT}{d \ln t} = \varepsilon * \left(\frac{Q}{4 * L * h} \right)^2 * \frac{\mu * c_{жс}}{k * c_{пл}} * t$ - линейная

зависимость.

РАСЧЕТ УСЛОВИЙ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ

Абдрахимова В.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Проблема гидратообразования актуальна преимущественно в системах добычи, транспортировки и хранения традиционных углеводородов. При добыче сырья гидраты могут образовываться в призабойных зонах, стволах скважин, промысловых коммуникациях и магистральных газопроводах. Таким образом осложняют процесс исследования и эксплуатации скважины. Отлагаясь на стенках труб, гидраты резко уменьшают их пропускную способность.

Также газогидрат можно рассматривать как новый вид энергетического топлива, добыча которого не освоена на данный момент.

Природный газ, представляющий собой смесь различных компонентов (метан, этан, пропан, изобутан, азот, углекислый газ, сероводород и др.), в соединении с водой в определенных условиях образуют гидраты – твердые кристаллические соединения. Условиями образования являются равновесные давление и температура. Для различных составов природного газа равновесные условия гидратообразования существенно различаются. Особенно значительное влияние оказывают на равновесные давление и температуру такие компоненты как углекислый газ и сероводород. Чем выше молярное содержание этих газов, тем сильнее равновесные условия отличаются от значений для метана, основного компонента природного газа. Для инженеров разработчиков важно иметь простой программный продукт, позволяющий для любого состава газа оперативно определять условия образования гидрата. Их определение проводится несколькими методами.

В данной работе рассмотрен метод Пономарева. Разработана программа, производящей расчет зависимости температуры от давления. Данный метод описывает приближенные аналитические зависимости на основе анализа экспериментальных данных. Расчет производится с учетом молярной концентрации компонент, содержащихся в природном газе, парциальных плотностей изучаемого газа, при известной температуре.

Литература

1. Зотов Г.А., Алиев З.С. «Инструкция по комплексному исследованию газовых и газоконденсатных пластов и скважин», 1980
2. Yuri F. Makogon «Hydrates of Hydrocarbons»
3. Истомин В.А. «Предупреждение и ликвидация газовых гидратов в системах сбора и промышленной обработки газа и нефти», 1990
4. Варгафтик Н.В. «Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей»

© Абдрахимова В.И., 2014 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ДАВЛЕНИЯ ПРИ ОСВОЕНИИ СКВАЖИНЫ СВАБИРОВАНИЕМ

Акчурин Р.З.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

Большие объемы гидродинамических исследований выполняются при освоении скважин после бурения и ремонтных работ. Традиционные ГДИ при освоении скважин свабом и компрессором не позволяют определить ряд важных параметров. В НПФ Геофизика разработан специальный модуль МГДИ-54 для получения качественных КВД. Этот модуль используется на практике. Для разработки алгоритмов обработки данных необходима математическая модель изменения давления в пласте и стволе скважины применительно к технологии МГДИ.

Цель работы заключается в разработке математической модели для описания нестационарного поля давления в пласте.

При свабировании по мере снижения забойного давления начинается приток пластового флюида в ствол скважины. Проводить геофизические исследования в интервале продуктивных пластов с использованием дистанционных приборов в этот период невозможно.

Суть метода в последовательной смене режима работы скважины. По кривой притока и восстановления давления пласта во времени определяют характеристики пласта.

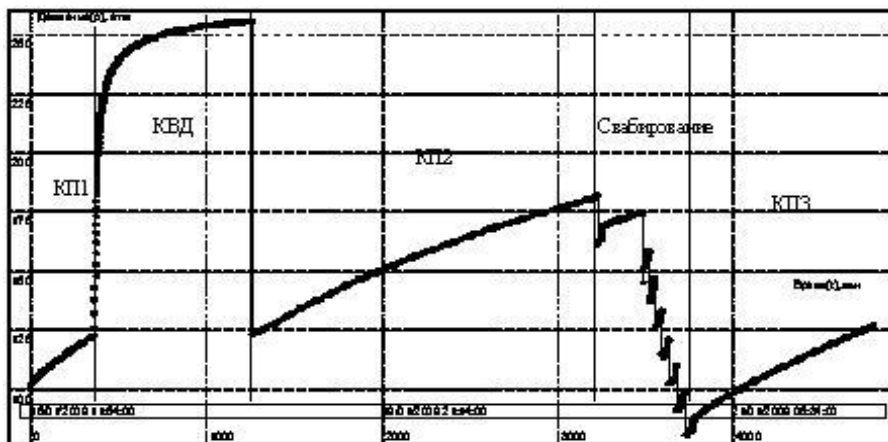


Рис. 1. Изменение давления в скважине, зарегистрированное автономным манометром

Большим плюсом данного способа исследования является то, что насосно-компрессорная труба перекрывается пакером не на устье, а ближе к забою скважины, в результате чего наблюдается более быстрая регистрация кривой восстановления давления, а также уменьшается влияние ствола скважины из-за малого объема подпакерного пространства.

Была написана программа для моделирования КВУ и КВД по данным свабирования и по предполагаемым характеристикам пласта.

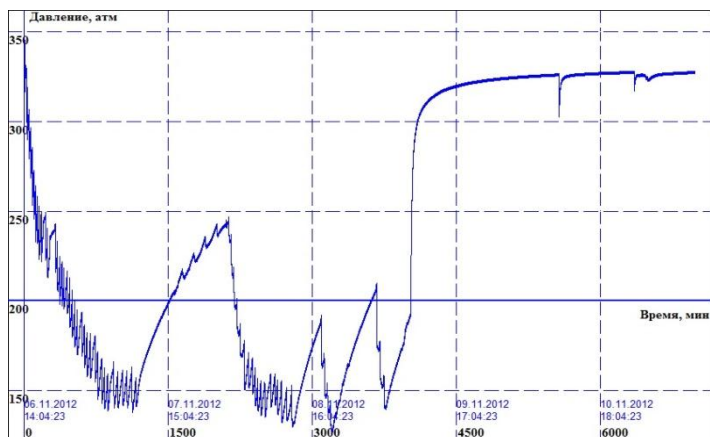


Рис. 2. Изменение давления в скважине

По имеющимся данным смоделированы КВУ и КВД с заданной длительностью (рис. 3)

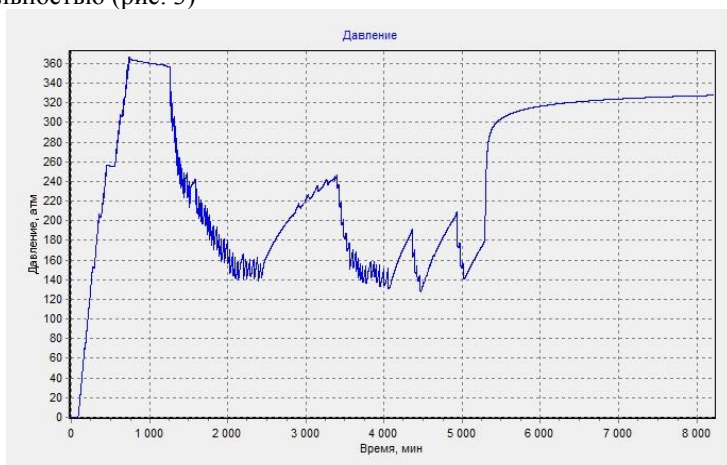


Рис. 3. Результат моделирования

УДК 532.546.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ НЕФТИ ОТ ГРАДИЕНТА ДАВЛЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ФИЛЬТРАЦИИ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ НЕФТИ

Морозкин Н.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе предложен способ, позволяющий аппроксимировать зависимость вязкости от градиента давления в задаче фильтрации вязкопластичной нефти. В отличие от работ [1], [2], если использовать данный метод аппроксимации, функция скорости будет гладкой и всюду дифференцируемой, что удобно для применения различных численных методов. На рисунках 1,2 схематично представлены графики зависимостей вязкости и скорости от градиента давления.

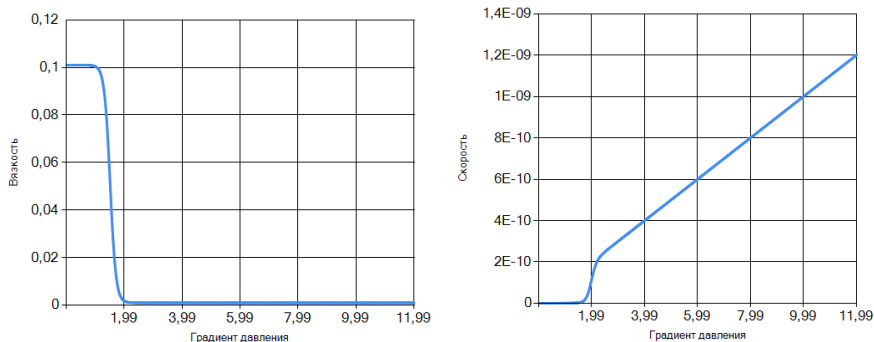


Рис 1. а) Зависимость вязкости от градиента давления;
б) скорости от градиента давления

Литература

1. Хайдар А.М. РАСЧЕТНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФИЛЬТРАЦИИ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ НЕФТИ ПРИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ НАГРЕВЕ // Электронный научный журнал «Нефтегазовое дело». 2006. №1. URL: http://ogbus.ru/authors/Haidar/Haidar_1.pdf
2. Положаенко С.А. Математическое моделирование процессов фильтрации аномальных жидкостей / С. А. Положаенко // Пр. Одес. політехн. ун-ту. - 2007. - Вип. 1. - С. 151-155. - Библиогр.: 4 назв. - рус.

УДК 550.8.08

УСТРОЙСТВО ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ КОЛИЧЕСТВА СВЯЗАННОЙ ВОДЫ В КЕРНЕ МЕТОДОМ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ КОНДУКТОМЕТРИИ

Зарипов А.Р. Сушко Б.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Разработанный нами способ предназначен для использования в нефтедобывающей промышленности при исследовании пластов, определении их остаточной водонасыщенности, а также для оперативного контроля влажности на нефтепромысловых скважинах. Способ может найти применение как в полевых условиях, так и в промышленных и научно-исследовательских лабораториях для разработки технологий увеличения нефтеотдачи пластов и при подсчете запасов нефти и газа, а также при оперативном контроле за разработкой нефтяных месторождений.

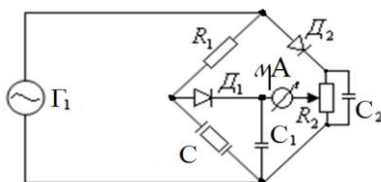


Рис. 1 Электрическая схема бесконтактного высокочастотного кондуктометрического моста для определения остаточной водонасыщенности

Литература

1. Поляков Е. А. Методика изучения физических свойств коллекторов нефти и газа. - М.: Недр, 1981. - С. 116

(с) Зарипов А.Р., Сушко. Б.К., 2014 г.

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

УДК 532.529

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ ИЗ ЩЕЛИ НА БОКОВОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО РЕЗЕРВУАРА

Каримова Ю.З.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Развитие традиционных и новых отраслей современного производства вызывает повышенный интерес к теоретическому исследованию задач истечения жидкости из резервуара через щель в боковой поверхности. В связи с этим актуальна проблема анализа гидродинамического состояния резервуаров с протяженными отверстиями.

Традиционный подход, основанный на комбинировании уравнения Бернулли и уравнения неразрывности с позволяет в первом приближении описать, например, изменение уровня жидкости как функции от параметров системы и жидкости. При таком подходе уравнение для изменения уровня жидкости может быть записано как:

$$\pi R^2 \frac{dh}{dt} = - \int_{z_1}^{z_2} v(z, h, \Delta p) b(z) dz \quad (1)$$

В случае, если щель постоянна по ширине, равна b_0 и высота щели совпадает с высотой резервуара, то это уравнение может быть записано как:

$$\frac{dh}{dt} = - \frac{2\sqrt{2gh(t)}^{\frac{3}{2}} b_0}{3\pi R^2} \quad (2)$$

Данное уравнение при начальном условии $h(0)=h_0$ имеет явное аналитическое решение в виде:

$$h(t) = \frac{9\pi^2 R^4 h_0}{6b_0\sqrt{2gh_0}\pi R^2 t + 2gh_0 b_0^2 t^2 + 9\pi^2 R^4} \quad (3)$$

Заключение. В работе представлена математическая модель истечения жидкости из щели в боковой поверхности цилиндрического резервуара.

Литература

1. Шагапов В.Ш, Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.

© Каримова Ю.З., 2014 г. УДК 621.314.21.26

САМОПОДОБНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ПРИ СВАРКЕ ВЗРЫВОМ; ИХ ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ

Пушкин М.С., Танкеев А.П., Иноземцев А.В.

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

Проведён поиск фракталов внутри переходной зоны соединения, полученного сваркой взрывом. Найдены различные типы фракталов, выяснены причины их возникновения. Показано, что для несмешивающихся фаз зоны локального расплавления представляют собой фрактальные кластеры.

Так как сварка взрывом - высокоинтенсивный процесс с нелинейными параметрами на границе, то поверхность разделов таких материалов сильно изрезана. Изучение её с помощью фракталов инициировано самоподобностью элементов рельефа.

Реальный ландшафт поверхности раздела включает в себя трёхмерные неоднородности: выступы и зоны локального расплавления. Рассматривается совокупность островов, которые являются продольными сечениями поверхности раздела плоской границы медь-тантал [1]. Для каждого острова вычисляется площадь A и периметр L .

Для фрактальных объектов выполняется соотношение $\log A \propto (2/D) \log L$, где D - фрактальная размерность. На рис. 1. для островов тантала приведена зависимость $\log A$ от $\log L$, которая может быть аппроксимирована прямой линией. Этот факт указывает на фрактальный характер островов, размерность которых для островов тантала $D = 1.68 \pm 0.07$, для зон локального расплавления $D = 1.58 \pm 0.06$ [2]. Меньшее значение размерности связано с тем, что из-за расплавления граница зоны является более гладкой.

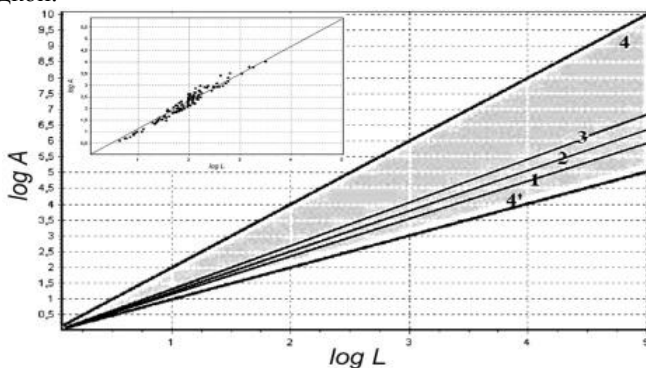


Рис.1. Cu-Ta, плоская граница, продольное сечение: зависимость площадь-периметр для островов тантала (линия 1), зон локального расплавления

(линия 2), наноостровов тантала (линия 3), круглых островов (линия 4); на врезке: линия 1 построена по точкам (точка-остров)

Фрактальное описание поверхности раздела при сварке взрывом ранее не проводилось.

Литература

1. Greenberg V.A., Ivanov M.A., Rybin V.V., et. al Materials Characterization. 2013. 75. P. 51-62.

2. Гринберг Б.А. , Иванов М.А., Пушкин М.С., и др. Деформация и разрушение материалов, 2014 №10 (в печати).

УДК 532.614.3

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ ПРИ ЗАКАЧКЕ ПОВЕРХНОСТНО АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Янышев А.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время одним из распространенных методов увеличения добычи нефти из пласта является заводнение и закачка поверхностно-активных веществ (ПАВ). Поверхностно-активные вещества – химические соединения, которые, концентрируясь на поверхности раздела фаз, вызывают снижение поверхностного натяжения. Однако в процессе фильтрации ПАВ адсорбируются на поверхности породы, что приводит к их частичной потере и снижению эффективности процесса. Поэтому исследование адсорбционных процессов при закачке растворов ПАВ представляет большой интерес для нефтяной промышленности

Исследование процесса адсорбции раствора ПАВ при фильтрации в пористой среде на водонасыщенных насыпных моделях, проводилось на установке исследования проницаемости кернов (УИПК-1М). Через модель пористой среды фильтровался раствор ПАВ заданной концентрации при пластовой температуре. После окончания фильтрации модель взвешивалась, затем проводилась разрезка модели на равные элементы. Для удаления свободного объема ПАВ из элементов модели использован метод центрифугирования, при котором за счёт действия центробежных сил достигается максимальное извлечение раствора ПАВ из порового объема элементов модели. Насыщенный измельченный керн из каждого элемента модели помещался в центрифугу, где при вращении жидкость отбрасывалась и накапливалась в пробирке, которую затем анализировали на содержание ПАВ. По концентрации в анализе рассчитывалось содержание ПАВ в поровом объеме элементов модели.

По полученным концентрациям рассчитывалось содержание ПАВ на поверхности измельченного зерна в каждом элементе модели, что дало возможность построить график распределения массы ПАВ в поровой жидкости по длине модели, а также удельного содержания в элементах модели (рис. 1).

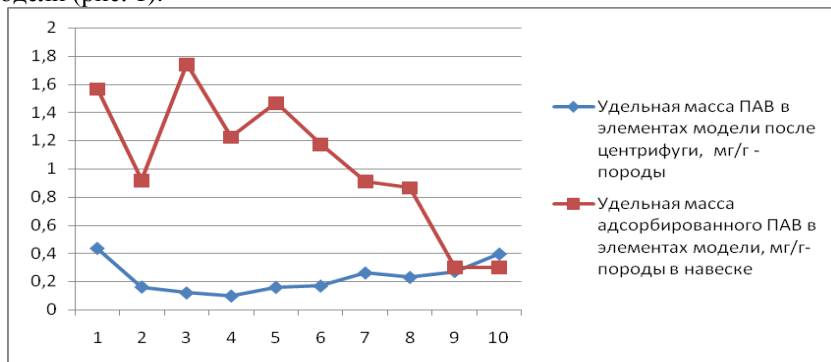


Рис. 1. Сравнительный анализ распределения удельного содержания ПАВ по длине модели

Из рис.1 видно, в насыпной модели при фильтрации наблюдается условно равномерное накопление ПАВ в поровой жидкости от входа модели (отрезок 10) до отрезка 3, которое затем плавно возрастает к выходу (отрезки

1, 2). Это объясняется тем, при последовательной прокачке через модель нескольких поровых объемов раствора ранее адсорбированный ПАВ на входных элементах «смывается» новыми порциями жидкости и скапливается на выходных элементах 2, 3.

Таким образом, анализ динамики содержания ПАВ в поровой жидкости в элементах модели пласта показал, что распределение содержания ПАВ в поровой жидкости по длине модели происходит равномерно, за исключением выходных элементов 1, 2, в которых скапливается десорбированный ПАВ.

Литература

1. Benkő M., Puskás S., Király Z. Application of mass spectrometry for study of the adsorption of multicomponent surfactant mixtures at the solid/solution interface //Adsorption. – 2013. – Т. 19. – №. 1. – С. 71-76
2. Ланге К. Р. Поверхностно-активные вещества. – СПб. : Профессия, 2005. – 240 с.
3. Холмберг К. и др. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных растворах //Москва: Бинوم. – 2007. – 528 с.

© Янышев А.Г., 2014 г.

КИНЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ СТРУИ В СПУТНОМ ПОТОКЕ

Ряхина Е.Г.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Изучение движения осесимметричной (круглой) струи углеводородов в спутном потоке более плотной жидкости является актуальной задачей прикладной математики в области гидромеханики. В работе предложена модель взаимодействия струи с окружающей средой на основе введения заданного поля скоростей потока в координатной форме.

Математическая модель для описания движения потока принята в параметрическом квазиодномерном приближении. Тогда система уравнений неразрывности для компонент потока может быть записана в следующем виде [1]:

$$\frac{d}{ds}(k_w M) = J, \quad \frac{d}{ds}(k_o M) = 0, \quad \frac{d}{ds}(k_g M) = J_g, \quad M = \rho F v,$$

$$k_w + k_o + k_g = 1, \quad \rho = \left(\frac{k_w}{\rho_w} + \frac{k_o}{\rho_o} + \frac{k_g}{\rho_g} \right)^{-1}, \quad F = \pi a^2 \quad (1)$$

Уравнение баланса импульса в струе примет вид:

$$M \frac{d}{ds}(v(s) \vec{r}(s)) = -(\rho - \rho_w) F g \vec{k} + J(\vec{w} - \vec{v}) + \vec{f}$$

$$\vec{r} = \frac{d\vec{r}}{ds}, \quad \vec{w} = w(x, y, z) \vec{i}, \quad (2)$$

Нормальное направление определяем на основе векторов \vec{r} , \vec{w} по следующей схеме:

$$\vec{w}_\tau = w_\tau \vec{r} = (\vec{w} \cdot \vec{r}) \vec{r} = w x_s (x_s \vec{i} + y_s \vec{j} + z_s \vec{k})$$

$$\vec{w}_n = \vec{w} - \vec{w}_\tau = w \left((1 - x_s^2) \vec{i} - x_s y_s \vec{j} - x_s z_s \vec{k} \right) \quad (3)$$

$$\vec{n} = \frac{\vec{w}_n}{w_n} = \frac{(1 - x_s^2) \vec{i} - x_s y_s \vec{j} - x_s z_s \vec{k}}{\sqrt{1 - x_s^2}}$$

Заключение. В работе представлена кинематическая модель описания взаимодействия струи с окружающей средой.

Литература

1. Шагапов В.Ш, Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.

© Ряхина Е.Г., 2014 г.

ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ О РАЗЛИВЕ ЖИДКОСТИ НАД ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Гильманов С.А.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Моделирование разлива жидкости над поверхностью является одной из прикладных задач гидромеханики. Эта актуальность связана с большим количеством разливов жидкостей в быту, природе и промышленности.

Модель разлива на горизонтальной поверхности из источника, размеры которого малы по сравнению с площадью поверхности разлитой жидкости для изотермической несжимаемой жидкости по аналогии с теорией мелкой воды имеет следующий вид [1]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rhv) = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial r} = -g \frac{\partial h}{\partial r} - \alpha v^m h^{-n} \quad (1)$$

здесь h – высота жидкости при координате r в момент времени t , v – усредненная скорость, g – ускорение силы тяжести на поверхности Земли, α , m , n – эмпирические параметры.

В случае безинерционного потока при следующих краевых условиях имеем

$$h(l(t)) = 0, \quad 2\pi rhv \Big|_{r \rightarrow 0} = Q(t) \quad (2)$$

здесь $l(t)$ – радиальная координата подвижной границы, $Q(t)$ – интенсивность источника.

Приняв первое слагаемое (3) равным 0, получим решение стационарного уравнения. При этом $m \neq 1$:

$$h = \left(\frac{\alpha}{g} \left(\frac{C_1^m}{r^{m-1}(m-1)} - C_2 \right) (m+n+1) \right)^{\frac{1}{m+n+1}} \quad (3)$$

Случай, когда $m=1$ дает широкоизвестное решение, полученное, например в [2].

В работе получены обобщенные аналитические решения, описывающие поведение стационарных разливов с источниками постоянной интенсивности.

Литература

1. Шагапов В.Ш, Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.
2. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. — М.: Наука, 1977. — 664 с.

© Гильманов С.А., 2014 г.

АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ЗАДАЧИ О НЕУСТАНОВИВШЕЙСЯ ФИЛЬТРАЦИИ

Муллашев А.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Рассматривается неустановившаяся фильтрация несжимаемой жидкости.

Пусть имеется пористый горизонтальный пласт постоянной толщины H и неограниченной протяженности. В пласте пробурена скважина, вскрывшая его на всю толщину. При отборе газа его частицы движутся по горизонтальным траекториям, радиально сходящимся к скважине. Давление и скорость фильтрации зависят только от расстояния данной точки до оси скважины r . Уравнение пьезопроводности в плоскорадиальном случае имеет следующий вид:

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = \kappa^p \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p^2}{\partial r} \right) = 0, \quad (1)$$

В начальный момент времени давление в пласте одинаково во всех его точках. Через скважину бесконечно малого радиуса откачивается газ с постоянным массовым расходом. Сформулированная задача имеет автомодельное решение. Уравнение (1) запишется в виде:

$$\frac{d^2 p^2}{d\xi^2} = - \left(\frac{\xi}{2} + \frac{1}{\xi} \right) \frac{dp^2}{d\xi}. \quad (2)$$

Аналитическое решение данного уравнения может быть представлено в следующем виде:

$$p^2 = p_0^2 - \frac{Q_m \mu R_g T}{\pi k H} \int_{\xi}^{\infty} \frac{1}{\xi} \exp \left(- \frac{\xi^2}{4} \right) d\xi \quad (3)$$

В работе получено поле давлений для неустановившейся фильтрации несжимаемой жидкости.

Литература

1. Хасанов М.К. Элементы теории фильтрации: учебное пособие, Уфа РИЦ БашГУ, 2008 г. – 60 с.
2. Басниев К.С., Дмитриев Н.М., Розенберг Г.Д. Нефтегазовая гидромеханика: издание второе – М.: Ижевск, 2005 г. – 542 с.

© Муллашев А.Ф., 2014 г.

АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О НЕУСТАНОВИВШЕЙСЯ ФИЛЬТРАЦИИ

Арасланова А.М.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Рассматривается прямолинейно-параллельная задача о фильтрации совершенного газа.

Пусть имеется полубесконечный пористый горизонтальный пласт постоянной толщины. В пласте пробурена скважина, вскрывшая его на всю толщину. Все параметры, описывающие состояние системы в любой точке в данный момент времени зависят только от расстояния x данной точки до оси скважины. В этом случае уравнение пьезопроводности запишется следующим образом:

$$\frac{\partial p^2}{\partial t} = K^p \frac{\partial^2 p^2}{\partial x^2}, \quad (1)$$

В начальный момент времени давление во всех точках пласта одинаково и равно P_0 . Через границу пласта нагнетается газ под постоянным давлением P_s . В этом случае задача имеет автомодельное решение. Уравнение (1) принимает вид:

$$-\frac{\xi}{2} \frac{d p^2}{d \xi} = \frac{d^2 p^2}{d \xi^2}. \quad (2)$$

Аналитическое решение данного уравнения записывается в следующем виде:

$$p^2 = p_s^2 + \frac{p_0^2 - p_s^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) d\xi. \quad (3)$$

В работе получено распределение давления в пористом пласте при нагнетании и отборе газа.

Литература

1. Шагапов В.Ш., Мусакаев Н.Г., Хасанов М.К. Нагнетание газа в пористый резервуар, насыщенный газом и водой. Т. 12, №4. 2005 г. - 645-656 с.
2. Петров А.Г. Аналитическая гидродинамика. М.: Физматлит, 2009. 518с.

© Арасланова А.М., 2014 г.

УДК 532.5-1

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ В ПУЗЫРЬКОВОЙ ЖИДКОСТИ В ТРУБЕ С ЭЛАСТИЧНЫМИ СТЕНКАМИ

Бобровников А.В.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Целью данной работы является развивать устойчивые ударные теории для пузырьковой жидкости в деформируемых цилиндрических трубах. Мы описываем модель пузырькового потока, и сформулируем квазиодномерные уравнения для течения в цилиндрической трубе.

Излучаемые поля давления определяется :

$$p_a = \frac{p \dot{R}}{r} (2\dot{R}^2 - R\ddot{R});$$

Введем скорость распространения линейных волн в смеси с учетом сжимаемости обеих смесей и трубкой, и получим устойчивые ударные отношения.

Уравнение движения задается формулой:

$$M_b \ddot{x}_b = -\Delta p_1 A_0;$$

Интегрируя один раз и задания начальных условий в момент времени t_2 , получим решение:

$$\dot{x}_b = \dot{x}_b(t_2) \exp\left(-\frac{t-t_2}{\tau}\right);$$

На основе одномерных уравнений сохранения получена структура стационарной ударной волны в пузырьковой жидкости.

Литература

1. Ando, K. 2010 Effects of polydispersity in bubbly flows. PhD thesis, California Institute of Technology.
2. Ando, K. Colonius, T. & Brennen, C. E. 2009 Improvement of acoustic theory of ultrasonic waves in dilute bubbly liquids. J. Acoust.

© Бобровников А.В., 2014 г.

УДК 536.42

**ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ЗАДАЧИ СТЕФАНА ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, ИНИЦИИРУЕМЫХ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ**

Хисматуллина Н.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исследование нестабильных состояний при воздействии на них потоков энергии имеет важное научное и прикладное значение в многих областях техники и природы.

Примером подобных физических процессов являются конденсация, кристаллизация или сублимация, в которых наблюдается смещающаяся граница между фазами. Данные фазы задаются не явно и могут смещаться со временем. Скорость смещения межфазных границ определяется дополнительным условием на границе фаз, что приводит к нелинейному виду. При постоянных коэффициентах уравнений вследствие наличия в ней условия типа Стефана на границе фазового перехода модель является нелинейной и основным методом ее решения служат численные методы.

В докладе рассматривается применение модели задачи Стефана для описания фазовых переходов, инициируемых нагревом электромагнитным излучением.

В последующих работах будет также исследован комбинированный теплообмен: образование конденсата на стенках трубопровода под влиянием внешнего теплоподвода за счет конвекции. Целью работ является математическое описание температурных полей.

Литература

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977г., 735с.
2. Мейрманов А.М. Задача Стефана. Новосибирск Наука, 1986г. 239с.

© Хисматуллина Н.Г., 2014 г.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ОБСАЖЕННОЙ СКВАЖИНЕ, ОКРУЖЕННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДОЙ

Магадеева Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Рассматривается исследование эволюции гармонических волн в зазоре между зондом и обсаженной стенкой скважины, окруженной проницаемой средой.

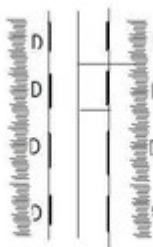


Рис. 1. Схема цилиндрической скважины с проницаемым участком

Для модели локального способа акустического контроля приняты следующие допущения:

- канал заполнен той же акустически сжимаемой средой (жидкостью), что и несжимаемый скелет окружающего его пористого пространства;

- длина зонда L значительно больше длины волны λ ($L \gg \lambda$), которая в свою очередь больше толщины зазора между корпусом зонда и скважины $\lambda \gg (a - a_1)$;

- кроме того, будем пренебрегать влиянием вязкости и теплопроводности на изменения импульса давления в этом зазоре (эволюция сигнала в основном определяется эффектами фильтрации в окружающее пористое пространство).

С учетом отмеченных допущений для описания распространения возмущений между поверхностями корпуса зонда и скважины, окруженной однородной пористой средой представлена следующая система линеаризованных уравнений

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \rho_0 \frac{\partial \omega}{\partial z} = -\frac{2\pi b^2 n a \rho_0}{a^2 - a_1^2} u, \quad \rho_0 \frac{\partial \omega}{\partial t} = -\frac{\partial p}{\partial z}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\pi b^2 l \rho) = \rho_0 \pi b^2 u - 2\pi l \rho_0 u^{(1)},$$

$$\rho_0 \frac{\partial u^{(1)}}{\partial t} = -m^{(1)} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial r} - \frac{m^{(1)} \mu}{k^{(1)}} u^{(1)}, m^{(1)} \frac{\partial p^{(1)}}{\partial t} + \frac{\rho_0}{r} \frac{\partial (r u^{(1)})}{\partial r} = 0.$$

Здесь ρ - возмущение плотности жидкости, p - возмущение давления жидкости, ω - скорость среды в зазоре между корпусом зонда и стенкой скважины, b - радиус канальцев, n - плотность перфорации, a - радиус скважины, a_1 - радиус зонда, ρ_0 - плотность жидкости в невозмущенном состоянии, u - скорость фильтрации через радиальные трубчатые каналцы, l - длина канальцев, μ - динамическая вязкость жидкости, $m^{(1)}, k^{(1)}$ - соответственно коэффициенты пористости и проницаемости, $p^{(1)}, u^{(1)}$ - распределение давления и скорости фильтрации вокруг канала. При этом на цилиндрической границе канальца выполняется условие:

$$u = u^{(1)} \Big|_{r^{(1)}=b} \quad (2)$$

Когда канал окружен пористым пространством бесконечной толщины при распространении акустических возмущений в зазоре (фильтрационные процессы в пористой среде вблизи скважин происходят в слоях, характерная протяженность которых значительно меньше толщины пористого пространства вокруг скважины) систему уравнений (1) необходимо дополнить граничными условиями

$$p^{(1)} = p, r^{(1)} = b; \quad (3)$$

$$p^{(1)} = 0, r^{(1)} \rightarrow \infty; \quad (4)$$

На основании системы уравнений и граничных условий, для решения уравнения в виде гармонических волн, можно получить дисперсионное уравнение

Литература

1. Шагапов В. Ш., Булатова З.А., Щеглов А.В. К возможности акустического зондирования газовых скважин // Инженерно-физический журнал № 3-Минск, 2007.-С.21-26

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОПАНТОВ ПРИМЕНЯЕМЫХ НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ

Шангареев И.И., Назарова А.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для повышения продуктивности скважин производят гидроразрыв пласта (ГРП) – формирование трещин в массивах газо-, нефте-, водонасыщенных и других горных породах под действием подаваемой в них под давлением жидкости. Актуальность применения ГРП связана с возможностью значительного сокращения расходов нефтедобывающих компаний на поддержание заданного объема добычи за счет возобновления отдачи пластов и ограничения разведки, разработки и обустройства новых месторождений [1].

В технологии ГРП в качестве расклинивающего агента для повышения эффективности нефтеотдачи скважин используется гранулообразный материал – пропант. Для проведения лабораторных исследований по определению проводимости пропантной пачки был произведен отбор проб пропанта разных фракций, применяемых при ГРП на месторождениях Западной Сибири. Лабораторные исследования проводимости пропантной пачки проводились на установке измерения удельной проводимости и проницаемости расклинивающего агента Temco PCES-100 производства CoreLabInst. (США). Прочностные свойства проб исследованы по стандарту ГОСТ Р 51761-2005 [2]. Определены базовые физико-химические параметры: гранулометрический состав, насыпная плотность, степень сферичности и округлости гранул, сопротивление раздавливанию и растворимость пропанта в кислоте. Среди всех протестированных выделяется экспериментальная партия пропанта марки Fores фракции 16/20. Насыпная плотность образца гораздо меньше, чем у остальных пропантов при сопоставимых результатах по проводимости. Данный результат указывает на потенциал снижения концентрации гуара в технологической жидкости ГРП при применении данного пропанта, который снижает эффект применения ГРП вследствие затрудненного выхода его из порового пространства. На сегодняшний день применение экспериментального пропанта марки Fores фракции 16/20 на месторождениях Западной Сибири может быть весьма эффективным.

Литература

1. ISO 13503-5-2006. Промышленность нефтяная и газовая. Растворы и материалы для закачивания скважин. Часть 5. Методика измерения долгосрочной проводимости расклинивающих наполнителей.– 01.10.2006. – 31 с.
2. ГОСТ Р 51761-2005 «Пропанты алюмосиликатные».

© Шангареев И.И., 2014 г.

РАСТЕКАНИЕ ЖИДКОСТИ ПО ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Гараев Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Изучение движения жидкого потока по рельефной поверхности является актуальной задачей прикладной математики в области гидромеханики. В работе получен лагранжев профиль начального состояния потока.

Поверхность описывается обобщенной формулой вида $y(x) = ax^2$.

Математическая модель для описания движения потока принята аналогично теории мелкой воды. Тогда система уравнений при отсутствии источников и стоков может быть записана в следующем виде [1]:

$$\frac{d}{dt}(h-y) + (h-y)\frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} = -g\frac{\partial h}{\partial x} - f(v). \quad (2)$$

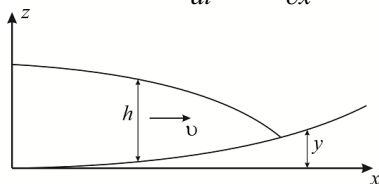


Рис. 1. Схема потока

Для второго слагаемого в правой части (2) примем линейную зависимость от скорости для сил сопротивления в виде $f(v) = \alpha v$. Параметр α может быть определен при помощи эмпирических измерений. Решение системы (1)-(2) ищем в лагранжевых координатах в следующем виде [2]:

$$x = X(t)x_0, h = y + \frac{h_0(x_0)}{X(t)}, v = \dot{X}(t)x_0 \quad (3)$$

Заключение. В работе представлена математическая модель растекания жидкости по параболической поверхности.

Литература

1. Шагапов В.Ш, Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.
2. Петров А.Г. Аналитическая гидродинамика. М.: Физматлит, 2009. 518с.

© Гараев Р.Р., 2014 г.

ПЛОСКО-ОДНОМЕРНЫЙ РАЗЛИВ С УЧЕТОМ ВПИТЫВАНИЯ В ГРУНТ

Мансурова Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Наличие в природе, быту и производстве различного рода разливов позволяет считать проблему разливов актуальной задачей с точки зрения гидродинамики и прикладной экологии. Для ряда разливов может быть использован подход, когда описание модели является квазиодномерным. Наиболее простую форму имеют плоско-одномерные потоки

Система уравнений описывающая плоско-одномерный разлив жидкости над горизонтальной поверхностью с учетом впитывания в грунт может быть записана как [1]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(hv) = -u, \quad \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = -g \frac{\partial h}{\partial x} - f(v) \quad (1)$$

Для мелких потоков, когда длина разлива намного больше высоты потока может быть использовано предположение о линейности функции сопротивления $f(u)$ относительно скорости течения и условие безинерционного движения:

$$f(v) = v/\tau, \quad dv/dt = 0 \quad (2)$$

Тогда система (1) может быть записана в виде одного уравнения:

$$\frac{\partial h}{\partial t} - g\tau \frac{\partial}{\partial x} \left(h \frac{\partial h}{\partial x} \right) = -u \quad (3)$$

Одно из решений уравнения вида (3) может быть функция вида:

$$h = a_0(t) + a_1(t)x + a_2(t)x^2 \quad (4)$$

Подстановка (4) в (3) позволяет свести решение ДУ в частных производных к системе обыкновенных ДУ, решаемых аналитически. Подбор корректных начальных и краевых условий позволяет использовать полученные аналитические решения.

Литература

1. Шагапов В.Ш., Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.

© Мансурова Р.А., 2014 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АВТОМОДЕЛЬНОСТИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ РАЗЛИВОВ ЖИДКОСТИ

Скаридова Т.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Моделирование различных гидрофизических процессов, связанных с движением жидкости по твердой горизонтальной поверхности обычно описывается при помощи системы уравнений неразрывности и Эйлера. В некоторых симметричных случаях эти уравнения могут быть записаны в квазиодномерном приближении, что позволяет снизить математическую сложность задачи. При этом использование автомодельности позволяет свести решение нелинейных ДУ в частных производных к решению системы ОДУ.

Система уравнений описывающая радиально-симметричный разлив жидкости над горизонтальной проницаемой поверхностью в гидродинамическом безнапорном приближении может быть записана в виде [1]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rhv) = -u, \quad \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial r} = -g \frac{\partial h}{\partial r} - \alpha v^n \quad (1)$$

Для дальнейшего исследования введем замену переменной в виде:

$$h(r,t) = a(t)f(\xi), v(r,t) = bV(\xi), r = \xi b \quad (2)$$

Тогда система (1) может быть записана в виде:

$$\frac{b\dot{a}}{ab} = \frac{df}{d\xi} \cdot \frac{\xi}{f} - \frac{1}{f\xi} \frac{d}{d\xi} (\xi fV), \quad \alpha \frac{d}{dt} (a^{-1}bb^n) = - \frac{d}{d\xi} \left(\frac{(V-\xi)}{V} \frac{dV}{d\xi} \right) \quad (3)$$

Левые части в (3) зависят только от времени, а правые части от переменной ξ . Это значит, что левые и правые части не зависят ни от времени, ни от автомодельной переменной и могут быть приравнены к некоторым специальным параметрам [2]. Тогда система (3) может быть решена как система 4-х ОДУ, две из которых зависят от ξ , а две от времени. При этом некоторые из решений могут быть аналитическими, явными или неявными в зависимости от величины специальных параметров.

Литература

1. Шагапов В.Ш, Гильманов С.А. Растекание жидкости по поверхности, сопровождаемое впитыванием в грунт // ПМТФ.2010. Т.51.№5. С.88-94.
2. Сабитов К.Б. Уравнения мат.физики. М.: Наука.2013. 340с.

© Скаридова Т.Ю., 2014 г.

МОДЕЛЬ МАССООБМЕНА МНОГОФАЗНОЙ СМЕСИ В ТРУБЕ С УЧЕТОМ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ

Могильникова А.П.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Изучение течения многофазной смеси (нефть+вода+газ) в трубе в условиях, когда возможно образование гидратной корки на пузырьках газа является актуальной задачей прикладной физики.

Математическая модель для описания движения подобных многофазных потоков рассмотрена в квазиодномерном приближении. Тогда система уравнений может быть записана в следующем виде [1]:

$$\frac{d}{dz}(Sn_i w_i) = 0, \quad (1)$$

где $S = \pi R^2$ – площадь сечения канала; n_i и w_i ($i = g, o$) – соответственно число пузырей (капель) в единице объема и их скорость относительно стенок канала. Здесь и в дальнейшем нижние индексы g, h, l, o соответствуют параметрам газа, гидрата, воды и нефти.

Уравнения сохранения масс газа, гидрата, воды и нефти запишем в виде:

$$\frac{dM_i}{dz} = -J_i \quad (2)$$

$$M_i = S\rho_i^0 \alpha_i w_i \quad (3)$$

где $M_i, \rho_i^0, \alpha_i, w_i$ ($i = g, h, l, o$) – соответственно массовый расход, истинная плотность, объемное содержание, скорость i -ой фазы; J_i ($i = g, h, l$) – интенсивность расхода i -ой фазы.

Поскольку гидрат образуется на газовом пузырьке, то $W_h = W_g$. Так как гидрат представляет собой клатратное соединение с массовым содержанием газа G , то интенсивности расхода газа, гидрата и воды связаны соотношением:

$$J_g = GJ_h, \quad J_l = (1-G)J_h \quad (4)$$

Приведенную систему необходимо дополнить следующими кинематическими соотношениями:

$$\sum_i \alpha_i = 1, \quad \alpha_g = \frac{4}{3}\pi a_g^3 n_g, \quad \alpha_h = \frac{4}{3}\pi(a_h^3 - a_g^3)n_g, \quad \alpha_o = \frac{4}{3}\pi a_o^3 n_o \quad (5)$$

где a_g, a_h и a_o – соответственно радиусы газовых, гидратных пузырьков и капель нефти.

© Могильникова А.П., 2014 г.

ИМПЕДАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАСТВОРА ПАВ В НЕПОЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ

Кабанова П.К., Картавцева И.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изучение электропроводности растворов неионных поверхностно-активных веществ (ПАВ) в неполярных жидкостях является актуальной задачей в настоящее время. Общепринято, что основными переносчиками заряда в таких системах являются инверсные мицеллы, однако детальные механизмы их образования и динамики не изучены полностью [1, 2].

В работе экспериментально изучался раствор неионного ПАВ SPAN 80 (сорбитан моноолеат - $C_{24}H_{44}O_6$) в неполярной жидкости - тетрадекане ($C_{14}H_{30}$). Массовая концентрация ПАВ составляла 1%. Для изучения процесса переноса заряда был использован метод импедансной спектроскопии, реализованный в аппаратном комплексе Autolab PGSTAT 302N. Метод основан на измерении полного сопротивления (импеданса) электрохимической ячейки и зависимости этого сопротивления от частоты переменного тока.

Полученные частотные зависимости сопротивлений показаны на рис. 1а. На рис. 1б показан годограф (рис. 1б), который служит наглядным представлением экспериментальных данных.

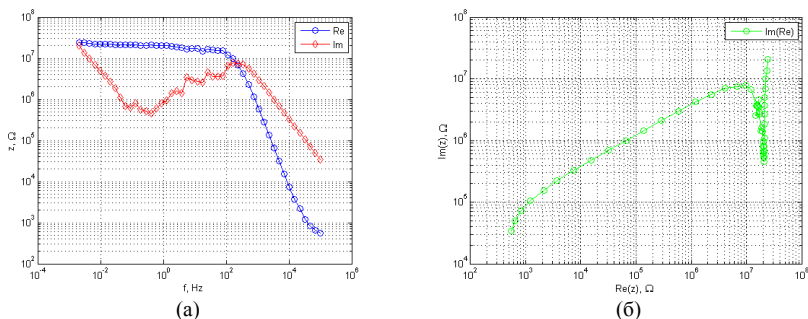


Рис. 1. Спектр (а) и годограф (б) импеданса.

Литература

1. Filip Beunis et al., Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2013, v. 18, pp. 129–136.
2. Andrei Dukhin and Sean Parlia, Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2013, v. 18, pp. 93–115.

© Кабанова П.К., Картавцева И.А., 2014 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВСПЛЫТИИ МЕТАНОВЫХ ПУЗЫРЬКОВ

Кильдибаева С.Р.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Исследование дна Мирового океана указывает на непрерывные выбросы пузырьков метана [1], которые при поднятии в толще воды покрываются гидратной оболочкой [2]. Миграция пузырьков газа рассмотрена в работе [3].

Рассмотрим поврежденный преვენтор на дне океана, из которого с известным массовым расходом поступают пузырьки газа (M_g) и капли нефти (M_o). Термобарические условия способствуют образованию гидратной корки на поверхности пузырьков. Будем полагать, что все основные параметры течения системы, состоящей из частиц нефти, газа, воды и гидрата однородны по сечению.

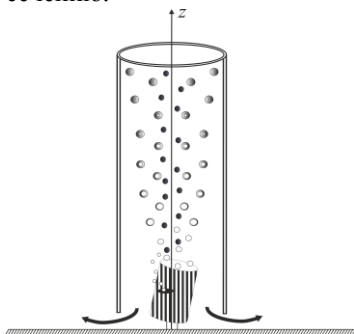


Рис.1 Схема миграции пузырьков газа и капель нефти в вертикальной цилиндрической трубке. Черным обозначены капли нефти, черным и белым – частицы гидрата

Существует два подхода к изучению процесса гидратообразования при подъеме частиц со дна океана. При первом подходе полагается, что интенсивность образования гидрата на поверхности пузырька лимитируется отводом тепла, при втором – рассматривается процесс диффузионного переноса.

В работе описана математическая модель поднятия капель нефти и пузырьков газа. Получены зависимости изменения радиуса газовой и гидратной составляющей гидратной частицы, скорости капель нефти и

гидратной частицы от вертикальной координаты. А также зависимость температуры воды и капель нефти внутри цилиндра от вертикальной координаты.

Литература

1. Sautera E.J. et al. Methane discharge from a deep-sea submarine mud volcano into the upper water column by gas hydrate-coated methane bubbles // Earth and Planetary Science Letters. 2006. № 243(3-4). pp. 354-365.

2. Gregor Rehder, Peter W. Brewer, Edward T. Peltzer, and Gernot Friederich. Enhanced lifetime of methane bubble streams within the deep ocean. Geophysical research letters, 2002, vol.29, no 15, p.1-4.

3. Кильдибаева С.Р. Моделирование процесса всплытия гидратных частиц в куполе. // Современные проблемы науки и образования. – 2014. – № 3; URL: <http://www.science-education.ru/117-13063> (дата обращения: 13.05.2014).

© Кильдибаева С.Р., 2014 г.

УДК 536.255

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ПЛАСТЕ И СКВАЖИНЕ ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Ибатуллина А.Ф

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Термометрия исторически является первым методом исследования скважин. Первые термические исследования были проведены российским ученым Д.В. Голубятниковым еще в 1909 г. В настоящее время термометрия широко применяется практически на всех стадиях жизни скважины и позволяет эффективно решать многие геолого-промысловые задачи. Однако, несмотря на достаточно широкое применение, в настоящее время интерпретация данных термометрии остается только на качественном уровне. Одной из причин такого положения дел является недостаточная теоретическая изученность температурных процессов в нефтегазонасыщенных пластах.

Имеются месторождения, где давление насыщения близко к пластовому и в пласте в окрестности добывающих скважин происходит разгазирование нефти. При освоении малодебитных скважин часто используют технологии вызова притока флюида из пласта, когда забойное давление в течение некоторого промежутка времени может оказываться ниже давления насыщения. В этих условиях важной задачей является построение и совершенствование математических моделей термогидродинамических

процессов в пласте с фазовыми переходами. Во многих случаях использование только сложных численных моделей на стадии планирования исследований и оперативной интерпретации неоправданно ввиду недостаточной информации о входных данных, что также затрудняет установление закономерностей, позволяющих определить необходимые подходы к методике работ и интерпретации результатов термогидродинамических исследований при освоении и эксплуатации скважин. Для этого необходимы и простые аналитические модели, учитывающие основные физические процессы. В связи с этим возникает необходимость разработки математических моделей для теоретического изучения вклада различных термодинамических эффектов в температурное поле в пласте, определения границ применимости аналитических моделей и совершенствования на их основе методики скважинных исследований и интерпретации данных.

Преимуществом ТГДИ является возможность определения параметров прискважинной зоны пласта, в частности, определения проницаемости и радиуса зоны нарушения.

Методы решения поставленных задач: теоретические исследования, численное моделирование с применением конечно-разностных методов, обобщение и анализ промысловых данных, сопоставление теоретических и промысловых данных.

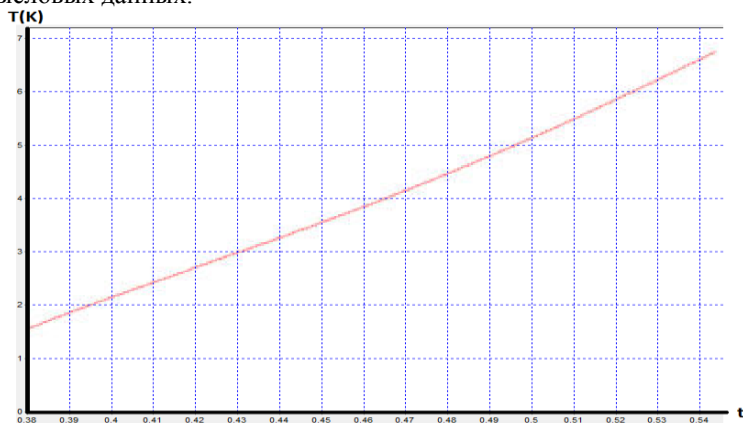


Рис. 1. Распространение тепла в заданной области пространства во времени

Термогидродинамические исследования переходных процессов позволяют определить ключевые параметры прискважинной зоны пласта.

Разработана математическая модель для количественной интерпретации данных ТГДИ в добывающих и нагнетательных скважинах (рис. 1).

Литература

1. Дьяконов Д. И., Леонтьев Е. И., Кузнецов Г. С. Общий курс геофизических исследований скважин - М., Недра, 1984 г.
2. Назаров В.Ф., Фойкин П.Т., Осипов А.М., Ершов А.М. Термометрия для контроля технического состояния нагнетательных скважин - Нефтяное хозяйство, № 111, 1987, – 55 с.
3. Валиуллин Р.А., Рамазанов А.Ш., Шарафутдинов Р.Ф Сорокина В.А. Ярославцева Л.А. Особенности термометрии при выделении нефтяных пластов эксплуатирующихся при забойном давлении ниже давления насыщения - Нефтяное хозяйство, №6, 1991, - 33-36 с.

© Ибатуллина А.Ф., 2014 г.

УДК 538.7

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭМУЛЬСИЮ

Зиннатуллин Р.Р., Амекачев Р.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последние годы воздействие электромагнитных полей на нефтяные системы в процессах добычи и транспортировки нефти привлекают большой интерес. Правильный выбор параметров воздействия электромагнитных полей на нефтяные системы должно привести к снижению их вязкости, их обезвоживанию и обессоливанию.

В работе исследовались особенности поведения эмульсионных капель ВЧ и СВЧ электромагнитных полях. В ВЧ области получены критические напряженности электромагнитного поля необходимые для коагуляции отдельных капель (рис. 1). В СВЧ области получены кривые изменения температуры внутри микронных капель с использованием флуоресцентной термометрии.

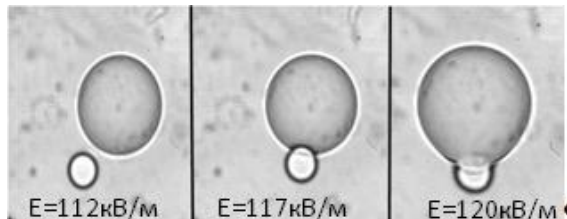


Рис. 1. Коагуляция капель в ВЧ электромагнитном поле

МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ

Сагадеева А.Д., Алдошина Н.Д., Яковлева И.Б.
МБОУ СОШ № 74, г. Уфа, Россия

В окружающем нас мире действуют различные силы. Это силы трения, тяжести, сопротивления воздуха, сила давления и другие силы природы. Но есть еще одна сила, на которую многие не обращают внимания. Это сила поверхностного натяжения. Существует ряд различных способов определения поверхностного натяжения жидкостей: капельный метод, метод капиллярного поднятия жидкостей, метод пульсирующих струй, метод наибольшего давления капли, метод отрыва твердого контура и т. д.

Одним из самых простых способов измерения поверхностного натяжения жидкостей, который использовался в данной исследовательской работе, является сталагмометрический метод.

Цель нашего исследования заключалась в определении поверхностного натяжения растворов гексана и SPAN-80. Для достижения цели проводились опыты с растворами различной концентрации. В работе использовался шприцевой насос системы Cole-Parmer.

Результаты экспериментов:

- а) определение постоянной в эксперименте с использованием гексана;
- б) описание объектов исследования (гексан, span-80);
- в) определение плотности гексана и span-80;
- г) приготовление растворов определенной концентрации;
- д) определение поверхностного натяжения растворов.

Актуальность исследования заключается в следующем:

1) Явление поверхностного натяжения входит в обязательный минимум содержания, определяемый ФГОС, но в настоящее время в программе школьного курса данная тема не изучается совсем, либо рассматривается только на факультативных занятиях ознакомительно.

2) Поверхностное натяжение является определяющим фактором многих технологических процессов: пропитки пористых материалов, нанесения покрытий, моющего действия, порошковой металлургии.

3) Сила поверхностного натяжения играет большую роль в организме человека.

Поэтому следующим этапом нашего эксперимента будет работа по исследованию силы поверхностного натяжения крови.

Литература

1. Абрамзон А.А. Поверхностно-активные вещества: Свойства и применение – 2-е изд., перераб. и доп. —Л.: Химия, 1981. — 304 с

© Сагадеева А.Д. и др., 2014 г.

**ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ДАННЫХ ЗАБОЙНОГО ДАВЛЕНИЯ В
ВЕРТИКАЛЬНЫХ ДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИНАХ С УЧЕТОМ
ЭФФЕКТОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В
НИЗКОПРОНИЦАЕМЫХ КОЛЛЕКТОРАХ**

Рабцевич Ю.А.¹, Давлетбаев А.Я.¹, Ивашенко Д.С.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²«РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Россия

Эффект нелинейной фильтрации, возникающий в низкопроницаемых коллекторах при малых градиентах давления, является объектом пристального внимания со стороны специалистов нефтяных компаний и научно-исследовательских институтов в России и за рубежом. Этот эффект связан с наличием режимов течения, не подчиняющихся закону Дарси, и подтвержден в ходе лабораторных экспериментов на образцах керна.

Результаты лабораторных экспериментов легли в основу численной модели нелинейной фильтрации, представляющей собой кусочно-линейную аппроксимацию зависимости скорости фильтрации от градиента давления. В настоящей работе данная численная модель, внедренная в разработанный специалистами ООО «РН-УфаНИПИнефть» гидродинамический симулятор «РН-КИМ», применялась для проведения вычислительных экспериментов, основными целями которых являлись: моделирование полей давления и интерпретация данных скважинной телеметрии с учетом эффекта нелинейной фильтрации.

Результаты вычислительных экспериментов позволили разработать методику решения задачи интерпретации кривых прослеживания забойного давления для определения фильтрационно-емкостных свойств коллекторов с учетом эффекта нелинейной фильтрации. Развитие данного направления позволит выявить и изучить особенности фильтрации в низкопроницаемых коллекторах и предложить новые подходы к разработке месторождений, содержащих такие коллекторы.

В работе на примере нескольких скважин с месторождений ОАО «НК «Роснефть» приведены результаты моделирования кривых давления с учетом нелинейной фильтрации, анализа чувствительности численной модели к изменениям входных параметров, представлены результаты интерпретации промысловых данных.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СХОДА СНЕЖНОЙ ЛАВИНЫ С УЧЕТОМ ПРОФИЛЯ СКЛОНА

Лысова Ю.С.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Снег – одно из самых широко распространенных явлений природы, активно воздействующее на общество и экономику во многих уголках мира. Признавая красоту снежного покрова и его полезность, все чаще приходится рассматривать снег как нежелательную и дорогостоящую помеху. Затруднения, связанные со снегом, принимаются как непреложный фактор среды обитания человека. Особую опасность в этой связи представляют снежные лавины. В высокогорных районах лавины ежегодно наносят значительный материальный ущерб народному хозяйству и нередко уносят человеческие жизни.

В данной работе рассматривается математическая модель, сходная с предложенной в [1] и позволяющая описать процесс схода снежной лавины. Лавина рассматривается как единая компактная снежная масса, движущаяся вниз по наклонной плоскости в предположении, что абсолютная скорость снежных масс, присоединяющихся к лавине, равна нулю. На основании модели разработана программа, позволяющая моделировать процесс схода лавины по горному склону, причем форму склона можно достаточно удобно задавать в графическом режиме с помощью специальных инструментов. Возможна коррекция формы склона.

На основе проведенных исследований можно сделать вывод о том, на каких расстояниях от склона можно безопасно размещать населенные пункты. Для параметров схода в данной работе это расстояние составляет 1-2 км. Результаты расчетов на основании построенной модели достаточно хорошо согласуются с практическими данными, полученными в результате наблюдений сходов снежных лавин.

Рассмотренная модель может найти практическое применение в службе предупреждения схода лавин и сельском хозяйстве.

Литература

1. Жекамухов М.К., Жекамухова И.М. Сход снежных лавин и возникновение воздушных ударных волн/ Электронный журнал «Исследовано в России», 2003.

2. Соловьев А.С., Калач А.В. Некоторые аспекты прогнозирования схода снежных лавин // Технологии техносферной безопасности. Вып. № 1 (35). 2011. – с. 1-5.

© Лысова Ю.С., 2014 г.

ДИНАМИКА АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ТРУБАХ, ЗАПОЛНЕННЫХ ЖИДКОСТЬЮ, С ПОДАТЛИВЫМИ СТЕНКАМИ

Зайнетдинов Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Движение жидкости по трубкам с тонкими эластичными стенками представляет собой интересную и довольно сложную физическую задачу. В работе были рассмотрены связи характера потока жидкости с изменяющейся геометрией эластичной трубки и роли нелинейности уравнений гидродинамики при течении жидкости по эластичным трубкам.

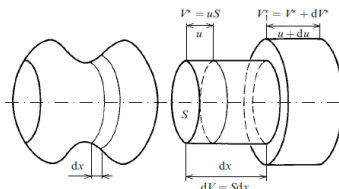


Рис. 1. Деформация элемента объема эластичной трубки dV при перемещении жидкости вдоль нее.

Изменение площади поперечного сечения трубопровода имеет вид [1]:

$$S = S_0 \left[1 + \frac{2a_0}{Eh} (P_l - P_{l_0}) \right] \quad (1)$$

Тогда уравнение газовой динамики для трубки с податливыми стенками может быть записана в следующем виде [2]:

$$\frac{dP_l}{dt} = - \frac{C^2 \rho (Eh + 2a_0 (P_l - P_{l_0}))}{(Eh + 2a_0 (P_l - P_{l_0}) + 2\rho C^2)} * \frac{\partial x}{\partial x_0} \frac{\partial \vartheta}{\partial x_0} \quad (2)$$

Закключение. В работе представлено течение жидкости по трубкам с тонкими эластичными стенками, которое позволяет объяснить некоторые известные физиологические явления: возникновение высокочастотных колебаний в сосудах, особенности распространения пульсовой волны и др.

Литература

1. Педли Т. Гидродинамика крупных кровеносных сосудов. — М.: Мир, 1983
2. Тарасевич Ю.Ю. Моделирование волн и гидродинамических течений в биологических жидкостях. — Астрахань, 2011

© Зайнетдинов Р.Р., 2014 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ДВИЖУЩИХСЯ СЛОИСТО-ОДНОРОДНЫХ СРЕД ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Садыкова Л.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Моделируется нагрев микроволновым электромагнитным излучением движущейся двухслойной среды с различными диэлектрическими свойствами на примере поршневого вытеснения одной жидкости другой в пористой среде. Распределение температуры в слоях описывается уравнениями

$$\lambda_i \frac{\partial^2 T_i}{\partial x^2} - c_{fi} v \frac{\partial T_i}{\partial x} + Q_i = c_i \frac{\partial T_i}{\partial t},$$

где T - температура, λ_i, c_i - усредненные по объему теплопроводности и теплоемкости насыщенной пористой среды, c_{fi} - объемные теплоемкости флюидов, v - скорость фильтрации жидкости, индексы $i=1,2$ – относятся к вытесняемой и нагнетаемой жидкостям. Интенсивность тепловых источников Q_i за счет поглощения плоских электромагнитных волн определяется выражением

$$Q_i = -\frac{\partial S_i}{\partial x} \quad \text{где} \quad S_i = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(E_i H_i^*)$$

где E_i и H_i^* - напряженности электрического и магнитного полей.

На основе аналитического решения уравнения теплопроводности установлено, что между длиной λ_T , частой ω_T и фазовой скоростью (λ_e, ω, v_e) ЭМВ, скоростью движения среды v , длиной, частотой и скоростью температурных волн имеют место соотношения:

$$\lambda_T = \frac{\lambda_e}{2}, \quad \omega_T = \omega \frac{v}{v_e}, \quad v_T = \frac{v}{2}.$$

Получено, что при интерференции падающей и отраженной волн в поглощающем слое образуется осциллирующее по координате и времени температурное поле в виде бегущих волн. Температура в целом с увеличением координаты убывает, но «осцилляционная часть температуры», обусловленная диссипацией интерференционного потока энергии имеет постоянную амплитуду. Пространственная периодичность температуры определяется волновым числом β , по времени температурное поле оказывается частотно-модулированным[1].

Литература

1. И.Л. Хабибуллин. Электромагнитная термогидромеханика поляризующихся сред. / Уфа, Из-во БашГУ, 2000г., С. 65

© Садыкова Л. А., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИНАМИКУ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В FeVO_3 И YFeO_3

Адамова М.Е., Жуков Е.А., Каминский А.В., Комина О.Ю., Щербаков Ю.И.
Тихоокеанский государственный университет

В настоящей работе экспериментально исследована динамика ДГ в слабых ферромагнетиках ортоферрите иттрия и борате железа в присутствии постоянного магнитного поля. На рис. 1 представлены зависимости скорости ДГ v от продвигающего переменного магнитного поля H_m в присутствии постоянного магнитного поля H для FeVO_3 при $f = 9$ кГц при $H = 0$ (\bullet) и с магнитным полем $H \approx 4$ Э, приложенным параллельно (\blacktriangle) и перпендикулярно (\circ) плоскости образца (рис. 1. а), и для YFeO_3 при $f = 200$ Гц при $H = 0$ (\blacklozenge) и в присутствии постоянного магнитного поля $H = 300$ Э (\blacktriangle), (рис. 1. б).

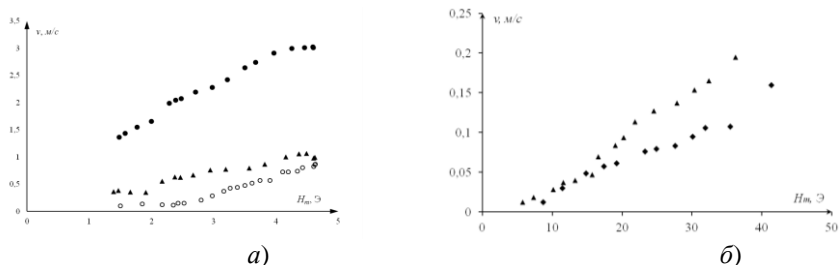


Рис. 1. Зависимость $v(H_m)$ для FeVO_3 (а) и для YFeO_3 (б)

Из рис. 1 видно значительное уменьшение скорости ДГ в образце FeVO_3 в присутствии постоянного поля H , причем сильнее в случае перпендикулярного направления поля. Обратная зависимость для YFeO_3 , на небольших частотах (до 35 кГц) амплитуда колебаний и скорость ДГ увеличивается, при больших же значениях частоты влияние его значительно уменьшается и практически не заметно. Также замечено, что большие поля стабилизируют доменную структуру в обоих образцах.

Литература

1. Adamova M.E., Zhukov E.A., Kaminsky A.V., Komina O.Yu., Kuzmenko A.P., Shcherbakov Yu.I. Dynamics of Domain Walls in Iron Borate and Yttrium Orthoferrite in Alternating and Constant Magnetic Fields // Journal of nano- and electronic physics. – Vol. 6 - No 3 - 03053(2pp) (2014).

ОСОБЕННОСТИ УСТАНОВЛЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ

Назмутдинов А.Ф.¹, Назмутдинов Ас.Ф.²

¹ООО «Газпромнефть- НТС», г. Санкт-Петербург; Россия

²Московский государственный университет, г. Москва, Россия

В работе рассматривается модель замкнутой теплоизолированной емкости постоянного объема. В емкости находится жидкий пропан и вода. Исследуется процесс перехода к равновесию. При этом жидкости считаются несжимаемыми.

Данный процесс описывается уравнением теплового баланса:

$$\dot{m}_l r_l + \dot{m}_w r_w + m_l c_{pl} \frac{dT}{dt} + m_g c_{vg} \frac{dT}{dt} + m_v c_{vw} \frac{dT}{dt} + m_w c_{pw} \frac{dT}{dt} = 0,$$

где $\dot{m}_j = -\frac{dm_j}{dt}$ - скорость испарения j -го вещества, r_j - удельная теплота

парообразования, c_{vj} - теплоемкость j -го газа при постоянном объеме, c_{pj} - теплоемкость j -й жидкости при постоянном давлении.

Скорости испарения даются выражением $\dot{m}_j = \alpha_j (p_j^* - p_j)$, где $\alpha_j = \text{const}$, p_j^* - давление насыщенных паров, p_j - парциальное давление газа для вещества j . Также используется уравнение состояния газа, закон Дальтона, формулы для давления насыщенных паров пропана и воды.

Исследована скорость выхода на стационарное значение в зависимости от исходных параметров.

Литература

1. Reid R., Prausnitz J., Sherwood T. The Properties of Gases and Liquids. 1982.
2. World Meteorological Organization. Guide to Meteorological Instruments and Methods of Observation. 2008.
3. Назмутдинов А.Ф., Назмутдинов А.Ф. Установление термодинамического равновесия в замкнутом объеме. ВНКСФ-20, г. Екатеринбург-Ижевск, изд. АСФ, 2014, с.207-208.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДсорбЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Замула Ю.С., Мавлетов М.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Обычно величина адсорбции определяется по измерениям концентрации раствора, который является макроскопическим параметром. Современные экспериментальные методы позволяют исследовать адсорбцию на микроуровне уровне. Одним из них является метод сканирования поверхности с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Было проведено две серии экспериментальных исследований: 1) формирования агрегатов ПАВ в результате адсорбции из раствора на чистой подложке; 2) создание на подложке остаточного нефтяного слоя и его отмыв с помощью ПАВ. В качестве подложек были выбраны: естественный керн, слюда и стекло. Сканирование осуществлялось с помощью атомно-силового микроскопа Agilent 5500. Размер области сканирования составлял 10x10 мкм с разрешением 512x512 точек, режим – полуконтактный (ACAFM). Из полученных изображений поверхности строятся графики в виде распределения высоты ее точек в заданном диапазоне от минимального уровня, которые позволяют определить среднюю толщину адсорбционного слоя на отсканированной поверхности, а профиль поверхности на котором видно изменение высот на подложке, и трехмерное изображение для удобства восприятия топографии образца.

Для многих задач достаточно представления о равномерном адсорбционном слое. Однако структура, определяемая при сканировании с помощью АСМ, является сильно неоднородной. Ввиду конструктивных особенностей прибора часть адсорбционного слоя (между подложкой и самой глубокой исследованной впадиной) остается «невидимой» для зонда. Для определения его толщины была разработана новая методика, суть которой состоит в «процарапывании» адсорбционного слоя с последующим извлечением профиля сечения поверхности с помощью АСМ сканирования.

Было оценено количество адсорбированного ПАВ на различных подложках. На основе полученных результатов получены оценки эффективности вытеснения нефти из пористой среды с использованием модели фиктивного грунта.

ИССЛЕДОВАНИЕ АСФАЛЬТЕНОВЫХ ПЛЕНОК И КАПЕЛЬ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА

Замула Ю.С., Камалтдинов И.М., Мавлетов М.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Асфальтены рассматриваются большинством исследователей как амфифильные соединения ответственные за высокую устойчивость эмульсий вода в нефти, в основном из-за их возможности формировать устойчивые образования на межфазной поверхности.

Для получения изображений поверхности с высоким разрешением, а также для определения упругих свойств асфальтовых пленок и капель эмульсии использовался атомно-силовой микроскоп (АСМ). Вдавливание кантилевера АСМ в мягкий или твердый образец моделировались с использованием контактной механики Герца. Модуль упругости Юнга был рассчитан из полученных кривых силовой спектроскопии. В данной работе асфальтовая пленка создавалась равномерным нанесением раствора на подложку с помощью спин-коатера. Для создания отдельных приготовленная асфальтовая эмульсия многократно промывалась гептаном, эта процедура также позволила снизить влияние мелких капель на получаемые данные.

Модуль Юнга для асфальтовой пленки составил $23,7 \pm 0,8$ МПа, погрешность в вычислениях при этом равна 4%. А для капли размером порядка 50 мкм составил около 30 кПа. Также полученные результаты показали, что модуль Юнга уменьшается с увеличением размера капель.

Экспериментально найденные значения модуля Юнга были использованы для оценки сопротивления разрыва капель эмульсии вода в нефти в рамках теории Barthes Biesel & Sgaier для линейных вязкоупругих мембран. Для случая капли, покрытой твердой оболочкой, модуль Юнга должен быть больше диапазона 78-890 МПа.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки России (11.G34.31.0040).

Литература

1. S. Strasser, A. Zink, G. Kada, Age determination of blood spots in forensic medicine by force spectroscopy. *Forensic Sci. Int.* 170 (2007) 8–14
2. Barthes-Biesel & Sgaier. Role of membrane viscosity in the orientation and deformation of a spherical capsule suspended in simple shear flow. *J. Fluid Mech.* (1985) 160, 119-135.

© Замула Ю.С., 2014 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ВОДЫ С ОСАДКООБРАЗУЮЩИМ РЕАГЕНТОМ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Юлмухаметова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основные методы воздействия на продуктивные пласты, направленные на увеличение нефтеотдачи, основываются на искусственном заводнении коллекторов. В неоднородных пластах нагнетаемая вода прорывается к добывающим скважинам по высокопроницаемым пропласткам, оставляя невытесненной нефть в малопроницаемых участках. Одним из главных условий дальнейшего повышения эффективности заводнения залежей является ограничение движения воды по каналам с низким фильтрационным сопротивлением, что позволяет более рационально использовать ее энергию для вытеснения нефти.

Целью данной работы является исследование фильтрации воды с содержанием осадкообразующего реагента в пористой среде. Рассматривается пористая среда, с пористостью ϕ , насыщенная водой, в которую осуществляется нагнетание воды с заданным содержанием осадкообразующего реагента (C_0). Скорость нагнетания постоянная (V_0). По мере фильтрации осадок выпадает в пористой среде и переходит в неподвижное состояние, заполняя некоторую часть порового пространства. В первом случае считается, что скорость выпадения реагента в осадок постоянна ($J=J_0$), во втором случае реагент выпадает в осадок по закону Генри ($J=\gamma C$). В общем случае математическая модель включает уравнения сохранения массы воды и осадкообразующего реагента и уравнения движения в виде обобщенного закона Дарси в дифференциальной форме.

Выявлено, что с увеличением скорости осадкообразования уменьшается расстояние, преодолеваемое реагентом до полного выпадения в осадок. В случае переменной скорости осадкообразования расстояние увеличивается в 10 раз, при условии, что при начальной концентрации реагента эти скорости совпадали

Литература

1. Идрисова Г.Р., Ковалева Л.А., Мавлетов М.В., Мусин А.А. Математическое моделирование двухфазной фильтрации в обводненном пласте с осадкообразованием // Изв. РАН. МЖГ. 2011.

© Юлмухаметова Р.Р., 2014 г.

УДК 538.7

**ВЛИЯНИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ЗАКАЧКИ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ
ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН НА
ДОБЫЧУ ДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИН В НИЗКОПРОНИЦАЕМЫХ
КОЛЛЕКТОРАХ**

Валева Э.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время в разработку широко вовлекаются трудноизвлекаемые запасы нефти, приуроченные к низкопроницаемым, слабодренлируемым коллекторам. При это осуществляется заводнение при высоких давлениях закачки, имеет рост техногенных трещин автоГРП и нагнетательных скважинах и обводнение окружающих добывающих скважин. В нагнетательных скважинах периодически проводятся гидродинамические исследования методом регистрации индикаторных диаграмм, которые позволяют определить пластовое давление, давление смыкания трещин и коэффициент приемистости при давлениях выше и ниже давления смыкания трещин. При проведении режимы работы нагнетательных скважин изменяются путем смены проходного сечения штуцера на устье скважины.

Анализ промысловых данных показал, что при проведении исследований в ряде окружающих добывающих скважин, которые преимущественно находятся вдоль региональных стрессов существенно меняется дебиты жидкости и обводненность добываемой продукции. При этом отмечается, что с уменьшением обводненности происходит увеличение дебита нефти. По результатам работы подготовлены предложения по ограничению закачки в нагнетательных скважинах.

Литература

1. Уиллхайд Г.П. Заводнение пластов.-М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009.-788с.
2. .Д. Голф-Рахт. Основы нефтепромысловой геологии и разработки трещиноватых коллекторов.-М.:Недра, 1986.- 608с.

© Валева Э.З., 2014 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В ЖИДКОСТИ,
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КОТОРОЙ ЗАВИСИТ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ**

Мирошниченко В.Ю. Бухмастова С.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Переработка нефтешлама на сегодняшний день является актуальной задачей для окружающей среды. Его состав и физические свойства могут меняться в зависимости от вида образования. Важным фактором является то, что все нефтешламы содержат как воду, так и твёрдые примеси. Очень часто они образуют стойкую, не расслаивающуюся, эмульсию. Это затрудняет процесс разделения и большинство методов, которыми перерабатываются нефтешламы, не справляются полностью с поставленной задачей. За счет очень высокой вязкости их тяжело разделить, а значит основной задачей является уменьшение их вязкости. Это достигается путем теплового воздействия на углеводородную жидкость, вязкость и теплопроводность которой зависит от температуры. В лабораторных условиях такой нагрев возможно осуществить с помощью индукционного нагревателя [1]. В работе приведены результаты математического моделирования процесса переноса тепла в нефтешламе, теплопроводность которого зависит от температуры.

Математическая модель включает в себя уравнение теплопроводности:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right)$$

С коэффициентом теплопроводности, зависящим от температуры:

$$k = k_0 + b(T - T_0)$$

где T_0 - начальная температура; k_0 - коэффициент теплопроводности при температуре; T_0 , b - температурный коэффициент теплопроводности.

На границах задаются граничные условия первого рода. Задача решается численно, методом контрольного объема по неявной схеме [2]. Исследуется влияние температурного коэффициента теплопроводности на процесс переноса тепла в жидкости.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (государственное задание № 3.1251.2014/К).

Литература

1. Ковалева Л.А., Мусин А. А., Киреев В.Н. Моделирование процессов тепло- и массопереноса в углеводородной жидкости при индукционном нагреве // ПМТФ. 2009. Т. 50, № 1. С. 95-100.

2. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости // Москва. Энергоатомиздат. 1984. 122 с.

УДК 534

ИССЛЕДОВАНИЕ И АНАЛИЗ ФОРМЫ ВОЗМУЩЕНИЙ ВОЗДУШНОГО ПУЗЫРЬКА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ПОЛЯ ВБЛИЗИ СТЕНКИ

Альмухаметова А.Р., Саметов С.П.

Башкирский государственный университет, Центр микро-и наномасштабной динамики дисперсных систем, г. Уфа, Россия

Мощное звуковое поле в жидкости порождает маленькие парогазовые пузырьки, которые под действием этого поля могут расти, захлопываться и вызывать такие эффекты, как химические реакции, эрозия, звуколюминесценция и т.д. Эти эффекты характеризуют физическое явление, называемое акустической кавитацией[1]. В работе исследован характер колебаний поверхности пузырька под действием ультразвукового поля, измерена амплитуда акустического поля вблизи стенки, проведен анализ Фурье по полученному сигналу. С помощью высокоскоростной видеосъемки обнаружены колебания поверхности пузырька размером около 100–150 мкм при резонансной частоте 85,7 кГц и различных амплитудах давления 3–11 кПа. В результате обнаружены три режима, 1) пузырек совершает радиальные колебания, 2) возмущения на поверхности становятся более активными, появляются моды 3) возмущения становятся хаотическими, пузырек начинает двигаться. Результаты представлены в виде фотографий процесса колебаний воздушного пузырька в дистиллированной воде.

Результаты, а именно, характер поведения пузырька в процессе воздействия, получают сравнение с результатами численного моделирования лаборатории центра «Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем». В дальнейшем планируется исследовать влияние колебаний под ультразвуковым воздействием на угол смачивания пузырька вблизи стенки, что может найти применение в исследованиях очистки поверхностей с помощью осциллирующих пузырьков газа.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки Российской Федерации (11.G34.31.0040).

Литература

[1] Красильников В.А., Крылов В.В. Введение в физическую акустику. 1984 год. 403 с.

**ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕФТИ НА ДИНАМИКУ ТЕМПЕРАТУРЫ
В ПРОЦЕССЕ ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ**

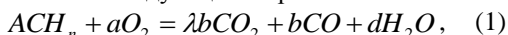
Сельтикова Е.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Во всем мире с каждым годом возрастает интерес к методам повышения нефтеотдачи пластов, и развиваются исследования, направленные на поиск научно - обоснованного подхода к выбору наиболее эффективных технологий разработки месторождений.

Метод извлечения нефти с помощью внутрипластового горения основан на способности углеводородов в пласте вступать с кислородом, содержащемся в составе воздуха в окислительную реакцию, сопровождающуюся выделением большого количества теплоты. Генерирование теплоты непосредственно в пласте – основное преимущество данного метода. Горение обычно инициируется с помощью специального оборудования, позволяющего создать в призабойной зоне необходимый температурный уровень; в дальнейшем процесс протекает в автономном режиме при постоянной подаче воздуха в одну или несколько скважин.

Как правило, в процессе внутрипластового горения участвуют тяжелые фракции нефти, превратившиеся в углеводородный остаток. Химическую формулу горения остатка можно записать следующим образом:



где A , a , b , d – численные коэффициенты химических реакций; n – отношение числа атомов водорода Н к числу атомов углерода С в углеводородном остатке; λ – отношение числа молей CO_2 к числу молей CO в продуктах горения.

В работе на основе формулы (1) рассчитывается количество нагнетаемого кислорода, необходимого для сжигания 1 кг углеводородного остатка, также делается количественная оценка образования продуктов горения в пласте в процессе внутрипластового горения. Теплотворная способность топлива рассчитывается по формуле Менделеева. На основании расчетов определяется теоретическая температура горения. Не менее важными характеристиками процесса горения являются скорость окислительной реакции, скорость выделения тепла в единице объема пласта. В работе рассмотрены типичные значения этих характеристик, с использованием которых оценивается динамика изменения температуры в процессе внутрипластового горения в зависимости от физико-химических характеристик нефти. Для решения поставленных задач был создан программный инструментарий, состоящий из модуля для расчета

характеристик нефти по его составу и вычислительного модуля для динамики температуры в процессе внутрислоевого горения, который основывается на решении уравнения переноса тепла.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования и науки Российской Федерации (11.G34.31.0040).

Литература

1. Бурже Ж., Сурио П., Комбарну М. // Термические методы повышения нефтеотдачи пластов. Пер. с франц. М.: Недра. 1989. 422 с.
2. Желтов Ю. П. // Разработка нефтяных месторождений: Учебник для вузов.-М.: Недра. 1986. 332 с.
3. Басниев К. С. // Подземная гидромеханика. Учебник для вузов. – М.: Недра, 1993. 416 с.
4. Патанкар С. // Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Пер. с англ. М.:Энергоатомиздат. 1984. 152 с.

© Сельтикова Е.В., 2014 г.

УДК 534-143

МОДЕЛИРОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ДЛЯ ЧИСТОЙ ЖИДКОСТИ: СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Гильманова Г.И.

Центр «Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем»,
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Интерес к акустической кавитации связан с сопровождающими её физическими и химическими эффектами, такими как эрозия (механическое повреждение поверхности), шум, управление химическими реакциями и т.п. В работе [1] показано, что при воздействии акустического поля пузырьки образуют различные структуры. Это явление получило название самоорганизация. В работе [2] показано численное исследование явления самоорганизации.

На данном этапе решения задачи о самоорганизации, реализован решатель для трехмерного уравнения Гельмгольца в кубе для чистой жидкости. Рассматривается коробка с внутренними размерами $30 \times 30 \times 30 \text{ мм}^3$, сделанная из акрила с толщиной стенок 5 мм и наполненная водой на высоте 20 мм, который обеспечивает высоту 22 мм. К нижней части коробки крепится дискообразный акустический преобразователь с радиусом 14 мм. Вычислительная область упрощается до размеров $40 \times 40 \times 27 \text{ мм}^3$. Акустический преобразователь расположен на высоте $z = -5 \text{ мм}$. Координата $z = 0$ соответствует нижнему уровню воды. В расчетах,

свойства акрила и воды предполагаются одинаковыми, что определяет выбор расчетной области (в том числе частью коробки над уровнем воды можно пренебречь). Результаты моделирования согласуются с экспериментальными данными. Автор выражает благодарность профессору Университета штата Мэриленд, д.ф.-м.н. Н.А. Гумерову и профессору Университета штата Северная Дакота, д.ф.-м.н. И.Ш. Ахатову за руководство данной работой, выполненной в Центре «Микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем» при Башкирском Государственном Университете, к.ф.-м.н. С.П.Саметову за проведение эксперимента.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов Министерства образования и науки РФ (11.G34.31.0040) и РФФИ «мол_а» (№14-01-31369).

Литература

[1] U. Parlitz, R. Mettin, S. Luther, I. Akhatov, M. Voss, and W. Lauterborn, Spatiotemporal dynamics of acoustic cavitation bubble clouds//Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 357, 313-334 (1999).

[2] N.A. Gumerov, On self-organization of voids in acoustic cavitation //Third International Conference on Multiphase Flow, ICMF'98, Lyon, France, June 8-12, 1998

[3] N.A. Gumerov, I.S. Akhatov, Claus-Dieter Ohl, S.P. Sametov, and other. Waves of Acoustically Induced Transparency in Bubbly Liquids: Theoretical Prediction and Experimental Validation //Proceedings of ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress Exposition, IMECE2013, 2013.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ»

УДК 372.853

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНИМАЦИИ ПРИ ДЕМОНСТРАЦИИ ФИЗИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Нигаматуллина А.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

При преподавании физики большую роль в обеспечении корректного понимания изучаемого материала обеспечивают правильно подобранные наглядные демонстрации. С развитием информационных и коммуникационных технологий возможности выбора требуемой демонстрации выросли на порядки. По этой причине использование корректных компьютерных анимаций является актуальной проблемой преподавания физики.

В исследовании рассматривается проблема разработки анимаций ряда типовых физических явлений и процессов в среде Delphi. Вопрос создания простых анимаций не является особо сложной задачей. Задача разработки корректных анимаций находится на стыке физики, методики преподавания физики и программирования.

В ходе проведения исследования проанализированы основные физические модели, встречающиеся в курсе школьного курса физики, выделены основные моменты и представлена упорядоченная система простых моделей по различным разделам физики. Большая часть моделей представлена в 2D. Это связано с тем, что в 3D представлении описание самих объектов, их динамики и взаимодействия между собой не всегда принципиально визуализируема, особенно в тех случаях, когда размеры и форма объектов имеют значение при описании проблемы или изложении материала. Примером может служить построение потенциальных полей от системы движущихся зарядов.

При проведении исследования представлена наглядная структура физических моделей по увеличению сложности. Сделан ряд предпосылок для двойственного описания многообъектных моделей при помощи комбинированного статистического и феноменологического представления.

Литература

2. Мозговой М.В. Занимательное программирование: Самоучитель.– Спб.:Питер, 2005–208с.

© Нигаматуллина А.Ф., 2014 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСШИРЕНИЙ CMS JOOMLA ПРИ ПОДГОТОВКЕ К УРОКУ ИНФОРМАТИКИ

Чугунов В.К.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

При преподавании информатики требуется использование достаточно большого количества информации по различным направлениям. Для самостоятельной работы учеников за компьютером удобно использовать готовые небольшие сайты, установленные в локальной сети. Это помогает избежать использования выхода в интернет, заблокированный жестким фильтром. Наличие возможности оперативного добавления различных расширений позволяет сформировать достаточно гибкую платформу, ориентированную на различные типы уроков, начиная от изучения нового материала до контроля. По этой причине использование небольших сайтов на основе CMS Joomla является актуальной проблемой преподавания уроков информатики.

В работе рассмотрены основные возможности CMS Joomla, представлена структурированная табличная схема основных типов расширений, которые разработаны для работы с Joomla. Гибкая и удобная система администрирования и управления БД позволяет подобрать необходимые расширения и использовать их по мере надобности.

Первичный анализ типов расширений позволил выделить более 30 групп расширений, начиная от тех, которые обеспечивают безопасность до игр и популярных в настоящее время социальных сетей. В каждой группе в свою очередь выделяются подгруппы, имеющие более узкое направление. Несмотря на то, что большая часть из предложенных расширений не может быть использована напрямую, существует возможность включения некоторых расширений без переработки. Сюда можно включить такие расширения, например, как инструменты поиска, языковые словари, производительность сайтов, видеоконференции, мультимедийные расширения, обмен контентом, калькуляторы, построители графиков и прочее.

Использование WYSIWYG редакторов позволяет изучать основы дизайна сайтов.

При проведении исследования представлена наглядная структура расширений (модулей, компонентов). Представлена оригинальная схема концепции расширений с точки зрения методики преподавания.

Литература

1. Григорьев С.Г. Информатизация образования: фундаментальные основы. Томск: ТМЛ-Пресс, 2008. - 90 с.

© Чугунов В.К., 2014 г.

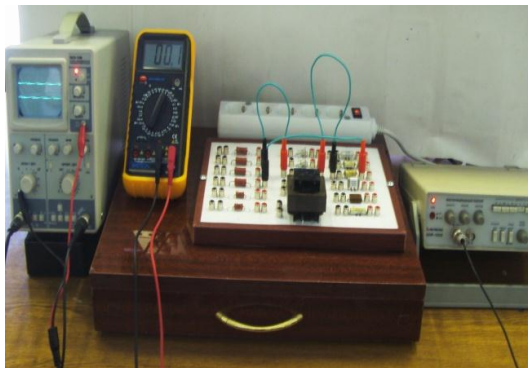
УДК 53

УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ СТЕНД ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЗАКОНОВ ЭЛЕКТРОТЕХНИКИ

Гафуров И.Г., Сарваров Р.Т.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для закрепления полученных теоретических знаний и для более глубокого понимания законов физики необходимо проведение лекционных демонстраций и лабораторных работ. Предлагается стенд с компактным набором радиоэлементов, соединяя которые можно получить необходимые схемы.



На рисунке приведен снимок стенда. Стенд состоит из набора резисторов, конденсаторов, диодов и трансформатора. Для наглядности у каждого элемента нарисовано его условное обозначение. В качестве измерительного блока используется серийно выпускаемый

мультиметр МУ63. Выводы элементов припаяны к универсальным гнездам. Сборка нужной схемы производится с помощью прилагаемых штекеров. Применение цифрового мультиметра, цветных разъемов и штекеров, разноцветных проводов делает стенд наглядным и современным. На данном стенде можно выполнить работы по изучению закона Ома для участка цепи, по изучению устройства и работы трансформатора, по изучению однополупериодного и двухполупериодного выпрямителя, законов Кирхгофа. Собирая колебательный контур, можно изучать затухающие колебания и явления резонанса в параллельной и последовательной цепи. К имеющемуся стенду предлагается добавить переменные резистор и конденсатор, т.к. имеющиеся номиналы радиоэлементов могут не иметь необходимых значений. Чтобы увеличить универсальность и расширить возможности стенда предлагается усилить макетной платой для сборки схем из дополнительных радиоэлементов меньшей мощности. Сравнительно низкая стоимость позволяет приобретать комплект стендов для разных образовательных учреждений, а большое количество лабораторных работ дает возможность выполнения заданий фронтальным способом.

СЕКЦИЯ «МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 616.3

ПРИЧИНЫ НАРУШЕНИЯ ЦЕЛОСТНОСТИ ЗУБОВ

Муратшина Д.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Зубы — образования, состоящие, в основном, из твердых тканей, предназначены для первичной механической обработки пищи

У зубов причин разрушения эмали несколько. Ее формирование у плода начинается во втором триместре беременности. Если женщина неправильно питалась, и в организм ребенка не поступало достаточного количества минеральных веществ, необходимых для правильного развития зубов, у него будет слабая эмаль. Некоторые виды бактерий, живущие в ротовой полости, питаются глюкозой, источником которой становится сладкая и мучная пища. При этом они вырабатывают кислоты повреждающие эмаль, что со временем приводит к развитию эрозии. Развивается гипоплазия эмали молочных зубов – ее недоразвитость, которая требует профессионального лечения. Некачественная чистка зубов провоцирует проблему, что зубной налет превращается в камень, развивается кариес. Если в некоторых местах зуба потемнела эмаль или появились пятна белого цвета – это начальная стадия заболевания. Тогда требуется лечение зубов и эмали. Стирается эмаль при постоянном пользовании зубной щеткой с жесткой щетиной, неправильном прикусе, ошибках в протезировании зубов. Еще одной причиной повреждения эмали является бруксизм или скрежетание зубами. Заболевание обостряется во сне, когда контроль над мышцами ослаблен. Со временем постоянная нагрузка на зубы приводит к истиранию эмали. Помочь в данном случае может ношение специальной каппы и различные методики по снятию стресса. Постоянное употребление продуктов, которые нарушают нормальный кислотно-щелочной баланс во рту, таких, как сладости, фруктовые газированные напитки, цитрусовые, оказывает отрицательное воздействие на ослабленные зубы, уменьшается толщина эмали, что приводит к ее повреждению. В дыме от сигарет огромное количество активных вредных для зубов веществ, которые оказывают разрушительное воздействие на состав эмали. Появляющаяся у курильщиков желтая эмаль – никотиновый налет, нарушающий структуру зуба. К истончению хрупкой эмали может привести и слишком частое неконтролируемое самостоятельное отбеливание зубов с помощью химических веществ. Возможны и механические повреждения зубов, которые могут привести к тому, что эмаль откололась или появилась трещина. Вредные привычки грызть зубами карандаши, другие твердые предметы, щелкать семечки, орехи, также могут быть причиной повреждений, эмаль трескается, нарушается ее целостность.

ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННАЯ ТОМОГРАФИЯ

Гаймалова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Методика ПЭТ отображения является комбинацией двух изобретений, представленных к Нобелевской премии – радиоактивного индикатора и принципов томографии.

Любое ПЭТ исследование состоит из нескольких основных этапов:

1. производство радиоизотопа;
2. маркировка выбранного состава испускающим позитроны радионуклидом и подготовка состава в форме, пригодной для воздействия на людей;
3. транспортировка состава из лаборатории к месту проведения исследования;
4. воздействие радиоактивного индикатора и получение данных ПЭТ;
5. отображение распределения активности позитрона как функции времени, обработка данных;
6. интерпретация результата.

Система производства радиоизотопов состоит из трех основных частей:

- циклотрона (ускорителя частиц);
- биологического синтезатора, присоединяющего радиоизотопы к биологическим молекулам;
- компьютера, контролирующего процесс.

До начала исследования в циклотроне производится радиоактивное вещество, входящее в естественный химический состав тела (атомы кислорода, углерода, азота) и распадающееся с испусканием позитронов.

Радиоизотопы, используемые в ПЭТ

Изотоп	Период полураспада, мин	Средняя кинетическая энергия, мэВ
¹¹ C	20,4	0,385
¹³ N	10,0	0,491
¹⁵ O	2,0	0,735
¹⁸ F	109,8	0,242
⁶⁸ Ga	68,3	0,783
⁸² Rb	1,25	1,32

В настоящее время основными областями клинического применения ПЭТ являются онкология, кардиология, неврология.

ПЭТ является высокоинформативным методом лучевой диагностики, позволяя за одно исследование оценить стадию заболевания, получив изображение первичной опухоли, региональных и отдаленных метастазов, в

том числе ранее непредвиденных, что зачастую кардинально меняет тактику ведения пациента.

УДК 616

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ЭХОГРАФИИ

Бураншина А.Ф.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия.

В нашем современном мире все сложнее становится найти то или иное заболевание, и специалисты разрабатывают разные методы диагностики организма человека. На сегодняшний день существует различные диагностические методы, но с большим преимуществом выделяют ультразвуковую диагностику (УЗД). [1,2]. Наибольшее распространение на практике нашлось одномерное и двухмерное исследование (эхография).

Эхография - довольно точный метод, позволяющий в графическом режиме выявить разнообразные патологические изменения и образования, а



также измерять размеры глазного яблока и его отдельные анатомо-оптические элементы и структуры. Принцип эхографии основан на способности ультразвука отражаться от границ тканей, имеющих различные акустические параметры.

В данной работе проведен анализ существующих методик применения эхографии в

практической офтальмологии.

Литература

1. Линденбрaten Л.Д., Королюк И.П. «Медицинская радиология». Москва: Медицина, 2000 г. 665 с.
2. Тухбатуллин М.Г., Алиева И.М. Современные ультразвуковые технологии в клинической практике // Научно-практический медицинский журнал «Практическая медицина» - 2012 г.

© Бураншина А.Ф., 2014 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕПЛОВИЗОРОВ В МЕДИЦИНЕ

Ильасова К.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Все окружающие нас объекты испускают тепловое излучение, интенсивность и спектр которого зависят от свойств тела и его температуры. Инфракрасное излучение может распространяться через атмосферу на большие расстояния, его свойства во многом схожи с поведением обычного для нас видимого света. Вместе с тем, отличий очень много. Чтобы окружающая нас тепловая картина мира стала видимой и наглядной существует специальное направление науки, которое использует фундаментальные законы теплового излучения. Тепловидение – получение видимого изображения объектов по их собственному либо отражённому от них тепловому (инфракрасному) излучению. Результат такой визуализации – термограмма, т.е. изображение, на котором разные яркости или разные цвета соответствуют разному уровню инфракрасного излучения от поверхности наблюдаемых объектов. Технически эта функция реализована в специальных оптико-электронных приборах тепловизорах. Тепловизоры прошли довольно длительный путь эволюции и их совершенствование не прекращается и в настоящее время. Можно выделить два основных класса задач, которые помогает решать тепловидение.

Во-первых, это наблюдение за окружающим миром в инфракрасном диапазоне. Тепловидение применяется для определения местоположения и формы объектов, находящихся в темноте или в оптически непрозрачных средах. Это первая задача, которая была возложена на тепловидение. Задачи наблюдения в инфракрасной области и по сей день востребованы в военной и навигационной технике для обнаружения, навигации, наведения оружия. Многие современные охранные системы используют наблюдательные тепловизоры для повышения эффективности и надежности контроля.

Ко второму классу задач тепловидения можно отнести бесконтактное измерение температуры. Тепловидение применяется для изучения степени нагретости отдельных участков сложных поверхностей и внутренней структуры тел, непрозрачных в видимом свете. Дело в том, что законы теплового излучения позволяют по уровню инфракрасного излучения бесконтактно на расстоянии определить температуру поверхности. Эта функция реализована в пирометрах и измерительных тепловизорах. Бесконтактный контроль распределения температуры по поверхности объекта эффективно применяется для решения широкого круга задач в науке, промышленности, энергетике, строительстве и многих других отраслях.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ В СТОМАТОЛОГИИ

Маркелов Ф.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В стоматологии последних лет наблюдается стремительное совершенствование и создание новых композитных материалов, адгезивных систем и технологий.

Композиционные материалы применяются в стоматологической практике уже более 30 лет и являются ныне неотъемлемой частью адгезивных методов лечения и протезирования зубов.

Успех их клинического использования во многом зависит от правильного понимания свойств и химического состава композиционных материалов, механизмов полимеризации и взаимодействия с тканями зуба.

Заменяя полиметилакрилаты, первые композиты выделялись более высокими физико-химическими свойствам, меньшей усадкой, адгезией к эмали зуба, плотным краевым прилеганием и удовлетворительными эстетическими свойствами. Однако клинические наблюдения показали, что пломбы в условиях полости рта меняются в цвете.

Эту проблему удалось решить с появлением микрофильных композитов, но это ухудшило их физико-механические свойства. Появление гибридных композитов с высокой степенью наполнения неорганикой практически восстановило эти свойства до первоначального уровня, сохранив при этом высокие эстетические характеристики.

Важным этапом явилось создание материалов, полимеризующихся под воздействием энергии световых лучей. Используемые при этом однофазные материалы имеют гомогенную консистенцию и обладают возможностью послыонного нанесения пломбировочного материала.

Успех клинического использования композитов во многом зависит от детальных представлений о свойствах и химическом составе композиционных материалов, механизмах полимеризации и взаимодействия с тканями зуба, а многие ошибки и осложнения удается избежать при четком определении противопоказаний к применению композитов.

Постоянно выходят новинки композиционных материалов с все меньшей полимеризационной усадкой, а так же улучшаются качественные показатели самих материалов: улучшается тиксотропность, пластичность, цветовые характеристики, прочность на истирание, сжатие и разрыв, эти показатели стремятся к природным показателям естественных структур зуба. Все эти перемены позволяют говорить о новом взгляде на художественную реставрацию.

МЕТОД УЛЬТРАВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ТЕРАПИИ

Ахметгалиев Б.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Метод Ультравысокочастотой терапии, основанный на воздействии на организм больного преимущественно ультравысокочастотного электромагнитного поля (э. п. УВЧ). Физическое действие э. п. УВЧ заключается в активном поглощении энергии поля тканями и преобразовании ее в тепловую энергию. Основное теплообразование происходит в тканях, плохо проводящих электрический ток (нервная, костная и т.д.). Э.п. УВЧ оказывает противовоспалительное действие за счет улучшения крово и лимфообращения, активизирует функции соединительной ткани, стимулирует процессы клеточной пролиферации, что создает возможность ограничивать воспалительный очаг плотной соединительной капсулой.

Живое вещество является сложной системой, содержащей как элементы типа электролитов, проводящие ток и характеризующиеся электропроводностью или омическим сопротивлением, так и другие элементы, являющиеся диэлектриками, изоляторами и характеризующиеся определенным значением диэлектрической проницаемости.

Ток проводимости, и ток смещения в тканях сопровождаются превращением энергии тока или поля в тепловую энергию. Нужно учитывать в тканях действие двух различных механизмов нагревания: выделение тепла за счет тока проводимости и за счет тока смещения.

Тепловой эффект токов проводимости:

$$Q = I^2 R t = I U t$$

Тепловой эффект токов смещения:

$$Q \approx j_{\text{см}} E \approx E \left(\frac{dD}{dt} \right) \approx \omega \epsilon \epsilon_0 E^2$$

Литература

[1] Пономаренко Г.Н., Подберезкина Л.А. Дезинфекция и стерилизация в физиотерапии. Санкт-Петербург, «Человек», 2009

ХИМИЯ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

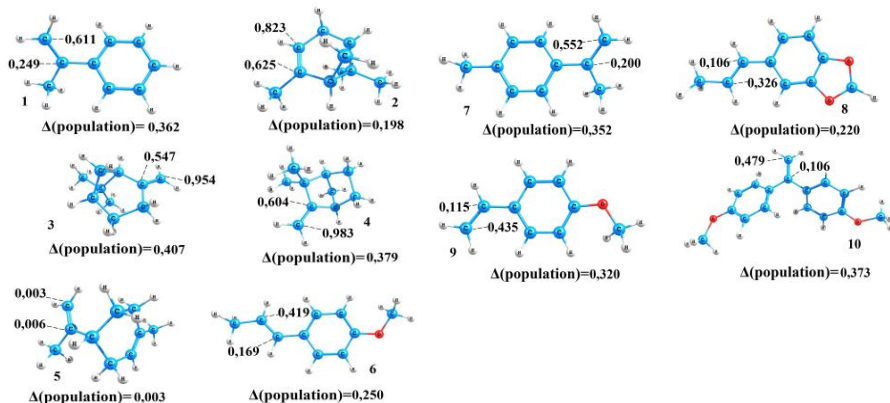
УДК 541.6

ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ОРБИТАЛЬНОЙ ЗАСЕЛЕННОСТИ В КАЧЕСТВЕ ИНДЕКСА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АЛКЕНОВ В РЕАКЦИИ С КАРБКАТИОНАМИ СТАБИЛИЗИРОВАННЫМИ АТОМОМ АЗОТА

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Игнатъева К.А., Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для определения структурных особенностей алкенов (1-13), определяющих их реакционную способность в реакции с аминотильным карбокатионом (АМК), нами с помощью неэмпирического приближения V3LYP/6-31G(d,p) был проведен анализ заселенности на ВЗМО (по Маллекену). Так как АМК является «мягким» электрофилом, то его реакция присоединения по кратной связи должна протекать в условиях орбитального контроля. Поэтому мы предполагали, что анализ заселенности ВЗМО алкенов позволит однозначно определить их способность к взаимодействию с АМК.



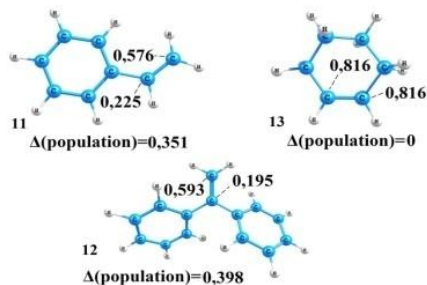


Рис 1. Расчетные значения заселенности ВЗМО на атомах углерода кратной связи в модельных алкенах.

Судя по представленным данным, полученные значения заселенностей ВЗМО не позволяют однозначно определять реакционную способность алкенов. Так, максимальные значения заселенности для соединений **2** (**0,823**) и **13** (**0,816**) сопоставимы. Разница между величинами заселенностей так же не позволяет дифференцировать модельные соединения для **12** (**0,398**) и **4**(**0,379**); **3** (**0,407**). (В качестве модельных соединений рассматривались алкены, реакционная способность которых в реакции с АМК экспериментально изучалась ранее [1, 2])

Литература

1. Henonion G.F., Price C.C., Wolff Jr. V.C. The reaction of formaldehyde and secondary amines with some olefins. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol.77. pp. 4633-4636.
2. Schmidle C.J., Mansfield R.C. The reaction of secondary amines, formaldehyde and olefin. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol. 77. pp. 4636-4638.

© Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Игнатъева К.А., Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А., 2014

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ НА КРАТНОЙ СВЯЗИ АЛКЕНОВ КАК ПОКАЗАТЕЛЬ ИХ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В РЕАКЦИИ С АМИНОМЕТИЛЬНЫМ КАРБКАТИОНОМ

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Игнатъева К.А., Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для определения структурных особенностей алкенов (1-13), определяющих их реакционную способность в реакции с аминотетильным карбокатионом (АМК), нами с помощью неэмпирического приближения ВЗЛУР/6-31G(d,p) были определены заряды для атомов углерода, образующих двойную связь в модельных алкенах. В качестве модельных соединений рассматривались алкены, реакционная способность которых изучалась ранее в реакции с АМК экспериментально [1, 2]

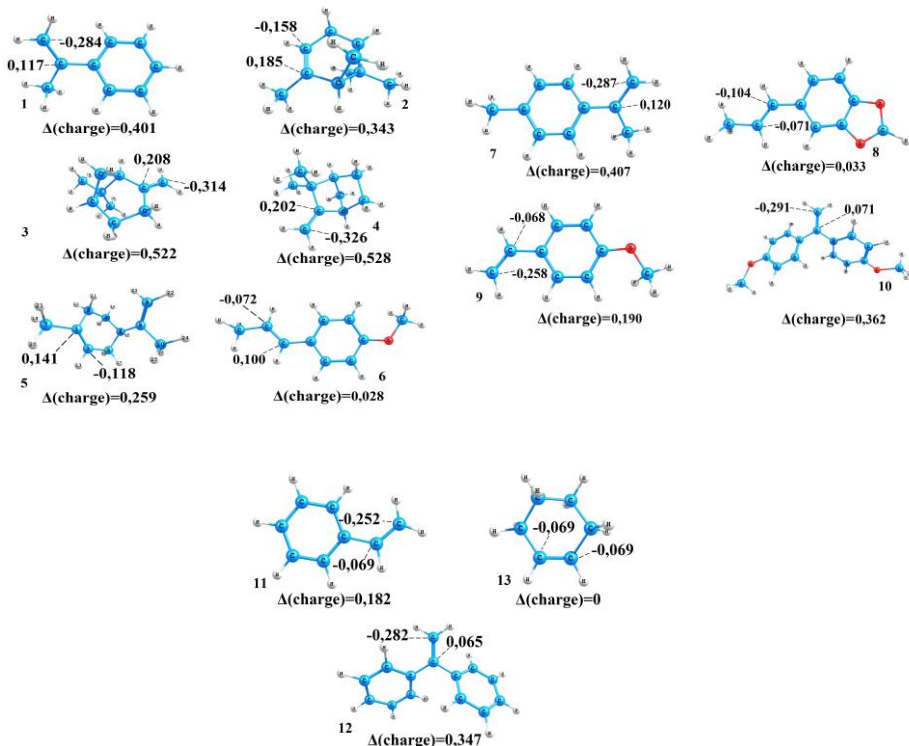


Рис 2. Расчетные значения частичных зарядов на атомах углерода кратной связи

Для оценки связи реакционной способности алкенов с зарядами на атомах С при кратной связи нам представляется удобным использование процентного отклонения Q [3], вычисляемого как:

$$Q = \left| \frac{q_{max} - q_{min}}{q_{min}} \right| \cdot 100\%$$

где q_{max} – это максимальная величина заряда на одном из атомов углерода двойной связи, а q_{min} – это величина заряда соседнего атома по двойной связи.

Табл. 3. Расчетные значения критерия Q модельных алкенов.

Reactive Алкен	Q, %	non Reactive Алкен	Q, %
α -пинен 2	217	1,1-дифенилэтилен 12	123
β -пинен 3	166	стирол 11	73
лимонен 5	165	циклогексен 13	0
камфен 4	162		
p-метилизопропенилбензол 7	142		
α -метилстирол 1	141		
ди-анизилэтилен 10	125		
p-метоксистирол 9	74		
изосафрол 8	32		
анетол 6	28		

Исходя из представленных данных видно, что нельзя использовать процентное отклонение зарядов на атомах С как критерий оценки реакционной способности алкенов. Так, Q для соединений **12** и **10** близки по значениям, а минимальными Q в ряду алкенов обладают соединения **6** и **8**, реагирующие с АМК.

Литература

1. Henonion G.F., Price C.C., Wolff Jr. V.C. The reaction of formaldehyde and secondary amines with some olefins. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol.77. pp. 4633-4636.
2. Schmidle C.J., Mansfield R.C. The reaction of secondary amines, formaldehyde and olefin. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol. 77. pp. 4636-4638.
3. Reed A. E., Weinstock R. B., Weinholt F. J. Natural Population Analysis. *Chem. Phys.* 1985. Vol. 83. pp. 735-746.

© Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Игнатъева К.А., Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р., 2014.

ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ АЛКЕНОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИХ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В РЕАКЦИИ АМИНОМЕТИЛИРОВАНИЯ

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р., Талипова Г.Р.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для определения структурных особенностей алкенов (1-13) (В качестве модельных соединений рассматривались алкены, реакционная способность которых изучалась ранее экспериментально [1, 2]), определяющих их реакционную способность в реакции с аминотетильным карбокатионом (АМК), нами с помощью неэмпирического приближения B3LYP/6-31G(d,p) были определены значения потенциала ионизации.

Расчетные значения потенциала ионизации модельных алкенов.

Ален	I_p	Ален	
камфен 4	7,	циклогексен 13	
β -пинен 3	7,	стирол 11	
лимонен 5	6,	1,1-дифенилэтилен 12	
α -пинен 2	6,		
ди-анизилэтилен 10	5,		
α -метилстирол 1	5,		
p-	5,		
p-метоксистирол 9	4,		
анетол 6	4,		
изосафрол 8	4,		

Очевидно, что приведенные в таблице значения потенциала ионизации не позволяют ранжировать алкены по их реакционной способности в реакции с АМК. Так, алкены **11-13** задают границы диапазона I_p для большинства рассмотренных алкенов, однако оба этих алкена не взаимодействуют с АМК. В тоже время среди реагирующих соединений **6, 8, 9** значения I_p оказываются меньше нижней границы диапазона.

Литература

- Henonion G.F., Price C.C., Wolff Jr. V.C. The reaction of formaldehyde and secondary amines with some olefins. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol.77. pp. 4633-4636.
- Schmidle C.J., Mansfield R.C. The reaction of secondary amines, formaldehyde and olefin. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol. 77. pp. 4636-4638.

© Талипов Р.Ф., Вакулин И.В.,
Латыпова Э.Р., Талипова Г.Р., 2014.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ NBO АНАЛИЗА ДЛЯ ОЦЕНКИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АЛКЕНОВ В РЕАКЦИИ АМИНОМЕТИЛИРОВАНИЯ

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,

Биктимерова Р.Г., Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

На основании NBO анализа проведена оценка реакционной способности алкенов (1-13) в реакции с аминотетильным карбокатионом (АМК). Для оценки реакционной способности с использованием зарядов на атомах углерода двойной связи (Q_{NBO}); заселенности валентных орбиталей атомов С при кратной связи (P_{NBO}) и вкладов атомных орбиталей С sp^2 (O_{NBO}) в образование кратной связи были рассмотрены следующие параметры:

$$P = \left| \frac{\varphi_{max} - \varphi_{min}}{\varphi_{min}} \right| \cdot 100\%$$

где φ_{max} – это максимальная величина заселенности валентной орбитали одного из атомов углерода двойной связи, а φ_{min} – заселенности валентной орбитали соседнего атома по двойной связи.

$$Q = \left| \frac{q_{max} - q_{min}}{q_{min}} \right| \cdot 100\%$$

где q_{max} – это максимальная величина заряда на одном из атомов углерода двойной связи, а q_{min} – это величина заряда соседнего атома по двойной связи.

$$O = \left| \frac{k_{max} - k_{min}}{k_{min}} \right| \cdot 100\%$$

где k_{C1} – это коэффициент (в процентах), характеризующий участие АО атома углерода двойной связи, в образовании π -связи, а k_{C2} – это коэффициент (в процентах), характеризующий участие АО соседнего атома углерода по двойной связи.

Как следует из табл. только один параметр O_{NBO} , позволяет четко дифференцировать алкены на реакционноспособные (1-10) и неакционноспособные (11-13). Полученное распределение алкенов по реакционной способности совпадает с литературными данными об участии алкенов в реакции Манниха [1, 2]. Параметры P_{NBO} и Q_{NBO} не могут быть использованы, т.к. неверно описывают реакционную способность алкенов в реакции присоединения АМК по кратной связи. Так, для лимонена **7** и α -пинена **2**, участвующих в реакции, значение P_{NBO} оказывается меньше, чем

для 1,1-дифенилэтилена, инертного в данной реакции. Аналогично, для анетола **6** и изосафрола **8**, участвующих в реакции, значение Q_{NBO} оказывается меньше, чем для стирола **11**, инертного в данной реакции.

Табл. 1

Расчетные значения критериев P, Q, O для модельных акленов 1-13.

Алкен	P_{NBO}	Q_{NBO}	O_{NBO}
α -метилстирол 1	10,21	95,67	7,51
α -пинен 2	5,66	91,64	5,76
β -пинен 3	11,04	96,07	9,73
камфен 4	11,41	97,91	6,91
лимонен 5	5,64	94,82	5,47
анетол 6	1,04	18,64	2,88
p-метилизопропенилбензол 7	10,32	94,70	5,89
изосафрол 8	1,16	20,60	3,75
p-метоксистирол 9	4,81	46,54	3,58
ди-анизилэтилен 10	9,78	90,81	4,54
стирол 11	4,44	44,19	1,65
1,1-дифенилэтилен 12	9,26	89,29	2,10
циклогексен 13	0,00	0,01	0,00

Согласно расчетным значениям, для алкенов участвующих в реакции Манниха значение O_{NBO} должно быть $\geq 2,88$. Для алкенов инертных в этой реакции значение O_{NBO} должно быть 2,10 и меньше.

Литература

1. Henonion G.F., Price C.C., Wolff Jr. V.C. The reaction of formaldehyde and secondary amines with some olefins. *J. Am. Chem. Soc.* **1955**. Vol.77. pp. 4633-4636.
2. Schmidle C.J., Mansfield R.C. The reaction of secondary amines, formaldehyde and olefin. *J. Am. Chem. Soc.* **1955**. Vol. 77. pp. 4636-4638.

© Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Биктимерова Р.Г., Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А., 2014.

НЕКОТОРЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ РЕАКЦИИ ПРИСОЕДИНЕНИЯ ОСНОВАНИЙ МАННИХА ПО КРАТНОЙ СВЯЗИ АЛКЕНОВ

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,

Биктимерова Р.Г., Матвеев Е.А., Саяхов Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Были изучены возможные причины обуславливающие низкую реакционную способность аминотильного карбокатиона (АМК) в реакциях присоединения по С=С кратной связи. В качестве модельных соединений рассматривались алкены (1-8), реакционная способность которых изучалась ранее в реакции с АМК экспериментально [1, 2].

С помощью неэмпирического приближения В3LYP/6- 31G(d,p) нами были вычислены значения свободной энергии Гиббса реакции АМК с выбранными алкенами (1-8).

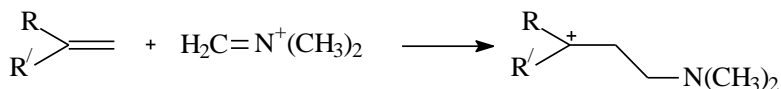


Табл 1. Расчетные значения свободной энергии Гиббса первой стадии взаимодействия АМК с алкенами

Алкен	$\Delta G^{298}_{\text{г}}$ кДж/моль	Алкен	$\Delta G^{298}_{\text{г}}$ кДж/моль
α -метилстирол 1	8,48	стирол 6	3,89
α -пинен 2	1,58	1,1дифенилэтилен 7	-9,43
β -пинен 3	16,88	циклогексен 8	11,14
камфен 4	31,94		
лимонен 5	-15,60		

Согласно представленным данным, свободная энергия Гиббса не может служить однозначным критерием, определяющим возможность или невозможность участия алкена в реакции аминотилирования, так как расчетные значения ΔG не соответствуют экспериментальным данным.

Литература

1. Henonion G.F., Price C.C., Wolff Jr. V.C. The reaction of formaldehyde and secondary amines with some olefins. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol.77. pp. 4633-4636.
2. 2.Schmidle C.J., Mansfield R.C. The reaction of secondary amines, formaldehyde and olefin. *J. Am. Chem. Soc.* 1955. Vol. 77. pp. 4636-4638.

© Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,
Биктимерова Р.Г., Матвеев Е.А., Саяхов Р.Р., 2014

ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА

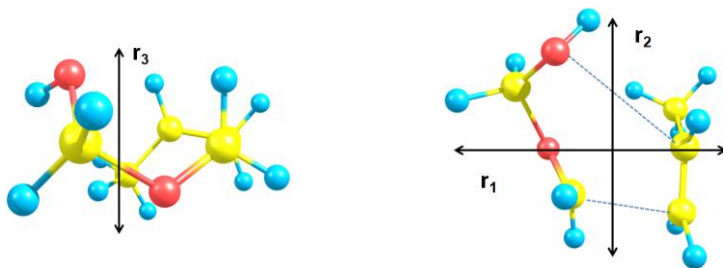
Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С., Купова О.Ю., Пасько П.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В качестве одного из этапов решения проблемы селективности образования 1,3-диоксанов по реакции Принса нами был уточнен механизм этой реакции. Знание о строении переходного состояния открывает возможности применения принципов «молекулярного импринтинга» для решения указанной проблемы. С помощью приближения MP2/6-31G(d,p) нами определены размеры переходных состояний реакции образования 1,3-диоксанов по реакции Принса.

Таблица 1.

Линейные размеры переходных состояний реакций образования 4-алкил-1,3-диоксанов из модельных алкенов, Å.



Алкен	r_1	r_2	r_3
Этилен	5,191	4,216	3,010
Пропилен	5,335	4,915	3,024
Бутен-1	4,123	5,292	4,185
Изобутилен	6,214	4,803	3,826
Транс-2-бутен	6,697	5,941	3,206

Согласно представленным данным, линейные размеры ПС по двум сечениям и его пространственная конфигурация практически не зависят от строения исходного алкена. Заметно изменяется только один из параметров, что связано с увеличением размера алкильного заместителя в исходном алкене. Поэтому в первом приближении адсорбент, способный к селективной адсорбции ПС образования 1,3-диоксанов, может быть описан, как соединение, содержащее полости определенного сечения. Минимальное сечение полости в адсорбенте, в которую сможет помещаться ПС, определено нами как 5 Å.

© Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С.,
Купова О.Ю., Пасько П.А., 2014.

**ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА
СНИЖЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-
ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА**

Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С., Купова О.Ю., Пасько П.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нами изучено влияние диаметра углеродных нанотрубок (УНТ) на снижение энергии активации образования 1,3-диоксанов по реакции Принса. Для этого с использованием модуля Adsorption Locator программы Accelrys Material Studio 5.5 были найдены значения энергии стабилизации при взаимодействии УНТ с рядом переходных состояний (ПС), полученных для модельного набора алкенов (табл.1).

Таблица 1.

Зависимость энергии адсорбции переходных состояний от диаметра пор нанотрубок, кДж/Моль.

d, Å	Этилен	Пропилен	Бутен-1	Изобутилен	Транс-2-бутен
8,145	-65,6	-67,1	-66,6	-67,9	-58,1
9,492	-125,7	-140,8	-146,0	-149,5	-125,4
10,851	-106,0	-124,0	-143,6	-139,3	-140,6
12,209	-87,5	-100,8	-120,8	-117,2	-120,5
13,563	-78,6	-89,8	-100,8	-99,4	-109,4
14,927	-73,1	-83,3	-91,9	-89,8	-101,3
16,278	-69,7	-78,8	-86,9	-83,9	-95,4
17,632	-67,2	-75,6	-83,0	-79,6	-90,8
18,983	-65,2	-73,4	-80,0	-76,5	-87,2
20,346	-63,7	-71,7	-77,7	-74,0	-84,3
21,705	-62,5	-70,2	-75,8	-72,1	-82,0
23,055	-61,5	-69,1	-74,2	-70,6	-80,1
24,411	-60,6	-67,7	-73,0	-69,4	-78,5

Согласно представленным данным УНТ способны оказывать каталитический эффект на рассматриваемую реакцию. При этом наиболее выраженным эффект становится при диаметрах УНТ 9,4 – 10,9 Å. Очевидно, что в этом случае переходное состояние может помещаться внутрь нанотрубки и стабилизироваться за счет межмолекулярных взаимодействий со всей внутренней поверхностью трубки (рис. 1).

Интересно отметить, наилучшее взаимодействие между ПС и нанотрубками достигается при диаметре трубки 9,4-10,9 Å и не зависит от типа и размера исходного алкена. Это согласуется с постоянством двух

линейных размеров ПС вне зависимости от строения участвующего в реакции алкена.

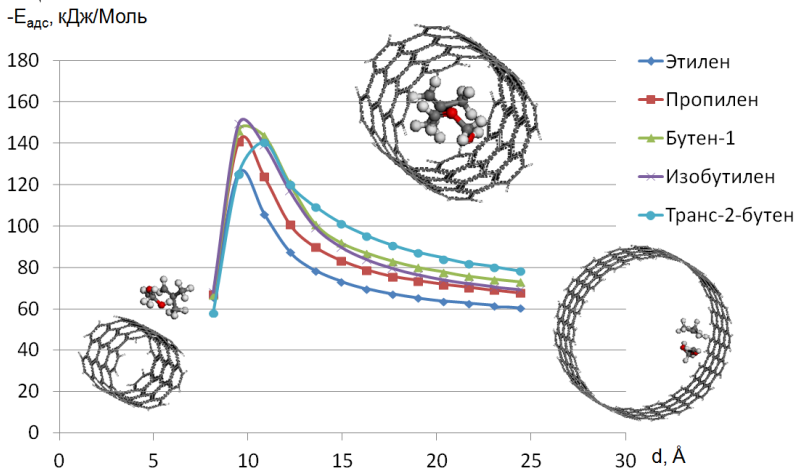


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции переходных состояний от диаметра нанотрубки.

© Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С.,
Купова О.Ю., Пасько П.А., 2014.

УДК 541.6

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ПОР ЦЕОЛИТОВ ТИПА $\text{Ca}_x[\text{Al}_{2x}\text{Si}_y\text{O}_z] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ НА СНИЖЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА

Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Латыпова Э.Р., Купова О.Ю., Пасько П.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нами изучено влияние размера пор цеолитов структурного типа $\text{Ca}_x[\text{Al}_{2x}\text{Si}_y\text{O}_z] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ на снижение энергии активации образования 1,3-диоксанов по реакции Принса. Для этого с использованием модуля Adsorption Locator программы Accelrys Material Studio 5.5 были найдены значения энергии стабилизации при взаимодействии цеолитов с рядом переходных состояний (ПС), полученных для модельного набора алкенов (табл. 1).

В присутствии цеолитов стабилизация ПС реакции образования 1,3-диоксана становится наибольшей в случае диаметров пор 5,1 – 5,4 Å. Очевидно, что в этом случае ПС может помещаться внутрь поры цеолита и стабилизироваться за счет межмолекулярных взаимодействий со всей внутренней поверхностью поры (рис. 1). При диаметре НТ меньше 5 Å, ПС

уже не способно помещаться внутрь и стабилизируется только частично за счет взаимодействия с поверхностью цеолита. В случае цеолитов с большим диаметром пор, межмолекулярные взаимодействия могут осуществляться только с фрагментом внутренней поверхности поры.

Таблица 1.

Зависимость энергии адсорбции переходных состояний от диаметра пор цеолитов, кДж/Моль.

	d, Å	Этилен	Пропилен	Бутен-1	Изобутилен	Транс-2-бутен
ANA	3,791	-49,5	-57,6	-59,2	-56,9	-63,8
NAT	3,952	-49,6	-60,2	-53,6	-52,1	-62,6
BEA	5,097	-107,3	-121,3	-140,3	-139,2	-140,1
STI	5,446	-90,6	-98,1	-134,6	-96,6	-137,3
GIS	5,837	-63,0	-72,6	-68,6	-77,9	-73,8
YUG	6,245	-52,6	-59,9	-65,3	-66,1	-70,2
PAR	6,552	-49,5	-57,6	-59,2	-56,9	-63,8

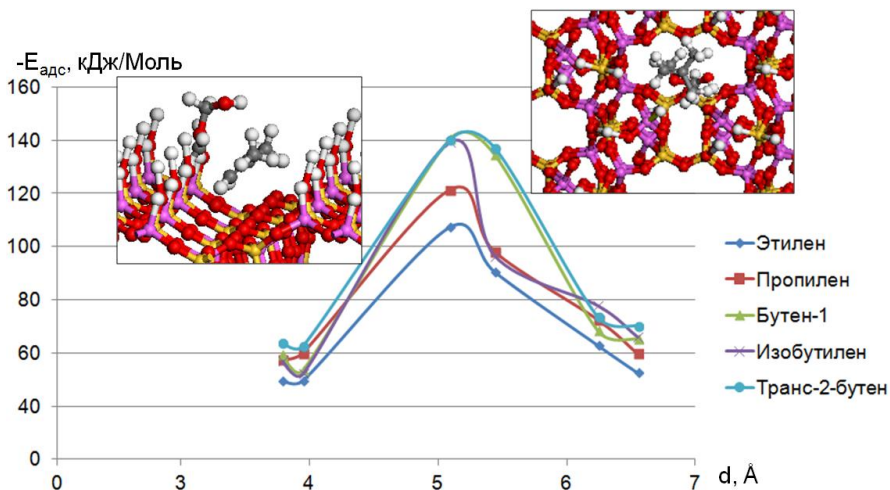


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции переходных состояний от диаметра пор цеолитов.

© Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Латыпова Э.Р.,
Купова О.Ю., Пасько П.А., 2014.

О ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЫШЕНИЯ СЕЛЕКТИВНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА В ПРИСУТСТВИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Латыпова Э.Р., Купова О.Ю., Пасько П.А.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Проведен сравнительный анализ влияния диаметра углеродных нанотрубок (УНТ) на изменение энергии активации образования 1,3-диоксанов и дигидропиранов по реакции Принса. С использованием модуля Adsorption Locator программы Accelrys Material Studio 5.5 определены зависимости энергий стабилизации переходных состояний (ПС) образования 4,4-диметил-1,3-диоксана и 4-метил-2Н-дигидропирана из изобутилена по реакции Принса от диаметра УНТ (рис. 1).

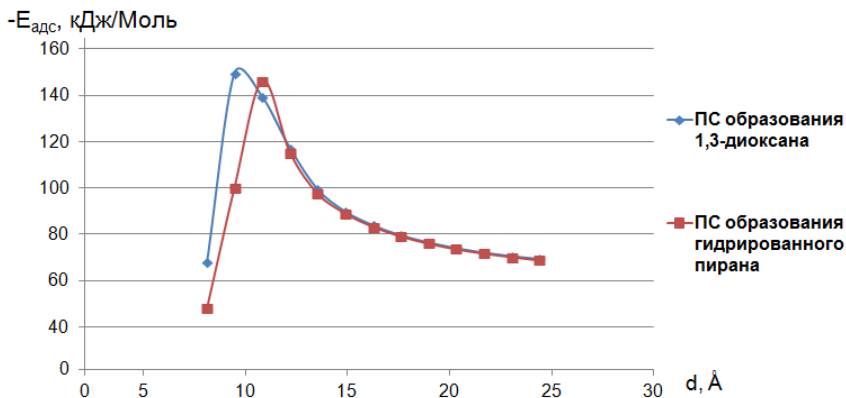


Рис.1. Зависимость энергии адсорбции ПС от диаметра пор углеродных нанотрубок.

Адсорбция на нанотрубках снижает энергию активации обеих реакций, однако максимальный эффект достигается при разных значениях диаметра нанотрубки - 9.492 Å в случае образования 4,4-диметил-1,3-диоксана и 10.851 Å в случае образования 4-метил-2Н-дигидропирана. Таким образом, скорость образования 1,3-диоксанов может быть избирательно увеличена при использовании нанотрубок соответствующего диаметра, что должно способствовать повышению селективности их образования.

© Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Латыпова Э.Р.,
Купова О.Ю., Пасько П.А., 2014.

УДК 544.18; 547.5; 547.6; 547.28; 547.239.2; 547.231; 547.75

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРИПЛЕТНО – ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОСРЕДСТВОМ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Ильина М.Г., Овчинников М.Ю., Хурсан С.Л.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Целью настоящей работы была попытка охарактеризовать карбонильные и некоторые другие соединения в рамках единой выборки. В соответствии с целью была поставлена задача выбора квантово – химического метода на высоком количественном уровне, характеризующего энергию молекулы, находящуюся в триплетном состоянии. С использованием шести методов (ВЗЛР, РВЕРВЕ, ТРSSH, МРW1РВЕ, ОЗЛР, ТРSSTPSS) с различными базисными наборами были оптимизированы структуры и рассчитаны энергетические параметры следующих 20 соединений: азулен, ацетон, ацетофенон, антрахинон, антрацен, бензил, бензол, бензальдегид, бензонитрил, бифенил, гидрохинон, диацетил, карбазол, нафталин, нафтацен, нитробензол, пирен, терфенил, феназин, фенол (рис. 1).

Вычисления проводились с помощью программы Gaussian 09. Визуализация и первичная обработка результатов расчета осуществлялась с помощью программы ChemCraft. Установлено, что метод ВЗЛР в сочетании с базисным набором тройного валентного расщепления 6–311+G(d, p) наиболее лучше описывает энергию триплетного состояния молекул.

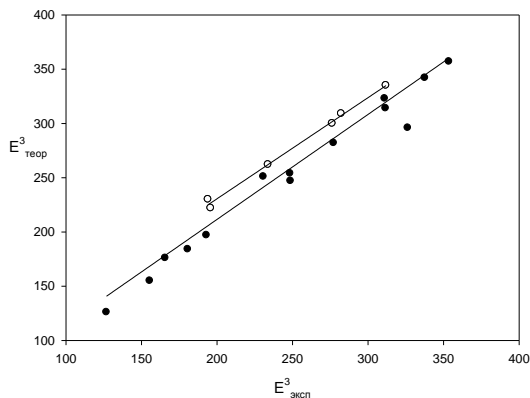


Рис. 1. График зависимости теоретических данных от экспериментальных для набора из 20 соединений методом ВЗЛР/6–311+G(d, p)

© Ильина М.Г., Овчинников М.Ю., Хурсан С.Л., 2014 г.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОНАКалимуллина Л.Р.², Асфандиаров Н.Л.¹, Нафикова Е.П.¹, Лачинов А.Н.^{1,2}, Чижов Ю.В.³¹Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, г. Уфа, Россия²Башкирский государственный педагогический университет, г. Уфа, Россия³Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, Россия

Производные хинона широко распространены в живой природе: растениях, насекомых и некоторых животных. Они проявляют широкий спектр фармакологических свойств. Последние научные достижения стимулируют квантово-химические исследования электронной структуры этих молекул с целью предсказания наиболее эффективных производных с точки зрения биологии и фармакологии. Убихинон и витамин-К играют ключевую роль в процессах переноса электрона в дыхательной системе клеток животных. Сродство к электрону (E_a) является одной из фундаментальных характеристик электронной структуры молекул. Оно определяет донорно-акцепторные свойства молекул и, в комбинации с энергией ионизации, ширину расщепления между высшей занятой и низшей вакантной молекулярной орбиталью. Величина такого расщепления часто используется для поиска корреляций электронной структуры и активности молекул. Величина E_a играет важнейшую роль в отрицательных ионах, определяя набор возможных каналов их диссоциации и стабильность относительно выброса избыточного электрона (среднее время автоотщепления та). В работе с использованием метода теории функционала плотности B3LYP/6-31G(d) был исследован ряд соединений, представляющих собой производные хинона. Для исследуемого ряда соединений из эксперимента известны энергии вертикального захвата электрона (E_{VA}) и (или) сродства к электрону (E_a). Была обнаружена корреляция рассчитанных энергий π^* -молекулярных орбиталей с E_{VA} , измеренными методом спектроскопии проходящих электронов с коэффициентом корреляции 0,96. Кроме того, теоретические значения адиабатического сродства к электрону, вычисленные как разность полных энергий нейтральной молекулы и анион-радикала, коррелируют с величинами E_a , известными из экспериментов переноса электронов с коэффициентом корреляции 0,996.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки России (НИР № 744).

УДК544.183.25
**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ
 ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА
 С ЯНТАРНОЙ И ФУМАРОВОЙ КИСЛОТАМИ.**

Э.И. Мурсалимова, Э.М. Хамитов.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Известно, что производные пиримидина обладают широким спектром биологической активности, в частности противовоспалительной, противоопухолевой, антигипоксической, иммуномодулирующей.

Дополнительный интерес к урацилам обусловлен их способностью образовывать комплексные соединения с полифункциональными карбоновыми кислотами, которые могут быть использованы для получения более эффективных лекарственных форм.

С целью изучения строения комплексных соединений 6-метилурацила, 5-амино-6-метилурацила, 5-нитро-6-метилурацила, 5-гидро-6-метилурацила с янтарной и фумаровой кислотами нами был проведен квантово-химический расчет DFT методом, с использованием следующих функционалов: B1LYP, B3LYP1, CSOGGA11, OLYP, OPTX, PBE0, XSOGGA, XSOGGAX.

В таблице представлены энергии образования данных комплексов методом CSOGGA11, так как у него наиболее лучший учет корреляции.

Комплекс	6МУ+ЯК	5-NO2-6-МУ+ЯК	5-NH2-6-МУ+ЯК	5-OH-6-МУ+ЯК	У+ЯК
$\Delta_f E$, ккал/моль	-7,37	-7,18	-7,46	-15,61	-7,37
Комплекс	6МУ+ФК	5-NO2-6-МУ+ФК	5-NH2-6-МУ+ФК	5-OH-6-МУ+ФК	У+ФК
$\Delta_f E$, ккал/моль	-7,55	-7,38	-7,52	-15,81	-7,46

По результатам расчетов самыми устойчивыми комплексами являются 5-гидрокси-6-метилурацил как с янтарной, так и с фумаровой кислотами.

Литература

1. Чернышенко Ю. Н. Синтез новых производных 6-метилурацила, обладающих фармакологической активностью: Дисс. ... канд. хим. наук. Уфа, 2008. 133 с.
2. Борисова Н.С., Ишмуратова Г.И., Валиева О.И. и др. // Вест. Башк. ун-та. 2012. Т. 17. № 4. С. 1687-1690.
© Мурсалимова Э.И., 2014 г.

Практическая значимость работы определяется совокупностью результатов, полученных при теоретическом исследовании урацила и его димеров, что составляет фундамент для исследования строения и свойств макромолекул более сложной структуры. Проведено теоретическое исследование структурных свойств урацила и его димеров, с последующим установлением термодинамических параметров.

Для расчета термодинамических характеристик и равновесных геометрических параметров использован метод TPSSh/6-311G(d,p). На основании чего был получен ряд устойчивости всех возможных димеров урацила. Установлено, что димер, образованный по центрам распознавания 1-1 (рис.1, б), наиболее стабилен, поскольку обладает наименьшей относительной энтальпией образования в данном ряду. Относительная энергия остальных форм димеров, как правило, выше и лежит в диапазоне от 2,5 до 12 кДж/моль в зависимости от области связывания.

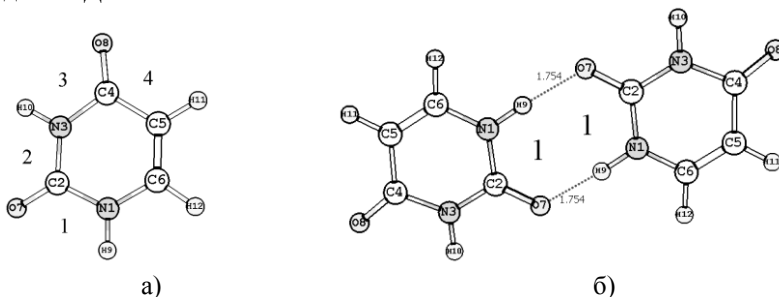


Рис.1. Равновесные структуры урацила (а) и его димера (б)

Таким образом, были проанализированы геометрические структуры всех возможных димеров урацила в плоской конформации, на основании чего получен ряд устойчивости различных димеров. Проведенный анализ показывает, что область связывания 1-1 является предпочтительной для димеров урацила.

Литература

1. Масунов, А.Э. Влияние специфических межмолекулярных взаимодействий на кристаллическую структуру, производные и аналоги урацила / А. Э. Масунов, С. И. Грищенко, П. М. Зоркий // Журнал физической химии. — 1993. — том 67, № 2. — С. 221-239.

© Шамсиева Г.Р., 2014 г.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОСБОРКИ 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА В РАЗЛИЧНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М., Хурсан С.Л.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящей работе были рассчитаны энергетические характеристики мономеров, димеров, 5-гидрокси-6-метилурацила (ГМУ) и их ряды устойчивости. Расчеты производились в программе Gaussian09 в приближении TPSSH/6-311G(d,p) в рамках модели РСМ. В качестве полярного растворителя была выбрана вода (w), слабополярного – ацетонитрил (ac) и неполярного – гексан (g). Исходя из структуры мономера (рис. 1а) были рассмотрены все варианты образования димеров по различным центрам распознавания (табл. 1). Обнаружено, что в условиях РСМ(w) образуется димер 2-3, РСМ(ac) и РСМ(g) димер 1-1. По результатам РСА в работе [1] было предложено образование тетрамера «с» (рис. 1) из димера 2-4 (рис. 1b).

Табл 1. Энергетические характеристики димеров ГМУ, кДж/моль

Димер	$\Delta H(w)$,	$\Delta H(ac)$,
1-1	0.5	0.0
1-2	1.4	1.4
1-3	1.9	2.0
1-4	6.7	6.8
1-5	34.6	33.7
2-2	1.5	2.1
2-3	0.0	0.7
2-4	8.0	8.7
2-5	31.2	-
3-3	4.8	5.2
3-4	9.0	9.6
3-5	26.7	-
4-4	2.4	8.8

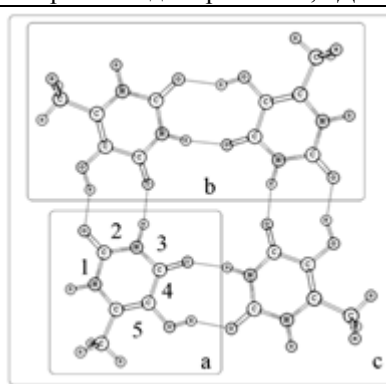


Рис 1. Тетрамер ГМУ

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-04-97035

Литература

1. Иванов С. П., Лысенко К. А., Колядина О. А., Старикова З. А., Муринов Ю. И. Структура и сорбционные свойства 5-гидрокси-6-метилурацила. Журнал физической химии, 2005, том 79, №2, с. 278-284

© Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М., Хурсан С.Л., 2014 г.

МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В КВАНТОВО- ХИМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²УОР №1, г. Екатеринбург, Россия

Предложен ряд серий последовательных расчетов воспроизводящих приближения широко используемые при расчете равновесной геометрии (табл. 1). Адекватность серий рассмотрена на следующем модельном наборе соединений:

C_xH_y	$CH_3CH_3, CH_3CH_2CH_3, CH_2CH_2, CH_3CHCH_2, HCCN$
О-содержащие	$CH_2O, CH_3CHO, CH_3CH_2CHO, CH_3CH_2OH, CH_3CH_2CH_2OH, CH_3CHONCH_3, HCOOH, CH_3COOH, CH_3CH_2COOH, HCOOCH_3, CH_3COOCH_3$, оксиран, оксетан, 1,3-диоксолан; замещенные 1,3-диоксаны, тетрагидропираны, тетрагидрофураны, циклогексеноны-2; α -замещенные акролеины, бетулины
N-содержащие	$CH_3NH_2, CH_3CH_2NH_2, CH_3NHCH_3, HCONH_2, CH_3CONH_2$, азиридин, азетидин, пирролидин, пиридин,
F-содержащие	$CH_3F, CH_2F_2, CH_3CH_2F, CH_3CHF_2, CH_2FCH_2F$
Cl-содержащие	$CH_3Cl, CH_2Cl_2, CHCl_3, CH_3CH_2Cl, CH_3CHCl_2$
малые молекулы	$H_2O_2, CO_2, H_2S, NH_3, H_2O, HCN, NH_2NH_2, Si_2H_6$

Таблица 1. Время расчета, средняя разница значений геометрических параметров и полной энергии относительно прямого расчета

Серия	$\Delta r, \%$ $\cdot 10^5$	$\Delta a, \%$ $\cdot 10^5$	$\Delta b, \%$ $\cdot 10^5$	$\Delta E_{tot},$ $\% \cdot 10^7$	$t_{TP} /$ $t_{МПП}$
RHF/3-21G(d) // MP2/6-31G(d,p)	2.7	5.1	7.8	3.1	>3,1
RHF/3-21G(d) // RHF/6-31G(d) // MP2/6-31G(d,p)	3.2	5.6	8.3	3.1	>3,4
RHF/6-31G(d)//MP2(fc)/6-31G(d)// MP2/6-31G(d,p)	3.1	5.5	8.3	3.1	>2,1
RHF/3-21G(d) // RHF/6-31G(d) //MP2(fc)/6-31G(d)// MP2/6-31G(d,p)	3.4	6.2	8.5	3.1	>4,3
RHF/3-21G(d)//MP2(fc)/6-31G(d)// MP2/6-31G(d,p)	3.2	5.9	8.4	3.1	>6,7
RHF/3-21G(d)//MP2(fc)/6-31G(d,p)// MP2/6-31G(d,p)	3.0	5.6	8.1	3.1	>5,8
RHF/3-21G(d) // MP2(fc)/6-31G(d) // MP2/cc-pVDZ	3.1	5.5	8.0	3.1	>7,5
RHF/3-21G(d) // B3LYP/6-31G(d,p)	2.7	5.1	7.7	3.1	>2,5

г, а, b –длины связей, валентные и диэдральные углы

Все серии последовательных расчетов, вне зависимости от числа последовательных расчетов, с хорошей воспроизводимостью локализуют те же экстремумы, что и прямой расчет. Количество расчетов в серии оказывает заметное влияние на время нахождения экстремума. Оптимальным представляется использование трехстадийных серий. В этом случае последовательности начинающиеся с расчета в приближения RHF/3-21G(d) позволяют сократить время локализации экстремумов в 5.8 и более раз.

© Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И., 2014 г.

УДК 544.022; 541.1; 547.022

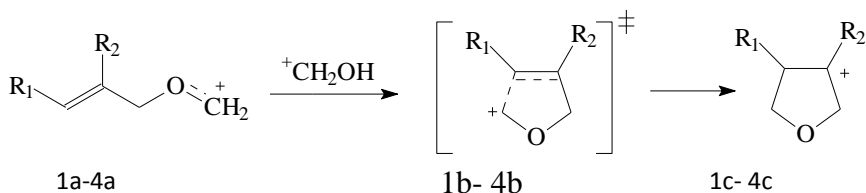
ПРИМЕНИМОСТЬ КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ПРИ ИЗУЧЕНИИ МЕХАНИЗМОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

²УОР №1, г. Екатеринбург, Россия

На примере образования гидрированных фуранов по реакции Принса рассмотрена возможность применения ускоренных композитных методов расчета (КМР) MP4^{MP2Δ(+f)}₆₋₃₁₁ и MP4^{MP2Δ(+fdp)}₆₋₃₁₁ для изучения механизма. В качестве метода сравнения выбран известный КМР G3.



R₁ = CH₃; R₂ = H (1a, 1b, 1c)

R₁ = n-C₃H₇; R₂ = H (3a, 3b, 3c)

R₁ = C₂H₅; R₂ = H (2a, 2b, 2c)

R₁ = CH₃; R₂ = CH₃ (4a, 4b, 4c)

КМР MP4^{Δ(+fdp)}_{MP2/6-311} хорошо воспроизводит результаты расчетов Δ_rG°₂₉₈ и ΔE* реакции циклизации алкоксикарбениевых ионов, полученные в приближении MP4/6-311G+(fd,p) (табл. 1) и высокоточном КМР G3 (табл. 2)

Таблица 1

Воспроизводимость расчета энергии в КМР $MP4^{\Delta(+fdp)}$ _{MP2/6-311}
относительно метода $MP4/6-311G+(fd,p)$, в кДж/моль

Интермедиаы	Инкр. A_B		Инкр. A_C	
	CAO	MO	CAO	MO
1a-4a	1,1	1,5	4,2	4,5
1b-4b	3,2	3,9	0,7	0,9
1c-4c	0,4	0,6	2,8	3,0

Таблица 2

$\Delta_r G^\circ$ и энергия активации (ΔE_a) реакции циклизации иона 153а
(кДж/моль)

Метод	$\Delta_r G^\circ_{298}$	ΔE^*
$MP4/6-311G+(fd,p)$	-13,4	77,2
G3	-10,1	78,5

Из двух рассмотренных ускоренных КМР $MP4^{\Delta(+f)}$ _{MP2/6-311} и $MP4^{\Delta(+fdp)}$ _{MP2/6-311} более точным является $MP4^{\Delta(+f)}$ _{MP2/6-311} (табл. 3). При этом наилучшая воспроизводимость КМР достигается при использовании поправки A_C , в этом случае CAO КМР $MP4^{\Delta(+f)}$ _{MP2/6-311} составляет всего 0,9 кДж/моль.

Таблица 3.

Абсолютные погрешности схем $MP4^{MP2\Delta(+f)}$ ₆₋₃₁₁ и $MP4^{MP2\Delta(+fdp)}$ ₆₋₃₁₁,
полученные при определении полных энергий интермеидатов 1-4 (в
Дж/моль).

CAO	9,36	1,90	0,92	5,46	1,73	2,63
MO	12,55	3,29	1,71	10,03	4,66	5,21

Таким образом, ускоренные КМР с успехом могут использоваться при изучении и моделировании механизмов органических реакций

СПОСОБЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭМПИРИЧЕСКИХ ИНКРЕМЕНТОВ ПОВЫШАЮЩИХ ТОЧНОСТЬ УСКОРЕННЫХ КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА

Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²УОР №1, г. Екатеринбург, Россия

Анализ погрешностей ускоренных композитных методов расчета (КМР), которые обычно вычисляются по формуле вида (1), показывает, что зависимость погрешности от числа электронов в молекуле имеет линейный характер.

$$E_{\text{КМР}} = E_{\text{BASE}} + \sum \text{Inc}_i + A \quad (1)$$

E_{BASE} - полная энергия вычисленная в простом приближении

Inc_i - инкремент, учитывающий расширение базисного набора

A - эмпирический инкремент

Например, для КМР $\text{MP4}^{\Delta(+\text{fdp})}_{\text{MP2/6-311}}$, вычисляемого по следующему уравнению

$$E[\text{MP4/6-311}+\text{G}(\text{fd},\text{p})] = E[\text{MP4/6-311G}] + \Delta(+,\text{fd},\text{p}) + A$$

$$\text{где } \Delta(+,\text{fd},\text{p}) = E[\text{MP2/6-311}+\text{G}(\text{fd},\text{p})] - E[\text{MP2/6-311G}]$$

такая зависимость представляется следующим образом :

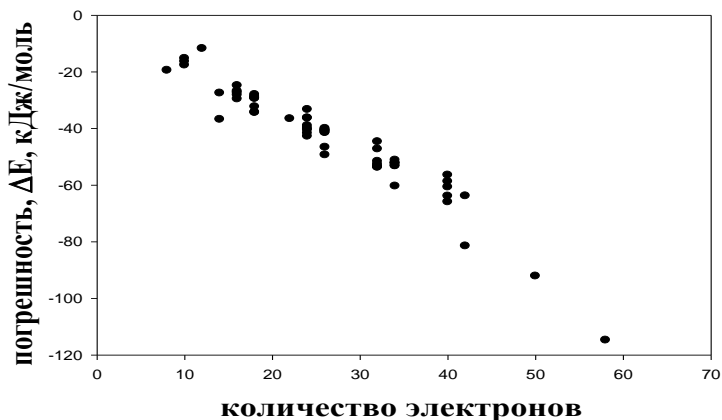


Рис.1. Зависимость воспроизводимости полной энергии в КМР $\text{MP4}^{\Delta(+\text{fdp})}_{\text{MP2/6-311}}$ от общего количества электронов в соединении

С учетом такой зависимости, точность вычисления КМР может быть существенно повышена за счет применения инкремента A , рассчитываемого

по формуле, в которой учитывается число и характер распределения электронов в молекуле:

$$A_b = a \cdot N_{\text{core}} + b \cdot N_{\text{val}} + c \cdot N_{\text{pair}} \quad (2)$$

$$A_c = a \cdot N_{\text{core}} + b \cdot N_{\text{val}} + c \cdot N_{\text{pair}} + y \quad (3)$$

где N_{core} , N_{val} , N_{pair} – количество остовных, валентных электронов и неподеленных электронных пар.

Значения коэффициентов a , b , c , y в уравнениях (2-3) определяются методом наименьших квадратов по результатам расчетов полной энергии для соединений тестового набора в КМР и прямом методе расчета (табл. 1).

Таблица 1.

Коэффициенты корреляции и значения отклонений для различных вариантов вычисления инкремента A в КМР $MP4^{\Delta(+fdp)}_{MP2/6-311}$ (кДж/моль)

A_x	$MP4^{\Delta(+fdp)}_{MP2/6-311}$		
	CAO	MO	R
$A=0$	43.1	114.8	-
A_B	2.7	14.2	0.97
A_C	2.6	12.5	0.98

Использование инкрементов A_B и A_C в КМР $MP4^{\Delta(+fdp)}_{MP2/6-311}$ позволяет повысить точность расчета более чем в 6 раз. Среднее абсолютное отклонение уменьшается до 2,6 кДж/моль, максимальное отклонение до 12,5 кДж/моль.

© Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ТЕСТОВОГО НАБОРА НА ЭМПИРИЧЕСКИЕ ИНКРЕМЕНТЫ В КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДАХ РАСЧЕТА

Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Вакулина А.И.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²УОР №1, г. Екатеринбург, Россия

Показано, что точность ускоренных композитных методов расчета (КМР), вычисляемых по формуле вида (1):

$$E_{\text{КМР}} = E_{\text{BASE}} + \sum \text{Inc}_i + A \quad (1)$$

E_{BASE} - полная энергия вычисленная в простом приближении

Inc_i - инкремент, учитывающий расширение базисного набора

A - эмпирический инкремент

может быть значительно повышена за счет использования эмпирических инкрементов A учитывающих число и характер распределения электронов в молекуле. Вычисление инкрементов проводится по следующим формулам:

$$A_b = a \cdot N_{\text{core}} + b \cdot N_{\text{val}} + c \cdot N_{\text{pair}} \quad (2)$$

$$A_c = a \cdot N_{\text{core}} + b \cdot N_{\text{val}} + c \cdot N_{\text{pair}} + y \quad (3)$$

где N_{core} , N_{val} , N_{pair} – количество остовных, валентных электронов и неподеленных электронных пар.

Значения коэффициентов a , b , c , y в уравнениях (2-3) определяются методом наименьших квадратов по результатам расчетов полной энергии для соединений тестового набора в КМР и прямом методе расчета. Очевидно, что размер тестового набора играет существенную роль в определении указанных коэффициентов. На примере КМР МР4^{Δ(+f)}_{МР2/-311} нами определена зависимость инкрементов от размера тестового набора соединений (табл. 1)

Таблица 1

Зависимость САО и МО (кДж/моль) КМР МР4^{Δ(+f)}_{МР2/-311} от размера тестового набора при использовании инкремента A_c

Число соединений в наборе	САО	МО
5	7.90	35.2
10	2.40	16.0
20	0.90	8.5
30	0.86	8.0
40	0.83	7.6
50	0.81	7.3
66	0.80	7.0

По данным расчетов минимальным набором для определения инкрементов по уравнениям (2-3) следует считать набор из 20 молекул содержащих соединения различных классов.

СЕКЦИЯ «ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»

УДК 678.1; 544.7; 615.40:54

ПОЛИКОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРА N,N- ДИАЛЛИЛ-N,N-ДИМЕТИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА С МАЛЕИНОВОЙ КИСЛОТОЙ, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ИЗОНИАЗИДОМ

Чернышева Ю.С., Бабаев М. С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии Уфимского научного центра РАН,
г. Уфа, Россия

Комплексы полиэлектролитов с противоположно заряженными ПАВ – полимер-коллоидные комплексы (ПКК) - являются особым классом амфифильных соединений с переменным лиофильно-лиофобным балансом, который можно регулировать, изменяя состав комплекса [1]. ПКК представляют интерес для создания новых форм лекарственных средств.

Цель работы заключается в разработке методов функционализации сополимера N,N-диаллил-N,N-диметиламмоний хлорида с малеиновой кислотой (ПЭ) изониазидом и оценке влияния функционализации на размерные характеристики частиц полимер-коллоидных комплексов на его основе.

Функционализацию ПЭ изониазидом осуществляли методом полимераналогичных превращений. В результате исследований были найдены оптимальные условия проведения реакций с учетом стабильности, растворимости изониазиды и полноты прохождения реакций. Оптимальные условия: растворители – вода или метанол, температура реакции – 60 °С, время реакции – 5 часов. Состав и структура полученного полимерного конъюгата установлены с помощью методов элементного анализа и ЯМР-спектроскопии. Показано, что функционализация приводит к уменьшению лиофилизующей способности ПЭ. Модифицированные образцы ПЭ образуют частицы ПКК меньшего размера и относительно узким распределением, в отличие от комплексов на основе немодифицированного ПЭ.

Анализы (измерения, расчеты) выполнены на оборудовании ЦКП «Химия» ИОХ УНЦ РАН.

Литература

1. Вершина Ю.С., Шулевич Ю. В., Навроцкий А. В., Новаков И. А. // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2012. – Т. 5 (9). – С. 126. © Бабаев М.С., 2014 г.

УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ГЕЛЬ-ЭФФЕКТА НА КИНЕТИКУ ПРОЦЕССА РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Буракова А.О.¹, Шиян Д.А.¹, Терещенко К.А.¹,
Колесов С.В.², Янборисов В.М.³, Улитин Н.В.¹

¹Казанский национальный исследовательский
технологический университет, г. Казань, РФ

²Институт органической химии РАН УНЦ, г. Уфа, РФ

³Уфимский государственный университет экономики и сервиса, г. Уфа, РФ

Полиметилметакрилат (ПММА) широко используется для изготовления авиационных стекол реакционно-литьевым формованием (РЛФ). При РЛФ растёт вязкость радикально полимеризующейся массы, что приводит к аномальному росту скорости и степени полимеризации ПММА – это гель-эффект (ГЭ). Влияя на степень полимеризации, ГЭ влияет на оптические и прочностные свойства ПММА. Поэтому возникает вопрос, как учесть влияние ГЭ на кинетику процесса радикальной полимеризации метилметакрилата (ММА) и молекулярно-массовые характеристики (ММХ) ПММА? Это можно сделать, кинетически описав данный процесс, что и стало целью работы.

Кинетическое описание процесса синтеза ПММА (в схему включили инициирование, рост цепи (p), передачу цепи на ММА (tr), диспропорционирование ($disp$) и рекомбинацию (rec)) формализовали системой дифференциальных уравнений, описывающих временную динамику концентраций компонентов реакционной массы и ММХ ПММА. Данная система содержала неизвестные кинетические константы k_p , k_{tr} , k_{disp} , k_{rec} , которые были найдены в ходе решения обратной кинетической задачи (ОКЗ). На первом этапе ОКЗ нашли температурные зависимости констант k_p , k_{disp} , k_{rec} по полученным нами экспериментальным конверсионным кривым ММА (для учета ГЭ константа $k_t = k_{disp} + k_{rec}$ по аналогии с [1] задавалась в виде $k_t = k_{t0} \exp[-2(A_1U + A_2U^2 + A_3U^3)]$, где k_{t0} – константа без учета ГЭ, A_i – константы, U – конверсия ММА). На втором этапе ОКЗ по полученным нами экспериментальным данным о ММХ ПММА нашли температурную зависимость константы k_{tr} . На обоих этапах ОКЗ константы подбирались так, чтобы кинетическое описание наиболее точно воспроизвело конверсионные кривые ММА и ММХ ПММА при различных температурах.

Разработанное кинетическое описание процесса синтеза ПММА может найти применение для оптимизации технологических режимов РЛФ авиационных стекол.

Литература

1. Hui, A.W. Thermal polymerization of styrene at high conversions and temperatures. An experimental study // Journal of Applied Polymer Science, 1972, V. 16, pp. 749-756.

**АМФИФИЛЬНЫЕ СОПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ
МЕТИЛАКРИЛАТА И ХИТОЗАНА**Хайруллина А.И., Жукова А.Н., Шарипова Э.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При получении ранозаживляющих, высокосорбционных покрытий, материалов для имплантатов и подложек для выращивания клеток и тканей в тканевой инженерии, перспективным является создание гибридных материалов, в том числе криогелей на основе хитозана (ХТЗ) и его производных. Известно, что наиболее распространенным способом получения гелей и криогелей на основе ХТЗ, является сшивание его макромолекул глутаровым альдегидом. Однако, продукты взаимодействия глутарового альдегида с амино-группами ХТЗ достаточно токсичны. В связи с этим, целесообразно получение высокопористых криогелей ХТЗ в отсутствие сшивающих агентов. Одним из путей получения упруго-вязких систем является модифицирование гидрофильных макромолекул ХТЗ и его производных блоками цепей гидрофобных полимеров (полиметилакрилата (ПМА), полиметилметакрилата и т.п.) в условиях радикально-цепной сополимеризации. Подобные сополимеры относятся к так называемым ассоциативным полимерам. При использовании ассоциативных полимеров возможно создание вязкоупругой системы без введения дополнительного сшивателя только за счет взаимодействия гидрофобных участков цепей.

Использованы образцы ХТЗ со степенью деацетилирования 82% и М.м.=80000 а.е.м. Сополимеры ХТЗ и МА получали в водно-уксуснокислых растворах полисахарида ($w(\text{полимера})=3\%$) с концентрацией УК 6% в присутствии инициатора ДАК при 333-353 К в течение 4 ч. Степень модифицирования ХТЗ блоками ПМА составила от 23,2 до 41,4%. Вязкость растворов сополимеров (концентрация 1 г/дл) в 1%-ой уксусной кислоте измеряли на реометре Haake Mars III при 15-45 °С в режиме постоянного напряжения сдвига со скоростью сдвига от 0,1 до 100 с⁻¹. Установлено, что в случае образцов со степенью модифицирования, не превышающей 32%, увеличение вязкости при повышении концентрации раствора гораздо более значительное, чем для немодифицированного ХТЗ в тех же условиях. Причиной данного явления может служить только наличие гидрофобного взаимодействия цепей ПМА в водной среде, т.к. другие причины изменения вязкости растворов сополимеров не могут быть реализованы в данных условиях. Т.о., синтезированы образцы гибридных природно-синтетических сополимеров ХТЗ с МА и установлено наличие процессов самоорганизации в водных растворах сополимеров при определённых условиях. Это обуславливает возможность направленной организации объемной и поверхностной микроструктуры материалов на их основе.

© Хайруллина А.И., 2014 г.

**ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА КОМПОЗИЦИИ ПЕНООБРАЗОВАТЕЛЯ
НА ОСНОВЕ ФТОР-ПАВ И КСАНТАНОВОЙ КАМЕДИ**

Нигметзянов А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Имеющиеся в наличии на предприятиях пенообразователи обычно используются для тушения пожаров жидких углеводородов и не предназначены для тушения пожаров полярных жидкостей, т.к. многие кислородсодержащие органические вещества (спирты, кетоны) интенсивно разрушают пену. Известно, что составы универсальных пенообразователей для тушения полярных жидкостей содержат, помимо ПАВ, добавки синтетических и природных полимеров [1]. Принцип действия таких пенообразователей основан на образовании разделительной гелеобразной плёнки между пеной и горючей жидкостью в результате коагуляции содержащегося в пенном растворе полимера.

Установлено, что введение доступного коррозионно-неактивного природного полисахарида – ксантановой камеди – в количестве 0,1 – 0,5 масс. % в состав производимого на ООО «Завод Технохимсинтез» фторсодержащего плёнообразующего пенообразователя ПО 6ЦБФ даёт получение достаточно устойчивой пены на поверхности полярных жидкостей (изопропанола, ацетона). Поскольку, производимая на ООО «Завод Технохимсинтез» продукция поставляется в том числе в регионы с жесткими климатическими условиями, встал вопрос понижения температуры замерзания разработанной композиции.

Путем проведения опытов установлено, что этого можно добиться введением в состав композиции пенообразователя ПО 6ЦБФ с добавкой ксантановой камеди этиленгликоля в количестве 3-7 масс.%. В результате этого температура замерзания понизилась на 9°C, в том числе этиленгликоль способствует понижению коррозионной активности и улучшению совмещения компонентов композиции. Таким образом, предложена композиция универсального пенообразователя состава (масс. %): алкилсульфат натрия - 12; фторсодержащий пенообразователь типа AFFF/AR-LV – 2,5; ксантовая камедь – 0,3; этиленгликоль – 4; вода - остальное.

Список литературы

1. Шароварников А. Ф. Пенообразователи и пены для тушения пожаров. Состав. Свойства. Применение. М.: Пожнаука, 2005. – 335 с.

© Нигметзянов А.Р., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОДИФИКАЦИИ ХИТОЗАНА НА СКОРОСТЬ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА

Рихтер Н.А., Кулиш Е.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время в качестве полимера-носителя лекарственных препаратов внимание исследователей привлекает полимер природного происхождения хитозан (ХТЗ), обладающий широким спектром полезных свойств. Сложность создания полимерных систем с регулируемым выходом лекарственного вещества (ЛВ) заключается в том, что высвобождение ЛВ может происходить не только по диффузионному механизму, но и за счет процесса эрозии полимерной матрицы, поскольку получаемые хитозановые пленки растворимы в воде.

Пленочные образцы хитозана получали путем полива 2% раствора полимера в 1% уксусной кислоте на поверхность стекла с получением пленок ацетата хитозана. Водный раствор антибиотика добавляли к раствору ХТЗ непосредственно перед формированием пленок. В качестве лекарственного вещества использовали антибиотик аминогликозидного ряда амикацин сульфат. Содержание ЛВ в пленке составляло 0,1 моль/моль ХТЗ. Процесс термической модификации пленок проводили при $t=100^{\circ}\text{C}$ в интервале от 30 до 180 минут.

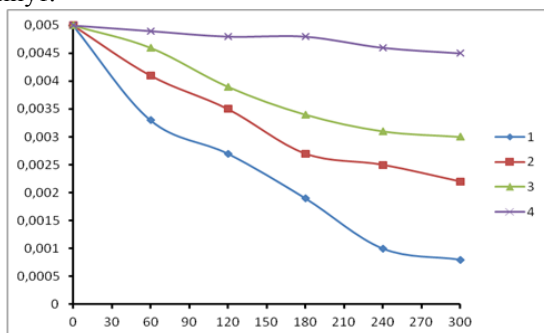


Рис. 1. Кривая потери массы пленок ХТЗ не прошедших (1) и прошедших термическую обработку в течении 30 (2), 60 (3) и 120 (4) минут от времени выдержки в воде.

В результате было установлено, что увеличение времени термической обработки сопровождается уменьшением растворимости пленки в воде и, как следствие уменьшается скорость высвобождения ЛВ из пленки.

КИНЕТИКА ПРОЦЕССА РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА ПО МЕХАНИЗМУ ОБРАТИМОЙ ПЕРЕДАЧИ ЦЕПИ

Набиев Р.Р., Улитин Н.В.

Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, РФ

Одним из современных способов получения полистирола (ПС) с контролируруемыми молекулярно-массовыми характеристиками (ММХ) является радикальная полимеризация, протекающая в условиях обратимой передачи цепи (RAFT-полимеризация в англоязычной литературе). Математическое описание кинетики процессов RAFT-полимеризации стирола, протекающих в присутствии различных RAFT-агентов, проведено не было, что сдерживает создание технологий для получения ПС данным методом. Поэтому цель работы – математическое описание кинетики процесса RAFT-полимеризации стирола в присутствии дибензилтретиокарбоната как RAFT-агента.

В кинетическую схему включались все известные к настоящему времени стадии. Кинетика полимеризации математически описывалась с применением кинетического подхода. Кинетические константы реакций веществами иницирования, термоиницирования, роста, передачи цепи на мономер и рекомбинации радикалов найдены из литературы [1-3]. Для определения кинетических констант реакций обратимой передачи цепи и перекрестного обрыва радикалов и интермедиатов была решена обратная кинетическая задача (константы подбирались так, чтобы модель наиболее точно воспроизвела кинетические кривые и ММХ ПС при различных температурах). ММХ ПС были выведены из модели кинетики с помощью производящих функций. Экспериментально показано, что предложенная модель адекватно воспроизводит ММХ ПС, полученного при различных температурах и конверсиях мономера. С помощью модели проведены численные эксперименты по исследованию влияния управляющих факторов (температура, начальные концентрации реагентов) на ММХ ПС.

Разработанное математическое описание кинетики процесса RAFT-полимеризации стирола (RAFT-агент – дибензилтретиокарбонат) может применяться при разработке промышленных способов синтеза ПС этим методом.

Исследования поддержаны грантом по Программе научно-технической модернизации и повышению квалификации молодых ученых России (2013-2014).

Литература

1. Черникова, Е.В. Контролируемая радикальная полимеризация стирола и н-бутилакрилата в присутствии третиокарбонатов // ВМС, 2007, Т. 49, № 2. сс. 208-221.
2. Кузуб, Л.И. Кинетика неизотермической полимеризации стирола // ВМС, 2005, Т. 47, № 10, pp.1791-1802.
3. Hui, A.W. Thermal polymerization of styrene at high conversions and temperatures. An experimental study // Journal of Applied Polymer Science, 1972, V. 16, pp. 749-756.

ПЛАСТИФИКАЦИЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА ДИОКТИЛТЕРЕФТАЛАТОМ

Рязанов К.С., Нафикова Р.Ф., Ахметханов Р.М.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

По объемам производства среди полимеров поливинилхлорид уверенно занимает третье место. Для придания поливинилхлориду необходимых физико-механических свойств используют пластификаторы, среди которых самым распространённым является диоктилфталат (ДОФ). В европейских странах диоктилфталат ограничен в использовании пластиков поливинилхлорида в связи с его токсичностью. В последние годы взамен диоктилфталат начали использовать его менее токсичный изомер диоктилтерефталат (ДОТФ) который имеет также меньшую летучесть, что придает пластифицированным материалам большую морозостойкость и износостойкость.

Представляет интерес проведение сравнительных исследований поведения ПВХ, пластифицированного ДОТФ в условиях термической деструкции и физико-механических показателей полимерных композиций пластифицированных ДОТФ на основе поливинилхлорида. В литературе не выявлена информация о влиянии пластификатора диоктилтерефталат на термическую устойчивость ПВХ и свойствах полимерных композиций, пластифицированных ДОТФ. На основании проведенных исследований было установлено, что ДОТФ в сравнении с ДОФ, в интервале концентраций до 60 масс. ч./100 масс. ч. ПВХ, в условиях термоокислительной деструкции при температурах 175 С⁰ и 190 С⁰ оказывает заметно большее ускоряющее влияние на процесс дегидрохлорирования полимера. Очевидно, ускоренный распад пластифицированного полимера объясняется более высокой окисляемостью ДОТФ. Продукты окисления пластификатора катализируют элиминирование хлористого водорода из поливинилхлорида.

Изучено влияние ДОТФ в сравнении с ДОФ на реологические свойства ПВХ по показателю текучести расплава (ПТР). Показано, что показатель текучести расплава ПВХ, пластифицированный ДОТФ незначительно превышает ПТР полимерной композиции, пластифицированный ДОФ. В лабораторных условиях методом вальцевания получена полимерная композиция кабельного пластиката на основе ПВХ, пластифицированный ДОТФ. Показано, что кабельные пластикаты, полученные с пластификатором ДОТФ по основным физико-механическим показателям (прочность при разрыве, относительное удлинение, удельное объемное электрическое сопротивление температура хрупкости, ПТР) практически не отличаются от аналогичных показателей пластиков с ДОФ и соответствуют установленным техническим требованиям.

Таким образом, можно констатировать, что ДОТФ является эффективным пластификатором для ПВХ, однако при разработке полимерной композиции с учетом ее последующей термомеханической переработки в экструдере и эксплуатации изделий при высоких температурах необходимо учитывать способность пластификатора к повышенной окисляемости, что предполагает применение мер по дополнительной стабилизации полимерной композиции.

©Рязанов К.С., 2014 г.

УДК 678.1; 544.7; 615.40:54

**ПОЛИКОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ
ПОЛИ-N,N-ДИАЛЛИЛ-N,N-ДИМЕТИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА,
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ
КИСЛОТОЙ**

Бабаев М.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органической химии Уфимского научного центра РАН,
г. Уфа, Россия

Среди полимерных частиц носителей лекарственных средств (ЛС) особый интерес вызывают частицы полимер-коллоидных комплексов (ПКК), которые образуются в результате самоорганизации в полимерных системах, содержащих электростатически комплементарные молекулы полиэлектролитов и ионогенных ПАВ.

Цель проведенного исследования – изучение влияния модификации поли-N,N-диаллил-N,N-диметиламмоний хлорида (ПАМАХ) ацетилсалициловой кислотой на процесс формирования ПКК с додецилсульфатом натрия (ДДС) и их размеры частиц. В работе проведена модификация ПАМАХ ацетилсалициловой кислотой, получены образцы с различным содержанием модифицированных звеньев (10, 30 и 44 мол.%). Методами турбидиметрического титрования и лазерной дифракции/рассеяния исследовано образование частиц ПКК на основе ПАМАХ и его модифицированных форм. Показано, что модификация полиэлектролита приводит к уменьшению его лиофилизирующей способности, что, в конечном счете, приводит к увеличению размеров образующихся частиц ПКК.

Анализы (измерения, расчеты) выполнены на оборудовании ЦКП «Химия» ИОХ УНЦ РАН.

© Бабаев М.С., 2014 г.

CFD-МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ПОЛИБУТАДИЕНА НА ТИТАНОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Шакиров Р.А.¹, Зиганшина А.С.¹, Набиев Р.Р.¹, Терещенко К.А.¹,
Захаров В.П.², Улитин Н.В.²

¹Казанский национальный исследовательский
технологический университет, г. Казань, РФ

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, РФ

Несмотря на то, что полибутадиен (ПБ) является одним из самых крупнотоннажных каучуков, процесс получения ПБ в реакторах смешения изучен лишь экспериментально [1]. Имеются попытки теоретического описания кинетики процесса [2], но макрокинетика никогда не рассматривали. А ведь именно гидродинамическая обстановка и теплообмен определяют поля концентраций и температур внутри реактора, а значит, и молекулярно-массовые характеристики (ММХ) полимера. Поэтому цель работы – создание макрокинетической модели процесса синтеза ПБ (катализатор – $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$, растворитель – толуол, температура – 298 К) в реакторе объемного смешения. Макрокинетическую модель составили система кинетических уравнений (описывает на основе кинетической схемы изменение концентраций компонентов во времени), система уравнений Навье-Стокса (описывает гидродинамику и теплообмен реактора) и уравнения К-ε модели турбулентности (описывают возможные турбулентные пульсации). Макрокинетическая модель для лабораторного реактора объемом 0.5 л была воплощена в CFD-пакете (пакет вычислительной гидродинамики) ANSYS FLUENT. Проверка адекватности макрокинетической модели проводилась сопоставлением экспериментальных и рассчитанных ММХ ПБ – расхождение составило 8%.

В дальнейшем планируется развить полученную макрокинетическую модель с точки зрения рассмотрения физического (турбулентного, ультразвукового) воздействия на каталитический комплекс и на реакционную массу. Это представляет большой интерес для раскрытия теоретических основ процесса синтеза ПБ в таких условиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-4973.2014.8 и гранта РФФИ № 14-03-97027.

Литература

1. Mingaleev, V.Z. Kinetic nonuniformity of a titanium catalyst in the polymerization of butadiene: effect of intensifying stirring of the reaction mixture // Journal Polymer Science. 2008. V. 50. № 11. pp. 351-355.
2. Yanborisov, E.V. Calculation of molecular weight distributions of polymers synthesized on multisite catalytic systems // Doklady Chemistry. 2010. V. 432. № 1. pp. 148-150.

УДК 541(64 + 127)

КИНЕТИКА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ИЗОПРЕНА НА НЕОДИМОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ В РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ

Широких Е.Б.¹, Захаров В.П.², Терещенко К.А.¹, Улитин Н.В.¹

¹Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, РФ

²Башкирский государственный университет, г. Уфа, РФ

Тенденция последних лет – повышение требований к качеству синтетических каучуков. Чтобы получать каучуки с высокими молекулярными массами и, как следствие, высокими прочностными и вязкостными свойствами, стали использовать новые каталитические комплексы (КК). В частности, для получения полиизопрена (ПИ) все чаще применяют неодимовые КК. Главная проблема внедрения этих КК повсеместно в производство ПИ заключается в отсутствии методологии управления его молекулярно-массовыми характеристиками (ММХ) и свойствами, зависящими от них. Простейший вариант создания такой методологии – моделирование кинетики процесса синтеза ПИ, реализуемого в реакторе идеального смешения. Поэтому целью работы стало моделирование кинетики процесса полимеризации изопрена (ИП) на $\text{NdCl}_3 \times n(\text{i-C}_3\text{H}_7\text{OH})/\text{Al}(\text{i-C}_4\text{H}_9)_3$ -пиперилен (растворитель – изопентан, температура – 25°C).

Считая инициирование мгновенным, составили кинетическую схему процесса: рост цепи, гибель активных центров (АЦ), переход типов АЦ друг в друга и передача цепи на ИП. На основе схемы с применением закона действующих масс и метода производящих функций получили кинетическую модель процесса – систему дифференциальных уравнений, описывающую конверсионные кривые ИП и ММХ ПИ. В модели были неизвестны все кинетические константы. Для их определения решили обратную кинетическую задачу (ОКЗ). На первом этапе ОКЗ по экспериментальным данным о временной динамике АЦ и конверсионным кривым ИП рассчитали кинетические константы реакций роста цепи, перехода типов АЦ друг в друга и гибели АЦ. На втором этапе ОКЗ по экспериментальным зависимостям средних молекулярных масс ПИ от времени определили кинетические константы реакций передачи цепи на молекулы ИП. Затем на модели провели численный эксперимент – установленные закономерности совпали с представлениями о влиянии начальных концентраций КК и мономера на среднечисловую молекулярную массу полимера, синтезированного ионно-координационной полимеризацией. Таким образом, можно полагать, что разработанная модель станет теоретическим фундаментом методологии управления ММХ ПИ.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект 14-33-50025).

**ВЛИЯНИЕ АНТИБИОТИКОВ АМИНОГЛИКОЗИДНОГО РЯДА
НА ПРОЦЕСС СОРБЦИИ ВОДЫ ХИТОЗАНОВЫМИ ПЛЕНКАМИ**

Шуршина А.С., Лаздин Р.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изучение процесса диффузии воды в полимерную матрицу необходимо для создания полимерных пленок медицинского назначения с контролируемым выходом лекарственного препарата, поскольку необходимым условием, обеспечивающим диффузионный транспорт лекарственного вещества из полимерной матрицы, является ее набухание в воде. Целью данной работы стало изучение закономерностей процесса сорбции воды в лекарственных полимерных пленках. В качестве матрицы для иммобилизации лекарственных препаратов использован полисахарид природного происхождения хитозан, в качестве лекарственного средства – антибиотики аминогликозидного ряда (амикацин сульфат и гентамицин сульфат).

Сорбционные эксперименты проводили эксикаторным методом при температуре 36°С при 100% влажности. Кинетика набухания пленки описывается уравнением:

$$m_t/m_\infty = kt^n,$$

где m_∞ – относительное количество воды в равновесно набухшем пленочном образце, k – константа, связанная с параметрами взаимодействия полимер – диффундирующее вещество, n – показатель, характеризующий механизм переноса вещества. Если транспорт вещества осуществляется по классическому диффузионному механизму, то показатель n должен быть близок к 0.5.

Параметр n , определенный для пленки чистого ХТЗ, равен 0.63 (т.е. > 0.5), что характерно для полимеров, находящихся ниже температуры стеклования. Введение лекарственных веществ приводит к тому, что значения показателя n становятся существенно меньше 0.5, что характерно для аномальной, так называемой «псевдофиковской», диффузии. Важно то, что количество ЛВ, прочно связанного с полимерной матрицей коррелирует как с показателем n , характеризующим механизм транспорта воды в пленку, так и со значением относительного количества воды в равновесно набухшем пленочном образце m_∞ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по теме "Разработка физико-химических основ создания новых полимерных материалов биомедицинского назначения с контролируемыми сорбционными, реологическими и структурно-физическими характеристиками на основе природных и синтетических полимеров».

© Шуршина А.С., Лаздин Р.Ю., 2014 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ

В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ АНИОННЫХ ПАВ

Алексеев С.В., Усманова Л.Р., Матвиенко Е.О., Ахметшин Б.С.,

Прочухан К.Ю., Прочухан Ю.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Использование анионных поверхностно-активных веществ (АПАВ) для увеличения нефтеотдачи пластов является повсеместной практикой в нефтедобывающей промышленности. Одним из критериев определения эффективности нефтеотдачи является нефтеотмывающая способность ПАВ, а для определения наилучшей нефтеотмывающей способности ПАВ нужно определить критическую концентрацию мицеллообразования (ККМ). Этот факт стимулирует интерес к исследованию мицеллярных свойств АПАВ. Целью настоящей работы является исследование процесса образования мицелл разработанного нами экологически безопасного растительного происхождения АПАВ "Р-1" в дистиллированной воде. Исследование проводилось методом измерения размера мицелл для определения критической концентрации мицеллообразования, с целью определения эффективной концентрации ПАВ с наилучшей нефтеотмывающей способностью. Для измерения размера мицелл использовался дифракционный лазерный гранулометрический анализатор SHIMADZU модели SALD-7101.

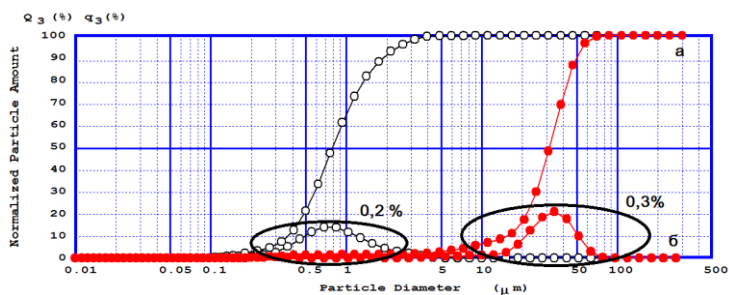


Рис.1 Кривые интегрального – (а) и дифференциального – (б) распределения частиц по размерам АПАВ Р-30 в растворе концентрацией 0,2 и 0,3%.

Как видно из рисунка 1 при увеличении концентрации водного раствора АПАВ Р-1 от 0,2 до 0,3% масс. происходит резкое увеличение размера мицелл, что свидетельствует о критической концентрации мицеллообразования. Таким образом, подтверждается наше предположение – ККМ раствора АПАВ Р-1 находится в диапазоне 0,2-0,3 % масс.

© Алексеев С.В., Усманова Л.Р., Матвиенко Е.О., Ахметшин Б.С.,
Прочухан К.Ю., Прочухан Ю.А., 2014 г.

**КИНЕТИКА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ БУТАДИЕНА
(КАТАЛИЗАТОР – $\text{TiCl}_4\text{-Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$)**

Зиганшина А.С.¹, Набиев Р.Р.¹, Захаров В.П.², Шакиров Р.А.¹,
Терещенко К.А.¹, Улитин Н.В.¹

¹ Казанский национальный исследовательский
технологический университет, г. Казань, РФ

² Башкирский государственный университет, г. Уфа, РФ

На сегодняшний день актуально проведение исследований по изучению влияния условий синтеза (начальные концентрации компонентов, температура и т.д.) на молекулярно-массовые характеристики (ММХ) такого крупнотоннажного полимера, как полибутадиен (ПБ). В последнее время для решения подобных задач все большую популярность приобретает метод математического моделирования. Поэтому целью настоящей работы стала разработка модели кинетики процесса получения ПБ в присутствии $\text{TiCl}_4\text{-Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$ как катализатора в среде толуола.

В кинетическую схему процесса синтеза ПБ были включены реакции роста цепей, передачи цепей на мономер и алюминийорганическое соединение ($\text{Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$), дезактивация активных центров (АЦ) [1]. Известно [1], что в полимеризационной системе бутадиена в присутствии $\text{TiCl}_4\text{-Al}(i\text{-C}_4\text{H}_9)_3$ как катализатора присутствует пять типов АЦ. Кинетика рассматриваемого процесса математически описывалась с использованием кинетического подхода. Кинетические константы всех элементарных реакций были взяты из литературы [1]. ММХ ПБ были определены из модели кинетики с применением производящих функций [2]. Адекватность модели кинетики доказали сопоставлением экспериментальных и рассчитанных ММХ ПБ от времени – расхождение составило 10%.

Таким образом, нами была разработана адекватная экспериментальным данным модель кинетики процесса синтеза ПБ. Численные эксперименты на модели кинетики позволяют определить влияние условий проведения процесса на ММХ получаемого полимера.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-4973.2014.8 и гранта РФФИ № 14-03-97027.

Литература

1. Yanborisov, E.V. Calculation of molecular weight distributions of polymers synthesized on multisite catalytic systems // Doklady Chemistry. 2010. V. 432. № 1. pp. 148-150.

2. Kumar, A. Fundamentals of polymer engineering, revised and expanded, New York: Marcel Dekker, 2003, 712 p.

© Зиганшина А.С., Набиев Р.Р., Захаров В.П., Шакиров Р.А.,
Терещенко К.А., Улитин Н.В., 2014 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК

Шуршина А.С., Кулиш Е.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время для создания полимерных лекарственных форм, способных к биоразложению, используют три группы полимеров, среди которых природные полисахариды. Наибольший интерес из природных полисахаридов представляет хитозан, обладающий рядом уникальных свойств, среди которых бактериостатичность, высокая сорбционная способность, биосовместимость, способность усиливать регенеративные процессы при заживлении ран, способность к пленкообразованию и т.д. При изучении транспортных характеристик полимерных лекарственных форм необходимым представляется изучение морфологии пленки. Поскольку высвобождение лекарственного вещества (ЛВ) будет определяться структурой пленки.

Структуру поверхности пленок оценивали методом лазерной сканирующей микроскопии на приборе LSM-5-Exciter (Carl Zeiss, Germany). Разрешение по шкале «ХУ»-100 нм, по шкале «Z»-10 нм

Данные лазерной сканирующей микроскопии свидетельствуют о том, что все пленочные образцы, полученные удалением растворителя, имеют рельефную поверхность и развитую систему микропор. У исходной пленки ХТЗ, полученной из раствора в уксусной кислоте, заметна сильная шероховатость и пористость поверхности. Часть пор носит сквозной характер, часть – замкнутый. Обращает на себя внимание значительная разница в шероховатости поверхности, контактирующей с поверхностью подложки (шероховатость невелика) и воздуха (шероховатость существенно больше). При введении в пленку ЛВ общая шероховатость поверхности, в существенной мере уменьшается. Более того, уменьшается и различие в шероховатости нижней и верхней поверхностей. Например, реальная площадь поверхности пленки исходного ХТЗ вследствие шероховатости и пористости поверхности в 4.8 раз больше теоретической, отожженного ХТЗ – в 4 раза. В случае пленок ХТЗ–ЛВ расхождения в значениях полной площади поверхности пленки меньше и составляют 2.9 и 3.1 раза для системы ХТЗ–АМС и ХТЗ–ЦФЗ, соответственно.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ по теме "Разработка физико-химических основ создания новых полимерных материалов биомедицинского назначения с контролируемыми сорбционными, реологическими и структурно-физическими характеристиками на основе природных и синтетических полимеров».

УДК 541.64

БИОДЕСТРУКЦИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА НЕСПЕЦИФИЧЕСКИМ ФЕРМЕНТОМ ГИАЛУРОНИДАЗОЙ

Туктарова И.Ф., Лаздин Р.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пленочные материалы на основе хитозана представляют большой интерес для использования их в качестве защитных материалов, в том числе при лечении хирургических, ожоговых и долго незаживающих ран. Именно скорость биодеструкции хитозана (ХТЗ) под действием ферментов человеческого организма будет определять срок службы пленочного материала на раневой поверхности. Включение в пленку лекарственного препарата, например, антибиотика аминогликозидного ряда амикацина сульфата (АМС), может привести к изменению ферментативной устойчивости пленочного материала. Таким образом, актуальной представляется задача изучения кинетических параметров процесса ферментативной деструкции пленочных образцов ХТЗ, в том числе и с включенными в пленку лекарственными препаратами.

Для проведения эксперимента, моделирующего процесс ферментативной деструкции ХТЗ на раневой поверхности, пленочный образец ХТЗ с линейными размерами a и b помещали на подложку, смоченную раствором ферментного препарата в 1% уксусной кислоте, и выдерживали в течение определенного времени при постоянной температуре (36⁰С). Толщину пленок поддерживали постоянной, равной 100 мкм. В качестве ферментного препарата использовали гиалуронидазу, концентрация ферментного препарата составляла 0,3 г/л.

Ранее было показано, что выдержка раствора ХТЗ в присутствии ферментного препарата сопровождается закономерным уменьшением характеристической вязкости ХТЗ, что свидетельствует об уменьшении его молекулярной массы, вследствие протекания процесса ферментативной деструкции. Добавление АМС в раствор ХТЗ не приводит к принципиальному изменению вида кинетической кривой (рис.1), тем не менее, наличие АМС вносит некоторые особенности в зависимость изменения характеристической вязкости ХТЗ от времени его контактирования с раствором ферментного препарата. Можно отметить сходный вид кинетических кривых рисунка 1 a и b для случая ферментативной деструкции растворов и пленок ХТЗ, однако, с топахимической точки зрения эти реакции существенно различны. При проведении ферментативной деструкции в растворе можно в первом приближении принять равновероятной доступность любой гликозидной связи любой цепи для реакции с ферментом. Вместе с тем, для пленочных образцов такая реакция возможна только для звеньев, расположенных на поверхности пленки, контактирующей с раствором фермента. При этом,

доля поверхностных звеньев будет весьма мала по сравнению с общим числом гликозидных связей.

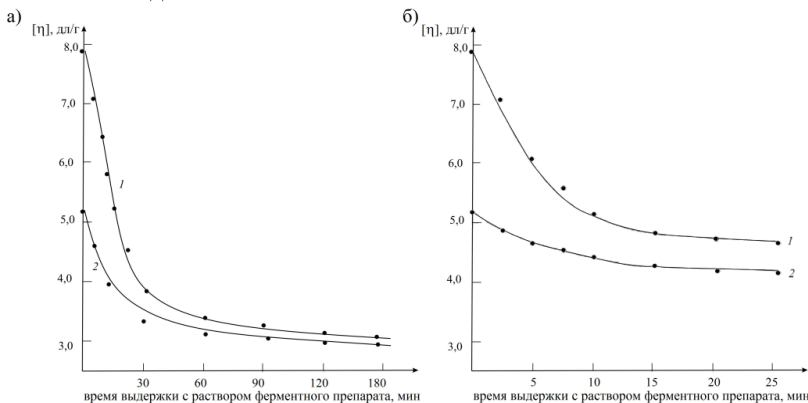


Рис. 1. Зависимость характеристической вязкости ХТЗ, выделенного из раствора (а) и из пленочных образцов (б) в отсутствии (1) и в присутствии (2) АМС от времени выдержки с раствором ферментного препарата.

В самом первом приближении задачу описания кинетики деструкции пленки можно представить как определение скорости гидролиза в растворе с концентрацией ХТЗ c_s (г/дл), соответствующей концентрации поверхностных звеньев в объеме раствора фермента, т.е.:

$$c_s = \frac{m_s}{V_p} \quad (1)$$

Если исходить из того, что константа скорости распада гликозидной связи на поверхности пленки имеет то же значение, что и в растворе полимера, то значение начальной скорости ферментативной деструкции V_0 в пленочном образце может быть рассчитано как:

$$V_0 = \frac{V_{\max}}{K_m} \cdot c_s \quad (2)$$

Значения V_0 , рассчитанные по формуле (2) с учетом шероховатости пленочных образцов ХТЗ, находятся в хорошем соответствии со значениями, рассчитанными по формуле

$$V_0 = C_{\text{фр}} \cdot K^{1/\alpha} \cdot \frac{[\eta]_t^{-1/\alpha} - [\eta]_0^{-1/\alpha}}{t} \quad (3)$$

для определения значений V_0 при деструкции в растворе.

Таким образом, установлено, что ферментативная деструкция пленочных образцов хитозана в присутствии амикацина, полученных из раствора, подчиняется тем же кинетическим закономерностям, что и гидролиз полимера в растворе. © Туктарова И.Ф., Лаздин Р.Ю., 2014 г.

УДК 547.538.141:541.64

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА
КОНТРОЛИРУЕМОЙ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА
(МЕХАНИЗМ – ОБРАТИМАЯ ПЕРЕДАЧА ЦЕПИ),
ПРОВОДИМОЙ В РЕАКТОРЕ СМЕШЕНИЯ**

Улитин Н.В., Набиев Р.Р.

Казанский национальный исследовательский
технологический университет, г. Казань, РФ

Промышленный синтез полистирола (ПС) осуществляется в реакторах смешения. Общеизвестно, что молекулярно-массовые характеристики (ММХ) полимера связаны с условиями процесса его синтеза (начальными концентрациями и скоростью подачи реагентов, температурой, гидродинамической обстановкой в реакторе и т.д.). Однако экспериментальное определение таких связей требует больших экономических, ресурсных и энергетических затрат. Поэтому настоящая работа посвящена теоретическому исследованию принципиальной возможности реализации в реакторе смешения одного из самых перспективных видов контролируемой радикальной полимеризации (КРП), а именно, КРП с обратимой передачей цепи (на примере полимеризации стирола в присутствии дибензилтретиокарбоната).

В качестве инструмента для создания модели процесса использовали пакет вычислительной гидродинамики ANSYS FLUENT, который предоставляет обширные возможности для анализа совместного протекания процессов химического превращения, массо- и теплообмена.

Входящие в ANSYS FLUENT стандартные модели процессов химических превращений не пригодны для моделирования реакции полимеризации. Поэтому был применен следующий подход. Кинетическая схема процесса записывалась (с использованием метода статистических моментов) в виде системы балансных дифференциальных уравнений, описывающих мгновенные скорости изменения концентраций каждого из компонентов. Далее, полученная система уравнений в виде пользовательской функции (UDF) интегрировалась в программный пакет ANSYS FLUENT и дополнялась системой уравнений Навье-Стокса.

Адекватность модели доказали путем сравнения теоретически и экспериментально полученных ММХ ПС, синтезируемого в лабораторном реакторе.

Разработанная модель открывает широкие перспективы в плане анализа различных вариантов технологической реализации процесса КРП стирола с обратимой передачей цепи.

Исследования поддержаны грантом по Программе научно-технической модернизации и повышению квалификации молодых ученых России (2013-2014).

© Улитин Н.В., Набиев Р.Р., 2014 г.

**ВЛИЯНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА
СКОРОСТЬ ДЕСТРУКЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ
ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК**

Тимербаева Д.А., Туктарова И.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При использовании полисахарида природного происхождения хитозана (ХТЗ) в качестве материала для терапии хирургических ран и ожогов, продукты его биоразложения не вызывают негативную реакцию организма, а также проявляют ярко выраженную биологическую активность.

В данной работе исследовали влияние изотермического отжига на скорость деструкции лекарственных хитозановых пленок для лечения ожоговых ран, полученных из уксуснокислого раствора ХТЗ. В качестве лекарственного вещества (ЛВ) использовали антибиотик амикацин сульфат (АМС). Содержание ЛВ составляло 0,1 моль/моль ХТЗ. Процесс изотермического отжига проводили при $T=100^{\circ}\text{C}$ в интервале от 30 до 120 минут. Для моделирования процесса биодеструкции образец пленки ХТЗ помещали в раствор ферментного препарата и выдерживали в течение 30 мин. при $T=36^{\circ}\text{C}$. В качестве ферментного препарата использовали фермент гиалуронидазу (торговое название «Лириза» производства ЗАО «Микроген», Москва). Выбор гиалуронидазы в качестве ферментного препарата обусловлен тем, что данный фермент присутствует на раневой поверхности и способен вызывать разрыв бета-гликозидной связи в ХТЗ. Концентрация ферментного препарата составляла 0,1 0,2 и 0,3 г/л.

В результате эксперимента было установлено, что чем выше концентрация ферментного препарата в растворе, тем быстрее происходит деструкция ХТЗ пленки, и, как следствие, ускоряется выход АМС. Если в случае использования водного раствора, полный выход лекарственного вещества из хитозановой пленки происходит за 4 часа, то при высокой концентрации фермента (0,3 г/л) полный выход осуществляется за 1 час. Вероятно, причина данного явления заключается в том, что выход ЛВ в воду осуществляется в основном за счет диффузии, в то время, как протекание ферментативной деструкции является дополнительным источником выхода лекарственного препарата. Также было показано, что проведение изотермического отжига сопровождается уменьшением скорости высвобождения лекарственного препарата из пленки.

© Тимербаева Д.А., Туктарова И.Ф., 2014 г.

УДК 661.183.544.732.212

ИЗУЧЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ СУКЦИНАТА ХИТОЗАНА И КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ЛИОФОБНЫХ ЗОЛЕЙ

Валиев Д.Р., Аскарлова А.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Полимер-коллоидные комплексы (ПКК) представляют собой продукт взаимодействия макромолекул полимера и коллоидных частиц, в результате которого исходные компоненты системы приобретают новые свойства. Результатом контактного взаимодействия ПКК друг с другом может быть изменение агрегатного состояния системы – флокуляция или стабилизация.

Для создания гибридных композитных материалов нами синтезированы ПКК на основе слабого полиэлектролита сукцината хитозана (СХТЗ) и заряженных неорганических наночастиц, например, иодида или хлорида серебра, которые в определённых условиях получения несут на себе отрицательный заряд. Варьирование соотношения компонентов в смеси полиэлектролит-неорганическая коллоидная частица и их концентрации позволит получить наноразмерные комплексы, из которых будут получены полимерные матрицы для регенеративной медицины определенной структуры. Добавление наноразмерных коллоидных неорганических частиц к раствору полимера достаточно высокой концентрации (находящегося выше точки кроссовера, в области полуразбавленных растворов) будет приводить к образованию сетки межмолекулярных связей во всем объеме раствора. В том случае, если формируемые полимер-коллоидные гели будут вести себя как упругие тела, из них может быть сформирован двухмерный или трехмерный матрикс с организованной структурой.

Установлено, что в случае взаимодействия отрицательно заряженных коллоидных частиц золя AgI с макромолекулами СХТЗ, несущими положительный заряд, при мольном соотношении $[Ag^+]:$ звено полимера, составляющем от 0,25:1 до 0,75:1, образуются растворимые ПКК. Об этом говорит совпадение оптической плотности золя AgI и смесей раствора полимера и золя AgI. При эквимольном соотношении данные ПКК становятся нерастворимыми. Размер частиц полученных ПКК находится в пределах от 110 до 375 Нм.

Таким образом, предложен способ получения устойчивых ПКК на основе смесей растворов СХТЗ с золями AgI. Наноструктурированные гели на основе полученных ПКК перспективны для создания гибридных нанокompозитов, применяемых в качестве полимерных матриц в тканевой инженерии и заместительной хирургии.

© Валиев Д.Р., 2014 г.

**ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ ГИДРОЛИЗ ПЛЕНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ
ХИТОЗАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ГИАЛУРОНИДАЗЫ**

Валиуллина И.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время хитозан (ХТЗ) является перспективным материалом для использования хитозана при создании биodeградируемых полимерных носителей фармацевтических препаратов, например в виде гелей, пленок. Биodeградация хитозановых материалов на раневой поверхности осуществляется под действием неспецифических ферментов человеческого организма (например, гиалуронидазы). В связи с этим целью работы стало изучение ферментативного гидролиза пленочного образца ХТЗ для определения кинетических характеристик.

Для исследования был взят образец ХТЗ с молекулярной массой 113000 Да. В качестве ферментного препарата была использована гиалуронидаза. Концентрация ферментного препарата C_{ϕ} составляла 0,3 г/л. В качестве растворителя была использована 1% уксусная кислота. Концентрация ХТЗ в растворе для проведения процесса ферментативного гидролиза C_r варьировалась от 0,1 до 5 г/дл. О процессе ферментативного гидролиза судили по падению характеристической вязкости $[\eta]$. Характеристическую вязкость ХТЗ в растворе уксусной кислоты определяли, пользуясь методом Иржака и Баранова, по тангенсу угла наклона на начальном участке кривой зависимости $\ln(\eta_{\text{отн}}/c)$. Для определения значений исходной характеристической вязкости ХТЗ $[\eta]_0$ использовался раствор с концентрацией $c=0,05$ г/дл. После выдерживания растворов полимера с ферментом в течении определенного времени процесс ферментативного гидролиза гасился кипячением исходного раствора в течении 30 минут на водяной бане. Далее из раствора исходной концентрации C_r готовился разведение раствор для определения характеристической вязкости с концентрацией $c = 0,05$ г/дл. Начальная скорость ферментативного гидролиза хитозана V_0 оценивалась на линейном участке по падению его характеристической вязкости $[\eta]$ и рассчитывалась по формуле: $V_0 = C_r K^{1/\alpha}([\eta]^{-1/\alpha} - [\eta]_0^{-1/\alpha})/t$.

В результате проведенной работы были определены кинетические характеристики активности фермента – значения констант в уравнении Михаэлиса-Мэнтен, по величине которых можно судить о скорости ферментативного превращения субстрата изучаемым ферментом. Достаточно большое значение K_m , очевидно, связано с тем, что фермент гиалуронидаза не является специфическим ферментом для ХТЗ.

© Валиуллина И.И., 2014 г.

УДК 547.995.15'491.6.057

СОЗДАНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ДИАЛЬДЕГИДА ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ И СУКЦИНАТА ХИТОЗАНА

Вильданова Р.Р., Сигаева Н.Н., Куковинец О.С., Колесов С.В.

Институт органической химии Уфимского научного центра Российской академии наук, г. Уфа, Россия

Одним из актуальных направлений в медицинской химии в настоящее время является создание лекарственных форм (гидрогелей, пленок, комплексов) на основе биосовместимых и биоразлагаемых полимеров, таких как, гиалуроновая кислота (ГК) и хитозан (ХТЗ).

Нами проведена модификация высокомолекулярной ГК ($M_{s[\eta]} = 1\ 600$ тыс.) периодатом натрия при эквимольном соотношении исходных компонентов. Методом ИК- и ЯМР-спектроскопии показано окисление гидроксильных групп ГК до альдегидных. Показано, что степень модификации зависит от времени проведения реакции и достигает 27% (24 ч).

Пять марок хитозана (M_z или $M_{s[\eta]}$ от 36 до 550 тыс; степень деацетилирования от 74 до 83.6%) модифицировали янтарным ангидридом (ЯА) при соотношении ХТЗ : ЯА = 1 : 10 в течение 24 ч. Получены водорастворимые продукты со степенями модификации от 52 до 78% в зависимости от молекулярной массы исходного хитозана и его степени деацетилирования. Введение карбоксильных групп в макромолекулы ХТЗ подтверждено методом ЯМР-спектроскопии.

Для получения гидрогелей модифицированные полимеры по отдельности растворяли в фосфатно-буферном растворе ($pH=7.4$) и сливали при различных соотношениях. Процесс формирования гидрогеля зависел от степени модификации и концентрации полимеров. Вероятно, гелеобразование происходит за счет взаимодействия аминогрупп ХТЗ и альдегидных групп ГК с образованием связи основания Шиффа $-C=N$ (рис. 1).

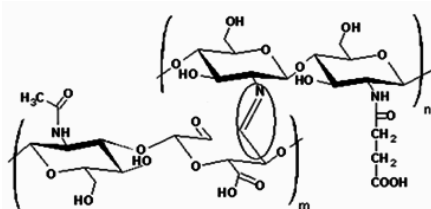


Рис. 1. Структура шитой сетки на основе диальдегида гиалуроновой кислоты и сукцината хитозана

© Вильданова Р.Р., Сигаева Н.Н., Куковинец О.С., Колесов С.В., 2014 г.

УДК 532.517.2

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ПОЛИБУТАДИЕНА В
ПРИСУТСТВИИ ТИТАНОВОГО КАТАЛИЗАТОРА
В ОБЪЕМНОМ ПОЛИМЕРИЗАТОРЕ**

Зиганшина А.С., Шакиров Р.А., Набиев Р.Р.,

Терещенко К.А., Захаров В.П., Улитин Н.В.

Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

Гидродинамический режим и теплообмен определяют поля концентраций и температур внутри реактора, а значит, и молекулярные характеристики получаемого полимера. В работе разработана макрокинетическая модель процесса синтеза полибутадиена в реакторе объемного смешения. Макрокинетическая модель представляет собой совокупность системы кинетических уравнений (описывают процессы химических превращений), системы уравнений Навье-Стокса и уравнений К-ε модели турбулентности (описывают теплообмен и гидродинамику реактора). В кинетическую схему процесса включены все известные к настоящему времени элементарные реакции процесса синтеза полибутадиена в присутствии $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$. Принято, что в полимеризационной системе присутствует пять типов активных центров. Разработанная макрокинетическая модель реализована в CFD-пакете ANSYS Fluent. Адекватность разработанной макрокинетической модели проводили методом сравнения расчетных и экспериментальных зависимостей конверсии бутадиена от времени, а также средних молекулярно-массовых характеристик (среднечисленная и среднемассовая молекулярные массы) от конверсии бутадиена. Проверка проводилась на основе критерия Фишера, который представляет собой отношение дисперсии расхождения между экспериментальными и рассчитанными значениями к дисперсии экспериментальных значений.

Анализ полученных результатов свидетельствует о том, что для всех рассматриваемых параметров рассчитанные значения критерия Фишера не превышают табличных значений, что свидетельствует об адекватности построенной макрокинетической модели. Полученная модель позволяет выявить влияние технологических условий проведения процесса на молекулярные характеристики получаемого полимера.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МД-4973.2014.8, РФФИ (проект 14-03-97027, 14-33-50025).

© Зиганшина А.С., Шакиров Р.А., Набиев Р.Р.,
Терещенко К.А., Захаров В.П., Улитин Н.В., 2014 г.

**ИЗУЧЕНИЕ РАСТВОРОВ ХИТОЗАНА С ВКЛЮЧЕННЫМ
АНТИБИОТИКОМ АМИКАЦИН СУЛЬФАТОМ**

Каримова Р.Д., Хуснутдинова А.Н.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

Природный полисахарид хитозан представляет огромный интерес для создания биоразлагаемых материалов. Благодаря биосовместимости с тканями человека, низкой токсичности, способности усиливать регенеративные процессы при заживлении ран, биodeградируемости хитозан представляет особый интерес для медицины. Растворимость хитозана в водных растворах кислот, например, уксусной, существенно облегчает его переработку в пленки и другие изделия. В последнее время исследователи интересуются изучением комплексов биополимера хитозана (ХТЗ) с лекарственными препаратами. Это связано с тем, что ХТЗ не только пролонгирует действие лекарственных средств, снижает их токсичность, усиливает лечебный эффект, но и обеспечивает эффективную доставку препаратов к органам-мишеням. Исследование взаимодействия хитозана с антибиотиком аминокликозидного ряда: амикацин сульфатом (АМС) стало целью данной работы. В качестве метода был выбран реологический метод.

Изучались системы ХТЗ – АМС в соотношении 1-0,01; 1-0,05; 1-0,1. Кривые течения исходного 2%-ного раствора ХТЗ в 1% уксусной кислоте и растворов ХТЗ-антибиотик представляют собой типичные для полимерных систем неполные кривые течения неньютоновских жидкостей. Исследование температурной зависимости вязкости растворов ХТЗ и его смесей с амикацин сульфатом в диапазоне температур 15-50⁰С показало, что увеличение температуры способствует снижению вязкости раствора и росту интенсивности течения системы, что связано с изменением структуры растворов под влиянием теплового движения. На основе полученных температурных зависимостей вязкости были рассчитаны энергии активации вязкого течения 2% раствора ХТЗ невелика, что характерно для растворов полиэлектролитов, и равняется 19 кДж/моль. В целом кривые зависимости энергии активации от состава смеси ХТЗ-антибиотик для системы ХТЗ – АМС лежат выше аддитивной кривой и имеют ярко выраженное «плечо», что свидетельствует об увеличении прочности структуры растворов.

© Каримова Р.Д., Хуснутдинова А.Н., 2014 г.

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ ВЫХОДА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ИЗ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК

Каримова Р. Д., Фасхутдинова А.А.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

Хитозан – природный биополимер. Одно из возможностей применения хитозана – создание биodeградируемых носителей фармацевтических препаратов (антибиотиков, противовирусных, противоопухолевых и антиаллергенных препаратов). Применение таких пленок создает условия для выделения лекарственных средств, обеспечивая эффект пролонгирования их действия.

Транспортные свойства пленок оценивались в отношении выхода лекарственного препарата – левомицетина (ЛЦ), введенного в пленку в виде спиртового раствора на стадии формирования. Концентрация лекарственного препарата составляла $1 \cdot 10^{-3}$ моль/моль ХТЗ. Кинетику высвобождения ЛЦ из пленок изучали на УФ-спектрофотометре по значению оптической плотности в полосе поглощения $\lambda = 270$ нм. На рисунке приведены типичные зависимости выхода ЛЦ в водную фазу от времени выдержки пленок в воде. В ходе эксперимента было выявлено, что наиболее полно лекарственный препарат выходит из пленки в течение первых четырех суток. На 8-10 сутки выход достигает равновесного значения.

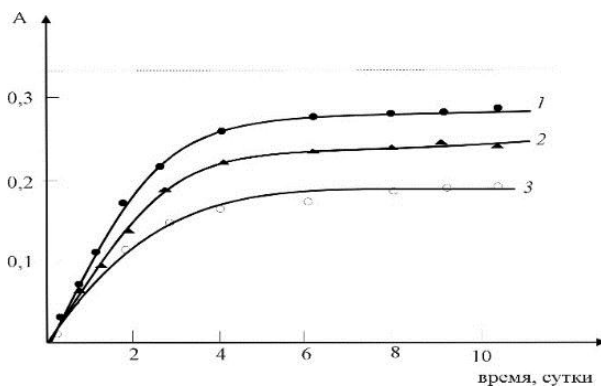


Рис. Кинетика выхода левомицетина из пленки, полученной из раствора в 1%-ной уксусной кислоте. Время обработки в растворе эмульгатора 10 мин. (1), 30 мин. (2) и 60 мин. (3). Концентрация левомицетина в пленке $0,0163$ моль/моль, оптическая плотность, соответствующая этому содержанию лекарственного препарата, отмечена пунктирной линией.

© Каримова Р.Д., Фасхутдинова А.А., 2014 г.

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА

Каримова Р.Д., Галина А.Р.

Башкирский государственный университет, Уфа Россия

Получение хитозановых пленок, пригодных для использования в терапии ожогов и лечения хирургических ран, задача важная и актуальная. Преимущества таких полимерных пленок: более высокая степень защиты по сравнению с тканевыми материалами, их полная атравматичность, биосовместимость с живыми тканями, биodeградируемость, биоинертность и бактериостатичность. Одним из важнейших показателей защитных полимерных пленок является их влагопоглощающая способность, поскольку с этой характеристикой связана и способность полимерного покрытия к сорбции раневого экссудата, и влаго- и газопроницаемость пленки.

В качестве объекта исследования были выбраны образцы хитозана (ХТЗ) производства фирмы Биопрогресс (Россия), полученные щелочным дезацетилизацией крабового хитина (степень дезацетилирования порядка 75-80 % мас.), с $M_n=80000$, 120000 и 500000 и поливиниловый спирт (ПВС) с $M_n=25000$. Хитозановые пленки в солевой форме формировали из растворов в уксусной кислоте (УК). Концентрация полимера в растворе варьировалась от 0.5 до 7.0 г/дл. Концентрация уксусной кислоты варьировалась от 1 до 70% масс. Во всех случаях изучали влагопоглощающую способность пленок, определяемую весовым методом как степень набухания в парах воды при комнатной температуре.

Кривые набухания хитозановых пленок, полученных в солевой форме, имеют вид типичный, для неограниченно набухающих полимеров. Варьирование концентрации ХТЗ в исходном растворе не сказывается принципиально на влагопоглощающей способности пленок. Имеет место лишь незначительное уменьшение набухания при увеличении содержания хитозана в исходном растворе.

Некоторое увеличение степени набухания пленок имеет место и при увеличении концентрации уксусной кислоты в растворе, из которогоготавливался пленочный образец. В большей степени отражается на сорбционных свойствах хитозановой пленки значение молекулярной массы используемого хитозана, а также толщина пленки. С уменьшением толщины пленки и увеличением значения молекулярной массы хитозана, степень набухания пленки увеличивается.

© Каримова Р.Д., Галина А.Р., 2014 г.

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ КРОССОВЕРА РАСТВОРОВ
НЕКОТОРЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ**Тухватуллин Р.Ф., Валиев Д.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно, что гидродинамические свойства растворов полимеров зависят от концентрации, молекулярной массы и природы растворителя. Два последних фактора учитываются в определенной степени величиной характеристической вязкости. Концентрационные зависимости характеристик полимерных систем - вязкости, динамического двойного лучепреломления и др. резко изменяются в области весовых концентраций полимера $C^* \sim [\eta]^{-1}$. Поэтому, в качестве границы между разбавленными и полуразбавленными растворами принято принимать величину C^* , обратную характеристической вязкости $1/[\eta]$, называемой точкой кроссовера. Величина C^* характеризует плотность заполнения раствора сегментами макромолекул, или концентрацию, при которой происходит перекрывание координационных сфер. Значение C^* зависит от молекулярной массы и качества растворителя, определяющих объем полимерного клубка.

Концентрационная зависимость вязкости растворов полимеров отвечает степенной зависимости: $\eta \sim C^\sigma$, где n зависит от концентрации. В области разбавленных растворов $\sigma = 1$, в области полуразбавленных растворов $1 < \sigma < 10$, в области концентрированных растворов $\sigma > 10$. Следовательно, можно, проведя вискозиметрические измерения и построив в двойных логарифмических координатах зависимость η от C , определить в каком концентрационном режиме находится полимер. Подобные измерения, как правило, чрезвычайно трудоёмки и требуют значительного расхода изучаемых растворов полимеров. В связи с этим, предложен экспресс-метод оценки концентрации кроссовера, основанный на построении зависимости логарифма динамической вязкости растворов полисахаридов (хитозана, сукцината хитозана, цитрусового пектина) от логарифма концентрации. Реологические измерения растворов полисахаридов проводили на реометре Naake Mars III при 25 °С в режиме постоянного напряжения сдвига со скоростью сдвига от 0,1 до 100 с⁻¹. Установлено, что для хитозана, сукцината хитозана, цитрусового пектина концентрации кроссовера составляют 0,1 г/дл, 0,25 г/дл и 0,3 г/дл соответственно. Эти данные практически совпадают с результатами определения точки кроссовера путём вискозиметрических измерений. Сведения о точках кроссовера растворов полисахаридов необходимы, например, при получении гидрогелей, на основе которых могут разрабатываться ранезаживляющие, покрытия, материалы для имплантатов и подложек для выращивания тканей в тканевой инженерии.

© Тухватуллин Р.Ф., 2014 г.

DFT ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ С ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТНЫМИ РАДИКАЛАМИ

Диниахметова Д.Р., Фризен А.К.

Институт органической химии УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Из литературных данных известно, что при полимеризации метилметакрилата в присутствии фуллерена C₆₀ происходит связывание полиметилметакрилатного радикала фуллереном (показано на основании экспериментальных исследований). В настоящей работе с помощью квантово-химического моделирования рассчитано строение интермедиатов, образующихся при взаимодействии фуллерена C₆₀ с полиметилметакрилатными радикалами (R[•]), а также тепловые эффекты (ΔH⁰) и энергетические барьеры (H⁰_{акт}) данных реакций (для температуры 298 К). Квантово-химические расчёты выполнены на уровне теории функционала плотности (приближение PBE/3z).

ΔH⁰ реакции образования интермедиата C₆₀R[•] составляет -18.3 кДж/моль. H⁰_{акт} данной реакции равна 29.0 кДж/моль. Спиновая плотность в данном интермедиате делокализована и имеет максимальные значения на трёх атомах углерода, следовательно, именно по этим атомам C наиболее вероятно присоединение второго макрорадикала и молекулы мономера, что и было смоделировано далее. Найдено, что 1,4-присоединение ПММА радикала к C₆₀R[•] протекает без энергетических барьеров с тепловыми эффектами -87.6 и -83.3 кДж/моль, а 1,2-присоединение не осуществляется в силу стерического фактора.

Реакция присоединения молекулы метилметакрилата к аддукту C₆₀R[•] по положению 1,4 относительно присоединенной полимерной цепи имеет ΔH⁰ = 19.4 кДж/моль, а H⁰_{акт} = 48.0 кДж/моль. Энергетический барьер такой реакции выше, чем для реакции роста цепи при полимеризации метилметакрилата (19.2 кДж/моль), следовательно, присоединение мономера к интермедиату C₆₀R[•] идёт несколько труднее, чем к свободному R[•]. Величина спиновой плотности в таком интермедиате на третичном атоме C составляет 0.51 а.е. (практически как в свободном R[•] – 0.52 а.е.)

Моделирование различных реакций взаимодействия бисаддукта C₆₀(R)₂ с макрорадикалом показало возможность образования трисаддуктов C₆₀(R)₃. ΔH⁰ наиболее вероятной с энергетической точки зрения реакции присоединения R[•] к интермедиату C₆₀(R)₂ составляет -24.5 кДж/моль, а H⁰_{акт} = 24.9 кДж/моль. Спиновая плотность в трисаддукте C₆₀(R)₃ делокализована на 3-4 атома C (в зависимости от конфигурации трисаддукта).

УДК 625.85.06.

РАСТИТЕЛЬНЫЕ ЖИРЫ КАК СЫРЬЕ ДЛЯ СИНТЕЗА ПАВ В НЕФТЯНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Ващенко А.В., Идогова Я.В., Мукминова И.Р., Прочухан К.Ю.,
Прочухан Ю.А.

Башкирский Государственный университет, г. Уфа, Россия

На протяжении многих лет одной из проблем нефтедобывающей промышленности является увеличение объема извлекаемой нефти из продуктивных пластов и темпов разработки нефтяных залежей. [1]

Извлекаемое углеводородное сырье представляет собой смесь воды и нефти, однако содержание воды в добываемом сырье определяется продолжительностью эксплуатации данного месторождения.

Одним из способов повышения нефтеотдачи пласта является использование ПАВ. [2]

В качестве объекта исследования было разработано и синтезировано анионное поверхностно-активное вещество (АПАВ) на основе растительных жиров $C_{15}-C_{18}$, которому было присвоено рабочее название Р-30. [3]

Оценка работоспособности состава определяли по нефтеотмыванию в водных растворах реагента.

Оценка нефтеотмывающей способности растворов ПАВ осуществлялась гравиметрическим методом с использованием подготовленных металлических пластин. Данные испытаний представлены на рис. 1.

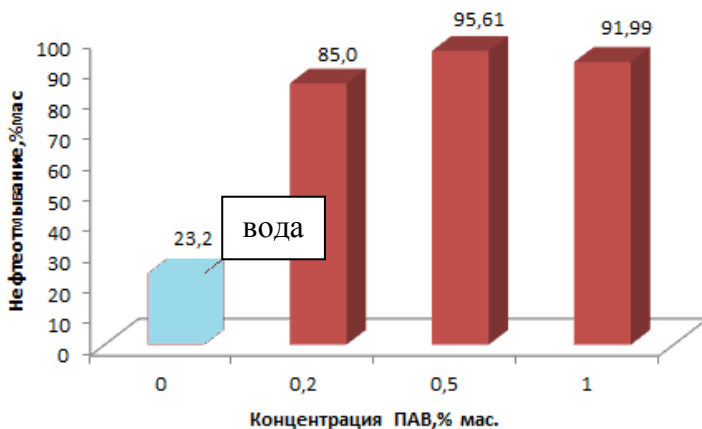


Рис.1 график нефтеотмывающей способности растворов ПАВа Р-30 с концентрациями 1,0%;0,5%;0,2% и воды.

Таким образом, из вышеперечисленных данных видно, что лучшей нефтеотмывающей способностью обладает ПАВ Р-30 с концентрацией 0,5% мас. (95,61 %мас).

Литература

1. Орлов Г.А., Кендис М.Ш., Глушенко В.Н. Применение обратных эмульсий в нефтедобыче. – М.: Недра, 1991. – 224 с.
2. Поверхностно-активные вещества и композиции. М.Ю.Плетнева. М.: 2002
3. Кузьмичева Е.О., Дашкина Э.Ф, Прочухан Ю.А., Пташко О.А., Глушенко В.Н. Разработка экологически безопасных ПАВ и адаптации их к условиям нефтедобывающей промышленности. Сбірник наукових праць «Развиток науки на сучасном етапі» м. Киев, 20 грудня 2012 року. С.20-25.

© Ващенко А.В., Идогова Я.В., Мукминова И.Р., Прочухан К.Ю.,
Прочухан Ю.А., 2014 г.

УДК 625.85.06.

ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛИЗАЦИИ НА НЕФТЕОТМЫВАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ ВОДНОГО РАСТВОРА АНИОННОГО ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА Р-30.

И.Р. Мукминова, Г.И. Акьюлова, А.В. Ващенко, К.Ю. Прочухан,
Ю.А. Прочухан

Башкирский Государственный университет, г. Уфа, Россия

Одной из возможностей повышения эффективности разработки месторождений нефти и повышения извлечения запасов, является метод заводнения с применением поверхностно-активных веществ (ПАВ). Но неизменно, проблема, с которой приходится сталкиваться в реальных условиях при реализации данного способа разработки нефтяной залежи - это термосолевая устойчивость ПАВ[1].

В этой связи, актуальным становится проверка совместимости реагента с высоконцентрированными растворами солей при температурах 20 и 90 °С и оценка работоспособности состава по нефтеотмыванию в этих растворах.

Объектом исследования является рабочий раствор разработанного ранее вещества анионное ПАВ Р-30 на основе растительного сырья с использованием модели пластовой воды (МПВ) «Западная Сибирь», общей минерализацией 20 грамм солей на литр воды. [2]

Рабочие растворы концентрацией 1,0 %мас. выдерживались в течение 24 часов, после чего визуально оценивалось наличие хлопьев в объеме

реагента. Проведенные опыты показали стабильность разработанного реагента в МПВ, что говорит о совместимости разработанного состава и удачно подобранных добавок против высаливания.

На следующем этапе работы оценивали эффективность рабочего раствора ПАВ в минерализованной воде с помощью теста на нефтеотмывание при комнатной температуре.

Нефтеотмывающая способность раствора АПАВ производилась гравиметрическим способом путем применения металлических пластин и представлена на Рис.1. [3]

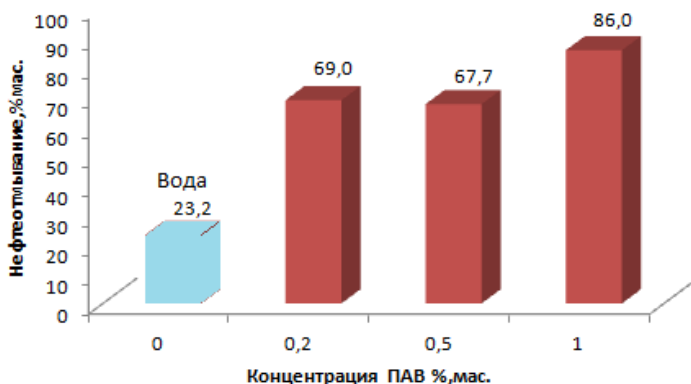


Рис.1. График нефтеотмывающей способности растворов ПАВа Р-30 на МПВ «Западная Сибирь» с концентрациями 1,0%;0,5%;0,2%.

Таким образом, из вышеперечисленных данных видно, что лучшей нефтеотмывающей способностью обладает ПАВ Р-30 на МПВ «Западная Сибирь» с концентрацией 1,0% мас. (86% мас).

Литература

1. Абрамзон А.А. и др., Поверхностно-активные вещества. Л: Химия, 1988 г. - 200 с.
2. Кузьмичева Е.О., Дашкина Э.Ф, Прочухан Ю.А., Пташко О.А., Глушенко В.Н. Разработка экологически безопасных ПАВ и адаптации их к условиям нефтедобывающей промышленности. Сбірник наукових праць «Развиток науки на сучасном етапі» м. Киев, 20 грудня 2012 року. С.20-25.
3. Орлов Г.А., Кендис М.Ш., Глушенко В.Н. Применение обратных эмульсий в нефтедобыче. – М.: Недра, 1991. – 224 с.
- 4.

© И.Р. Мукминова, Г.И. Акьюлова, А.В. Ващенко, К.Ю. Прочухан, Ю.А. Прочухан, 2014 г.

**ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ИЗГОТОВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРУ
ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОЧНОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ
ХИТОЗАНА**

Чернова В.В., Галина А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно, что растворы полимеров представляют собой достаточно сложные системы с различной организацией макроцепей. Кроме того, структура раствора полимера находит свое отражение и в сформированном из него изделии, например, пленочном покрытии, а также оказывает влияние и на его свойства. В настоящее время достаточно перспективным направлением исследований является разработка пленочных материалов на основе хитозана (ХТЗ), полисахарида, обладающего рядом ценных свойств для медицинского применения, в частности для использования их в качестве защитных материалов при лечении хирургических, ожоговых ран и долго незаживающих ран. Целью настоящей работы стало изучение влияния типа исходного образца ХТЗ на надмолекулярную структуру полученного из него пленочного покрытия.

В качестве объектов исследования были выбраны следующие образцы ХТЗ: ХТЗ-1 (фирма Химмед, Россия, с молекулярной массой 160 кДа), ХТЗ-2 и ХТЗ-3 (ЗАО Биопрогресс, Щелково, с молекулярной массой 340 и 99 кДа соответственно), полученные щелочным деацелированием крабового хитина. Пленочные образцы толщиной 0,1 мм получали методом полива на поверхность стекла 2% растворов ХТЗ в 1 % уксусной кислоте. Рентгенографические исследования образцов хитозана проводили на приборе «ShimadzuXRD6000», излучатель медный, геометрия съемки θ -2 θ , шаг 0,05 град, скан 0,5 град/мин, время съемки точки 6 с. Структуру поверхности пленок оценивали методом лазерной сканирующей микроскопии на приборе LSM-5-Exciter (Carl Zeiss, Germany). Разрешение по шкале «ХУ»-100 нм, по шкале «Z»-10 нм.

Как показали исследования, все образцы ХТЗ кроме молекулярной массы характеризуются и различной степенью кристалличности. Кроме того, пленочные покрытия, полученные из данных образцов ХТЗ, при прочих равных условиях изготовления, характеризуются принципиально разной структурой поверхности пленки, ее шероховатостью, пористостью и надмолекулярной организацией.

© Чернова В.В., Галина А.Р., 2014 г.

УДК 541.64

**ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ РАСТВОРИТЕЛЯ НА СТРУКТУРУ
ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОЧНОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ
ХИТОЗАНА, СФОРМИРОВАННОГО ИЗ РАСТВОРА**

Лаздин Р.Ю., Чернова В.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из многочисленных достоинств хитозана (ХТЗ) является его способность к пленкообразованию. При формировании хитозановых пленок в качестве растворителей используют водные растворы летучих одноосновных кислот с образованием соответствующих солей. Получить хитозановую пленку с формальной точки зрения очень просто, например, путем полива раствора полимера на подложку с последующим испарением растворителя. Однако необходимо учитывать, что свойства и структура пленочных покрытий, формирующихся из раствора, определяется целым рядом факторов, среди которых молекулярная масса и степень кристалличности полимера, природа и термодинамическое качество используемого растворителя, концентрация полимера в растворе, скорость удаления растворителя и т.д. В данной работе, была предпринята попытка установления влияния концентрации используемого растворителя на структуру пленочного покрытия, сформированного из раствора.

В качестве объектов исследования был выбран образец ХТЗ (ЗАО Биопрогресс, Щелково, с молекулярной массой 99 кДа). Для получения пленочных образцов ХТЗ готовили полуразбавленные (2 г/дл) растворы путем растворения навески сухого полимера при комнатной температуре в течении 48 часов. В качестве растворителя в данном случае были использованы растворы уксусной кислоты с концентрацией 1, 5, 10 и 70 г/дл. Пленочные образцы ХТЗ толщиной 0,1 мм получали методом полива раствора полимера на поверхность стекла. Структуру поверхности пленок оценивали методом лазерной сканирующей микроскопии на приборе LSM-5-Exciter (Carl Zeiss, Germany). Разрешение по шкале «ХУ»-100 нм, по шкале «Z»-10 нм.

Как показали исследования, пленочные образцы ХТЗ, полученные из растворов в уксусной кислоте различной концентрации, неравнозначны по своей надмолекулярной организации, характеризуются принципиально разной структурой поверхности пленки, ее шероховатостью и пористостью.

© Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., 2014 г.

ФЕРМЕНТАТИВНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА

Гурина М.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе исследуются кинетика ферментативной деструкции пленочных образцов биополимера хитозана под действием неспецифического ферментного препарата гиалуронидазы. Вычислены кинетические параметры, а именно максимальная скорость и константа Михаэлиса ферментативной реакции. Установлено, что деструкции подвергается монолитный пленочный образец, ферментализ хитозана в этом случае подчиняется тем же закономерностям, что и процесс ферментативного деструкции хитозана в растворе при малых концентрациях субстрата.

Для проведения эксперимента, пленочный образец хитозана помещали на подложку, смоченную раствором ферментного препарата в 1% уксусной кислоте, и выдерживали в течение определенного времени при постоянной температуре (360С). Объем раствора ферментного препарата (0,05 мл) выбирали исходя из условия, чтобы только одна из поверхностей пленки соприкасалась с раствором фермента. После выдержки, процесс ферментативного деструкции останавливали дезактивацией фермента кипячением в течение 30 минут на водяной бане. Далее пленку растворяли в 1% уксусной кислоте и определяли текущее значение характеристической вязкости полимера.

Значение максимальной скорости ферментативного деструкция V_{\max} , определяющей максимальную возможность образования продукта реакции при данной концентрации фермента в условиях избытка субстрата, составило $1,50 \cdot 10^{-6}$ мин⁻¹. Параметр V_{\max}/K_m имеющий физический смысл константы скорости для реакции:



где E – фермент, S – субстрат, P – продукты реакции, составляет $V_{\max}/K_m = 0,44 \cdot 10^{-6}$ (дл/г)×мин⁻¹. Именно к такой схеме сводится механизм Михаэлиса-Ментен при низких концентрациях субстрата. При этом, зависимость V от концентрации субстрата на начальном этапе аппроксимируется прямой с наклоном V_{\max}/K_m .

Впервые определены кинетические характеристики активности фермента гиалуронидазы в реакции ферментативного деструкция хитозана, параметр, имеющий физический смысл константы скорости ферментативной реакции, составляет $V_{\max}/K_m = 0,44 \cdot 10^{-6}$ (дл/г)×мин⁻¹.

© Гурина М.С., 2014 г.

СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 541.63

ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК ОТХОДА ПРОИЗВОДСТВА ПОЛИЭТИЛЕНПОЛИАМИНА НА ТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ

Ахунова Р.Р., Биглова Р.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основная тенденция битумных технологий в настоящее время – снижение энергозатрат путем понижения технологических температур и повышение экологической безопасности за счет снижения выбросов в атмосферу токсичных углеводородов. При этом предполагается, что новые технологические решения не должны приводить к ухудшению качества битумов и материалов на их основе. Разрабатывается множество вариантов достижения этих целей. Один из вариантов решения проблемы – введение модифицирующих добавок, назначение которых улучшать механические характеристики битумов в области умеренных эксплуатационных температур и понижать вязкость вяжущего при высоких температурах. В качестве модифицирующих добавок нами предлагаются отходы производства полиэтиленполиамиона. Учитывая тот факт, что введение добавки в растворителе позволяет как ускорить процесс получения вяжущего, так и понизить его температурный режим, изучен ряд предлагаемых в нефтехимической промышленности растворителей.

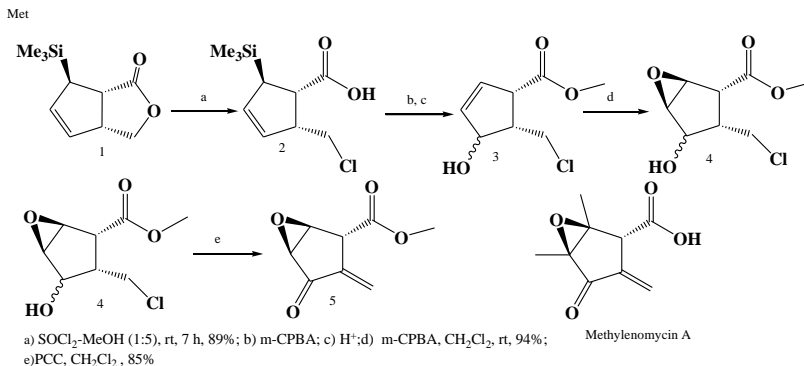
Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что добиться полной однородности вяжущего, высокомолекулярного соединения (бутадиен- α -метилстирольный сополимер) и отхода производства полиэтиленполиамиона удастся при употреблении фракции прямогонного бензина с температурой выкипания 70-100°C. При этом достигается понижение температурного режима процесса получения, обеспечивается образование однородной структуры и требуемая трещиностойкость вяжущего. Однако привлечение легких растворителей в высоких концентрациях может обусловить взрыво- и пожароопасность процесса получения вяжущего, т.к. температура вспышки применяемых растворителей существенно ниже значения температуры осуществления синтеза вяжущего и температуры применения последнего. Для невелирования возможных негативных моментов применения низкокипящего растворителя последний вводили в битумную композицию с индустриальным маслом (И-20) в количестве до 2 мас.%. Выбранное сочетание и соотношение компонентов битумной композиции позволяет сохранить температуру вспышки вяжущего на уровне выше 220°C, а эластичность не менее 75%, что позволяет обеспечить требуемую трещиностойкость дорожных покрытий в районах с любыми максимальными зимними температурами.

СИНТЕЗ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА(+)-ИДЕЗМЕТИЛЕНОМИЦИНА А

Альмухаметов А.З., Гимазетдинов А.М., Лоза В.В.

Учреждение Российской академии наук Институт органической химии
Уфимского научного центра РАН, г.Уфа, Россия

В ряду циклопентеноновых антибиотиков метиленомицин А, выделенный из сред ферментаций бактерий *Streptomyces*, привлекает внимание функциональной загруженностью структуры и наличием нескольких электрофильных центров. Метиленомицин А активен против грамм-положительных и грамм-отрицательных микроорганизмов, а также эффективен против легочной карциномы Льюиса. Как известно, биологическая активность подобных кросс-сопряженных структур связана с их способностью к ковалентному связыванию с SH- и NH₂- группами белков-биомшеней.



При разработке подходов к синтезу целевого продукта использовали триметилсилилциклопентадиен, который, по ранее разработанной в нашей лаборатории методике [1], трансформировали в энантиомерно чистый лактон **1**. Раскрытие лактонового цикла **1**, с высоким выходом, осуществили выдерживанием в системе SOCl₂-CH₃OH. Полученное соединение **2**, в две стадии, трансформировали в смесь эпимерных аллильных спиртов **3**, легко разделяющихся колоночной хроматографией на SiO₂. Затем, полученные индивидуальные эпимеры вовлекли в реакцию эпоксирирования с m-CPBA. При этом наблюдалось стереоселективное образование эпокиспиртов **4**. На завершающем этапе эпокиспирты **4** окислили действием PCC в дихлорметане. После окисления из спиртов **4** получен целевой продукт **5** - метиловый эфир (+)-дидезметиленомицина А, по данным SAR-исследований, более действенный аналог метиленомицина А.

Литература

1. Gimazetdinov A.M., Gataullin S.S., Loza V.V., Miftakhov M.S. Synthesis of methyl ester (+)-didesmethylenomycin A. // Tetrahedron, 2013. V.69. P. 9540.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОЛИГАНДНЫХ ХЕЛАТОВ $Cu(II)$ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Амантаева Г.Ю., Берестова Т.В.

Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

Известно, что хелатные соединения $Cu(II)$ с природными α -аминокислотами обладают широким спектром биологической активности [1], а также входят в состав таких ферментов, как аскорбиназа, супероксиддисмутаза и др. [2].

Предполагается, что получение стабильных наносуспензий на основе разнолигандных комплексов $Cu(II)$ позволит расширить их применение, например, в качестве интермедиатов направленного действия в организме как более эффективных и безопасных биологически активных препаратов, [3].

Таблица 1. Полосы поглощения (cm^{-1}) функциональных групп комплексов **1-7** в ИК-спектрах

Комплекс	Выход, %	Полосы поглощения функциональных групп						
		$\nu(-C(CO))$		$\Delta\nu$ (COO^-)	$\nu(-O(CO)-)$		$\nu(-CH_2), \nu(-NH_2)$	
		<i>as</i>	<i>s</i>		<i>as</i>	<i>s</i>	CH_3	(<i>as, s</i>)
Глицин- (gly)	-	1608	1412	196	1506	1334	2923	3125, 3180
(DL)-треонин	-	1626	1418	208	1475	1346	2949	3163
(DL)-валин	-	1595	1418	177	1504	1325	2961	3126
L-аланин	-	1593	1410	183	-	-	2854 2924	3078
<i>cis</i> -[Cu(gly) ₂](1)	35	1580 1593 1605	1396 1404	201	-	-	2976 2885	3165 3267
<i>trans</i> -[Cu(DL-val)(gly)](2)	97	1616	1388	228	-	-	2962 2907	3249 3301
<i>trans</i> -[Cu(DL-thr)(gly)](3)	75	1617	1386	231	-	-	2928 2860	3267 3281
<i>trans</i> -[Cu(DL-val)(DL-thr)](4)	69	1614	1387	227	-	-	2976 2885	3253 3309
<i>trans</i> -[Cu(L-ala)(D,L-val)](5)	46	1616	1390	226	-	-	2926 2965	3138 3246
<i>trans</i> -[Cu(L-ala)(gly)](6)	99	1624	1394	230	-	-	2850 2918	3161 3269
<i>cis</i> -[Cu(L-ala)(gly)](7)	99	1591 1585	1389 1373	202	-	-	2851 2919	3152 3263

С целью изучения возможности образования устойчивых микро- и наносuspензий на основе хелатов Cu(II) синтезированы разнолигандные комплексы с аминокислотами на основе методики [3]. Комплексы **1-7** были охарактеризованы методом ИК-спектроскопии (ИК-Фурье спектрометр Shimadzu FTIR-8400S) (таблица 1, рис.1).

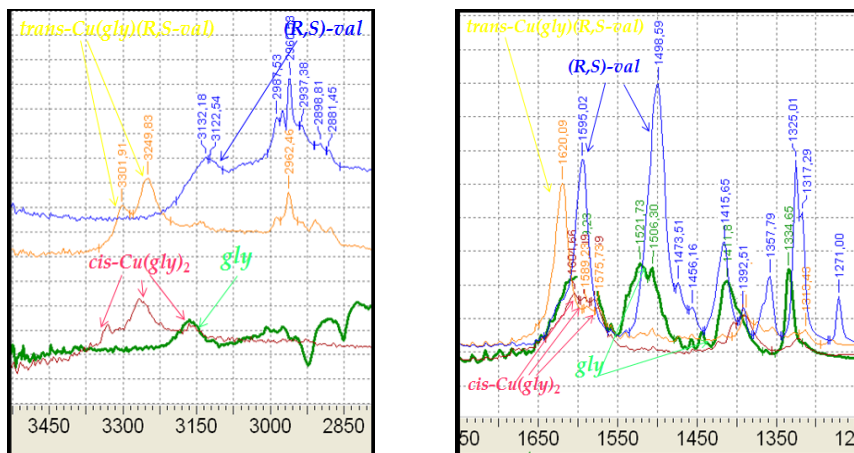


Рис. 1. Спектры пропускания глицина, (*DL*)-валина и комплексов **1, 2** в ИК-области

Установлено, что наиболее информативные полосы поглощения функциональных групп аминокислотных хелатов в ИК-спектрах **1-7** находятся в области $3078-3395\text{ см}^{-1}$ и соответствуют валентным колебаниям $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2^-)$ и $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2^-)$, а также в области $1585-1626\text{ см}^{-1}$ для $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$ и $1373-1418\text{ см}^{-1}$ для $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$. Полосы поглощения $2850\text{ см}^{-1} - 2976\text{ см}^{-1}$ соответствует валентным колебаниям $-\text{CH}(\text{CH}_3)$ групп. Соотношение образующихся *цис*- и *транс*-изомеров **1-7** определяется природой лиганда. Так, *бис*-глицинат Cu(II) **1**, выделенный в твердом виде, представлял собой исключительно *цис*-изомер. Использование разнородных лигандов приводило к образованию преимущественно *транс*-изомеров хелатов **1-6**.

Литература

1. Stanila A., Braicu C., Stanila S., Pop R. / Not Bot Horti Agrobo. - 2011. - №39(2). - P. 124.
2. <http://www.armic.am/modules.php?name=News&file>
3. <http://biofile.ru/bio/16297.html>

© Амантаева Г.Ю., Берестова Т.В., 2014 г.

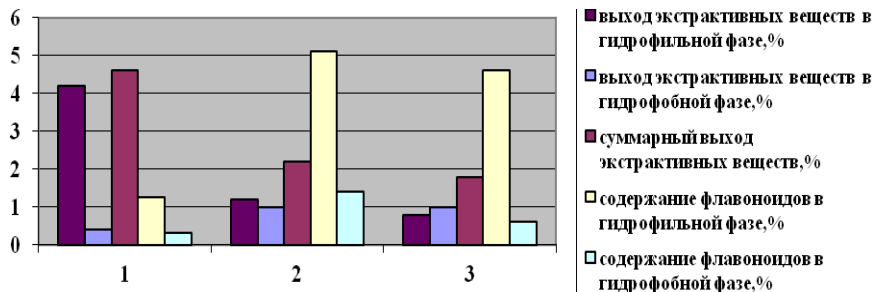
УДК 574.4:1.1

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ПЛОДОВЫХ ОБОЛОЧЕК ГРЕЧИХИ

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Абдуллин М.И.
Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

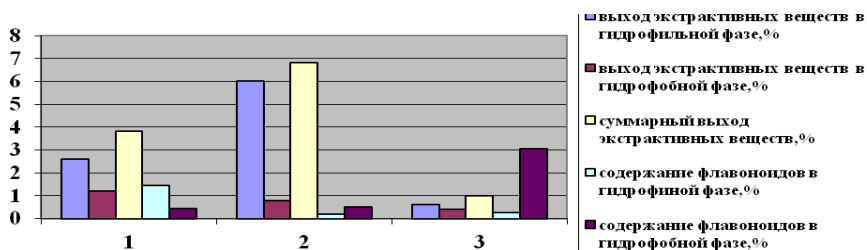
В последнее время получила развитие технология экстрагирования лекарственного растительного сырья смесью гидрофильных и гидрофобных растворителей с одновременным эффективным извлечением гидрофильных и липофильных веществ [1]. Ранее нами был предложен способ экстракции флавоноидов из плодовых оболочек гречихи, включающий в себя первоначальную обработку водным этанолом и последующее настаивание шрота в хлороформе в течение 12 часов.

Данная работа проводилась с целью интенсификации процесса экстракции фенольных соединений из плодовых оболочек гречихи. В качестве экстрагента были использованы смеси взаимно нерастворимых растворителей разной полярности. В качестве липофильных растворителей выбраны хлороформ, бензол и гексан, так как в них хорошо растворимы агликоны и алкилированные флавоноиды. Результаты эксперимента приведены в виде диаграмм (рис.1 и 2).



где 1- 70%-ный изопропанол + гексан, 2- 70%-ный изопропанол + хлороформ, 3- 70%-ный изопропанол + бензол, (выход экстрактивных веществ определяли в % от сухого экстракта, выход флавоноидов определяли в % от экстрактивных веществ).

Рис 1. Экстракция флавоноидов ДСЭ, содержащая 70%-ный изопропанол.



где 1- 70%-ный изопропанол + гексан, 2- 70%-ный изопропанол + хлороформ, 3- 70%-ный изопропанол + бензол, (выход экстрактивных веществ определяли в % от сухого экстракта, выход флавоноидов определяли в % от экстрактивных веществ).

Рис 1. Экстракция флавоноидов ДСЭ, содержащая 70%-ный н-бутанол.

Наибольший выход суммарного экстракта был получен при использовании в качестве экстрагента смесей изопропанол – гексан и н-бутанол – хлороформ (выход 4,6% и 6,8% соответственно). Однако, выход флавоноидов при этом невысокий как в гидрофильной, так и в гидрофобной фазе. Для извлечения флавоноидов более приемлемой оказалась система растворителей, содержащая изопропанол-хлороформ и изопропанол-бензол. Содержание флавоноидов в гидрофильной фазе составляет 5,1% и 4,6% соответственно от массы экстракта. В гидрофобную фазу лучше извлекаются флавоноиды в системе н-бутанол-бензол.

Ориентировочное строение групп флавоноидов в экстрактах определяли согласно методикам, описанным в [2], по качественным реакциям и тонкослойной хроматографии со специфическими проявителями. Установлено, что в полученных извлечениях присутствуют изофлавоны, флавонолы, флавоны, ауруны халконы, 5-окси- 5-метоксихалконы.

Литература

1. Ветров П. П., Гарная С. В., Долганенко Л. Г. Определение содержания липофильных веществ и суммы каротиноидов в растительном сырье // Химико-фармацевтический журнал. – 1989. – Т. 24, № 3. – С. 320.

2. Химический анализ лекарственных растений: Учебное пособие для фармацевтических вузов / Ладыгина Е. Я., Сафронич Л. Н., Отряшенкова В. Э. и др. Под ред. Гринкевич Н. И., Сафронич Л. Н. — М.; Высш. школа, 1983.- С. 84-85.

© Апаева А.В., 2014 г.

УДК 542.06

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СОРБЕНТОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Ямансарова Э.Т., Громько Н.В., Куковинец О.С., Зворыгина О.Б.,
Абдуллин М.И.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

В связи с ухудшением экологии очистка воды от примесей является актуальной проблемой. Перспективным направлением для удешевления данного процесса является использование в качестве адсорбентов доступных природных материалов, промышленных или агропромышленных отходов. В частности, в нашей республике, качестве исходного материала можно с успехом использовать лузгу подсолнечную и плодовые оболочки гречихи посевной. Это позволит не только получать адсорбент, обладающий высокой поглотительной способностью, но и утилизировать многотоннажные отходы.

Целью настоящей работы было исследование физико-химических характеристик сорбентов, полученных на основе лузги подсолнечника и плодовых оболочек гречихи посевной. Для этого измельченный до размеров 1-2 мм исходный материал промывали горячей дистиллированной водой с последующей обработкой этанольно-бензолной смесью (1:1) с целью удаления пигментов. Затем образцы подвергали быстрому замораживанию до -20°C и выдерживали в течение 50 часов с последующей обработкой горячим паром при 130°C , либо инклюдированию в концентрированной соляной кислоте. Все получаемые образцы измельчали до фракции в 0,4-0,6 мм и просеивали. Для определения сорбционной емкости по отношению к ионам тяжелых металлов (железа (II), марганца (II), меди(II)) использовали фотоколориметрический метод анализа на фотометре КФК-2. Результаты показали эффективность использования полученных материалов для удаления тяжелых металлов из воды. Данные сорбенты способны удалить в среднем 10-90 % примесей ионов тяжелых металлов. Наиболее высокую сорбционную емкость имеют материалы из лузги подсолнечника, последовательно обработанные концентрированной соляной кислотой и 33%-ным раствором едкого натра. При этом эффективность сорбции по отношению к ионам железа, марганца, меди составляет соответственно 90,8% 91,5 и 93,5%.

Таким образом, из полученных образцов в качестве сорбентов по отношению к ионам тяжелых металлов и низкомолекулярным органическим веществам можно рекомендовать для дальнейшего изучения материалы, полученные инклюдированием лузги подсолнечника и плодовых оболочек гречихи в концентрированной соляной кислоте.

№	Вид сорбента	Сорбция ионов (в %)		
		Fe(II)	Mn(II)	Cu(II)
1	Промытая (необработанная) лузга	11.2	13.6	14.1
2	Промытые (необработанные) плодовые оболочки гречихи	10.4	8.7	10.8
3	Лузга, инклюдированная концентрированной соляной кислотой с последующей обработкой щелочью	89.7	86.0	75.5
4	Плодовые оболочки гречихи, инклюдированные концентрированной соляной кислотой с последующей обработкой щелочью	86.0	77.4	74.1
5	Лузга, обработанная при низкой температуре (-20 °С)	84.5	80.2	91.3
6	Плодовые оболочки гречихи, обработанные при низкой температуре (-20 °С)	77.5	73.4	78.7
7	Уголь активированный (для сравнения)	78.3	70.8	77.0
8	Сорбент, применяющийся в бытовых фильтрах марки «Аквафор» (для сравнения)	77.1	75.0	80.6

Литература

1. Земнухова Л.А. и др. «Возобновляемые источники химического сырья: комплексная переработка отходов производства риса и гречихи» // Российский химический журнал, 2004. Т. 48. №3. С. 116–124. \

2. Никифорова Т.Е., Козлов В.А. Сорбция ионов Cu (II) торфом// Журнал прикладной химии. 2008. Т. 81. №2. С. 428–433.

© Ямансарова Э.Т., Громыко Н.В., Куковинец О.С., Зворыгина О.Б.,

© Абдуллин М.И., 2014 г.

ОЦЕНКА ТОКСИЧНОСТИ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ

И.Р. Хамзин, П.С. Сайтмуратов, Ю.А.Хакимова, А.А. Исламутдинова
 ФГБОУ ВПО Уфимский государственный нефтяной технический
 университет, г. Стерлитамак, Россия

При разработке новых соединений, обладающих требуемыми свойствами, требуется оценка их опасности как потенциальных токсикантов на каждом этапе получения. Для осуществления этого необходимо изучение универсальных тест-систем, которые в короткие сроки давали бы ясное представление о степени токсичности вещества.

В данной работе предложено обоснование токсичности ранее синтезированного нами ингибитора кислотной коррозии на основе хлорорганических соединений и карбамида [1] посредством «Биотеста на прорастание семян» [2]. В качестве модельного тест-растения были использованы заранее отобранные на всхожесть семена овса.

Экспериментальные исследования проводились с использованием пяти разведений, при этом пробы дублировались в трех повторностях.

Регрессионный анализ экспериментальных данных позволил получить графическое изображение зависимости разведения от фитоэффекта в виде прямой и эмпирическое в виде уравнения (рис. 1). Высокий коэффициент детерминированности ($R^2 = 0,987$) свидетельствует о хорошем приближении экспериментальных и эмпирических значений.

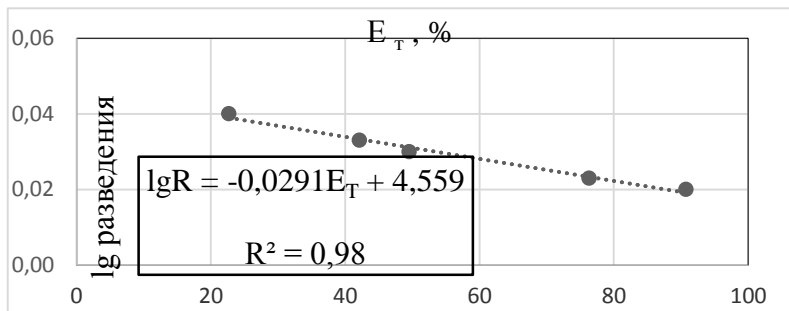


Рис. 1. Зависимость $lgR=f(E_T)$

Подставляя значения фитоэффектов $ER=20\%$ и $ER=50\%$ в полученное уравнение регрессии ($lgR = -0,0291E_T + 4,559$) вычисляем пороговое (1) и среднеэффективное разведения (2):

$$(1) lgR = -0,0291 \times 20 + 4,559$$

$$lgR=4$$

$$LimR=10000$$

$$(2) lgR = -0,0291 \times 50 + 4,559$$

$$lgR = 3,104$$

$$ER_{50}=10^{3,104}$$

В соответствии с критериями ER₅₀ степень опасности ингибитора по фитотоксичности может быть оценена как высокая, на уровне 1 класса. При разведениях экстракта более 10000 может быть обеспечена безвредность данного реагента для растений.

Литература

1. И.Р.Хамзин, П.С.Сайтмуратов, А.А.Исламутдинова Синтез ингибитора кислотной коррозии на основе хлорорганических соединений и карбамида. – Материалы XXVIII Международной научно технической конференции «Реактив-2014».-Уфа: Издательство «Реактив»,2014.-294 с.

2. Обоснование класса опасности отходов производства и потребления по фитотоксичности. Методические рекомендации. – Библиотека гостей, стандартов и нормативов.

© И.Р. Хамзин, П.С. Сайтмуратов, Ю.А.Хакимова, А.А. Исламутдинова, 2014 г.

УДК 547.94:547.8

СИНТЕЗ ШЕСТИЧЛЕННЫХ N-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА L-АНАБАЗИНА И 1,3-ГЕКСАГИДРОПИРИМИДИНА

Ибрагимова Г.Б.¹, Латыпова Д. Р.²

¹Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт органической химии Уфимского научного центра Российской академии наук

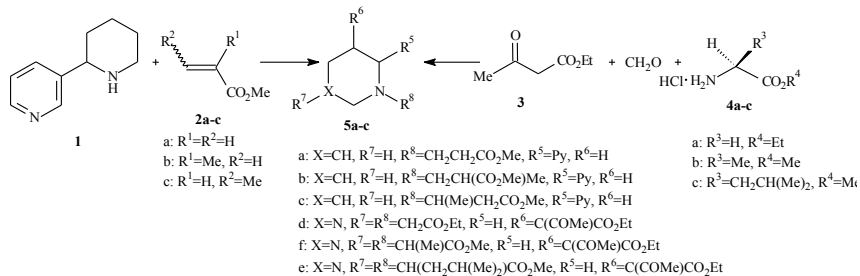
Гетероциклические системы, содержащие в своем составе аминокислотный фрагмент, привлекают внимание своим высоким потенциалом биологической активности.

В данной работе предложены подходы к синтезу новых производных 1,3-гексагидропиримидина и l-анабазина, содержащие аминокислотный фрагмент, перспективные в качестве биологически активных соединений.

Анабазин – алкалоид, содержащийся в растении *Anabasisaphylla L.* (ежовник безлистный семейства маревых (*Chenopodiaceae*)). Производные анабазина обладают высокой физиологической активностью (фунгицидная, антибактериальная, антиоксидантная и т.д.), что предопределяет разработку новых методов получения соединений анабазинового ряда, представляющих интерес в качестве перспективных препаратов для медицины. Производные, содержащие гексагидропиримидиновый фрагмент, являются биологически активными соединениями, обладающими противоопухолевой, антитромбоцитарной, антибактериальной, антиаритмической активностями. Гексагидропиримидиновый скелет встречается в алкалоидах, таких как

вербаметин и вербаметрин.

В рамках данной работы разработан каталитический метод получения β -аминокислот, содержащих анабазиновый фрагмент, на основе взаимодействия анабазина с эфирами непредельных кислот **2a-c** и синтезированы γ -аминоспирты анабазинового ряда.



В присутствии каталитических количеств NaOH присоединение эфиров непредельных кислот **2a-c** проходит за 30 мин при температуре 40°C с выходом до 98% (мольное соотношение эфира непредельной кислоты : анабазин : NaOH = 15 : 14 : 1).

Кроме того, нами предложен удобный способ получения *N,N'*-дизамещённых аминокислот неприродного происхождения, содержащих гексагидропиримидиновый фрагмент, основанный на конденсации ацетоуксусного эфира с формальдегидом и гидрохлоридами эфиров природных аминокислот (глицина, *l*-аланина и *l*-лейцина) в условиях реакции Манниха. Данную реакцию проводили в системе AcONa – AcOH – NaOH (pH 4) при комнатной температуре в течение 48 ч при мольном соотношении СН-кислота : СН₂O : аминокислота равном 1 : 15 : 4.

© Ибрагимова Г.Б., Латыпова Д. Р., 2014 г.

УДК 620.197.3:546.221

АНТИКОРРОЗИЙНАЯ АКТИВНОСТЬ БИЯДЕРНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Клецкова Д.И., Ахметова В.Р, Файзрахманов И.С., Камалтдинов И.М.
 Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия.

Для защиты нефтепромыслового оборудования применение ингибиторов на основе четвертичных солей аминов является одним из наиболее целесообразных методов борьбы с коррозией [1, 2]. Причем высокими защитными свойствами характеризуются азотсодержащие гетероциклы и их комплексные соединения вследствие их эффективной адсорбционной способности [3].

Задачей настоящего исследования является поиск эффективных ингибиторов кислотной коррозии металлов на основе *N*- и *S*-содержащих гетероциклов, способных образовывать защитную пленку на поверхности металлов в результате tandemных процессов адсорбции и хемосорбции.

Нами предположено, что насыщенные биядерные тиаза-гетероциклы и их *N*-координированные аддукты, имеющие атомы *S* с неподеленной электронной парой и *N*-четвертичные катионы, весьма перспективны в качестве ингибиторов кислотной коррозии анионного и катионного типов. Кроме того, сульфидная сера может образовывать ковалентные связи с металлами наряду с комплексными связями.

В основе синтеза мы использовали мультикомпонентную реакцию тиометилирования аминов с помощью формальдегида и сероводорода, приводящую к формированию, как известно [4, 5], 1,3,5-дитиазинанов. С целью сборки биядерных гетероциклов в реакцию тиометилирования вовлекались замещенные пиперазины, содержащие в молекуле несколько аминогрупп.

Антикоррозионные свойства изучали по стандартной методике [6] при выдерживании пластин в 0,5 М растворе HCl в течение 5 часов. Установлено, степень эффективности ингибирования биядерных гетероциклов составляет 85,0- 98,0 %. Морфология поверхности пластин стали, подвергнутых кислотной коррозии без ингибитора и в присутствии биядерных гетероциклов, на нано и микроуровне изучена с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Методом атомно-силовой микроскопии установлено, что среднее значение шероховатости поверхности свежего сплава и сплава в агрессивных средах (0,5 М HCl) без ингибитора составила 26 и 256 нм соответственно, а с ингибиторами - биядерными гетероциклами с концентрацией 0,005 М значение средней шероховатости в зависимости строения биядерных гетероциклов не превышает 30 нм.

Таким образом, можно сделать вывод, что насыщенные *N*- и *S*-гетероциклы за счет физической и химической сорбции образуют защитный слой, уменьшая на поверхности стали шероховатость.

Литература

1. Решетников С.М. Ингибиторы кислотной коррозии металлов. С.-Пб.: Химия, 1986, 144 с..
2. Иванов Е.С. Ингибиторы коррозии металлов в кислых средах. Москва.: Металлургия, 1986, 175 с.
3. Патент 2402641 РФ. Ингибиторы кислотной коррозии и способы их получения // Алыков Н.М., Великородов А.В., Пичугина Е.А.// Опубликовано 27.10.2010.

4. Akhmetova V.R., Nadyrgulova G.R., Niatshina Z.T. and Dzhemilev U.M.. Cyclothiomethylation of primary amines with formaldehyde and hydrogen sulfide to nitrogen- and sulfur-containing heterocycles (review) // Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2009, vol. 45, No.10, 1155-1176

© Клецкова Д.И., Ахметова В.Р., Файзрахманов И.С.,
Камалтдинов И.М., 2014 г.

УДК 547.56:546.221

ДОМИНО СИНТЕЗ БИЯДЕРНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Клецкова Д.И., Ахметова В.Р., Файзрахманов И.С.

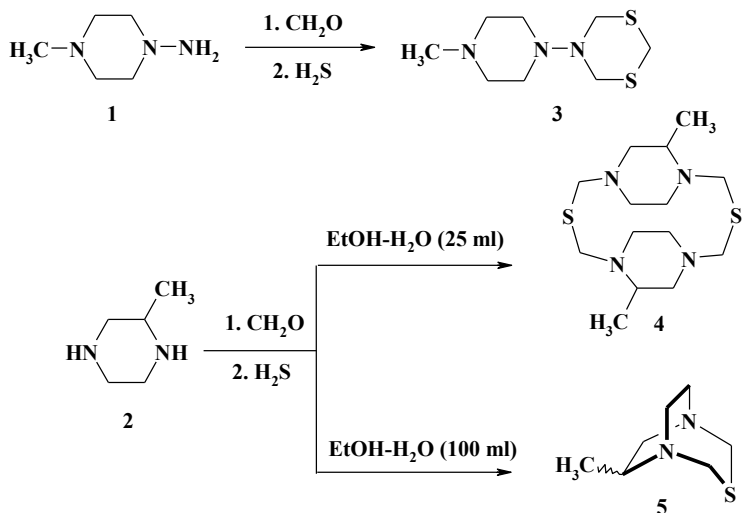
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

С целью сборки биядерных гетероциклов в реакцию тиометилирования вовлекались замещенные пиперазины, содержащие в молекуле несколько аминогрупп [1,2].

В качестве исходных гетероциклических аминсубстратов использовали 1-амино-4-метилпиперазин **1** и 2-метилпиперазин **2**. На основе модельной реакции тиометилирования 1-амино-4-метилпиперазина **1** установили, что селективность синтеза целевого 1-(1,3,5-дитиазин-2-ил)4-метилпиперазина **3** зависит от температуры, последовательности прибавления реагентов и их концентрации. Результативной является реакция амина **1** в растворе этанола с водным раствором формальдегида (12%) в мольном соотношении 1:3 (scheme 1) при 0° С с последующим барботированием в реакционную смесь избыточного количества H₂S (~3 моль). В результате образуется кристаллический продукт **3** с выходом ~80%.

Для осуществления внутримолекулярной гетероциклизации соединения **2** применили прием сильного разбавления (в 5 раз) реакционной смеси. Действительно, в этих условиях селективно происходило формирование 6-метил-3-тиа-1,5-диазабицикло[3.2.2]нонана **5**.

Строение соединений **3** - **5** подтверждается данными ЯМР ¹H и ¹³C и масс-спектрометрии. В масс-спектрах для всех соединений наблюдаются пики молекулярных ионов. Отметим, что для бицикла **5** фиксируются два соединения с молекулярным ионом [M] с m/z 180. Вероятно, вследствие пространственной изомерии метильной группы образуются *a* и *e* изомеры. Действительно, в спектрах ЯМР ¹H и ¹³C проявляются по два сигнала: в области δ_H 0.98 и 1.05 м.д. протонов метильной группы и в области δ_C 13.9 и 16.5 м.д. атомов углерода метильной группы. В спектре ЯМР ¹H также наблюдается мостиковые этиленовые протоны, которые резонируют в виде дублетов в области 3.90 и 4.75 м.д. Характерно, что для гетероциклов **3** и **5** вследствие быстрой инверсии циклов протоны в ядрах резонируют в виде синглетов.



Литература

1. Akhmetova V.R., Nadyrgulova G.R., Niatshina Z.T. and Dzhemilev U.M.. Cyclothiomethylation of primary amines with formaldehyde and hydrogen sulfide to nitrogen- and sulfur-containing heterocycles (review) // Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2009, vol. 45, No.10, 1155-1176
2. Akhmetova V.R., Khabibullina G.R., Rakhimova E.B., Vagapov R.A., Khairullina R.R., Niatshina Z.T., Murzakova N.N.. Multicomponent reactions of amines with aldehydes and H₂S as efficient route to heterocycles and thioaza macrocycles // Mol. Divers, 2010, 14, 463-471 // DOI 10.1007/s11030-010-9248-3

© Клецкова Д.И., Ахметова В.Р., Файзрахманов И.С., 2014 г.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СХЕМ СИНТЕЗА 2,3-БИС(БУТОКСИМЕТИЛ)-ГЕМ-ДИХЛОРЦИКЛОПРОПАНА

Матвеев Е.А., Тухватшин В.С., Талипова Г.Р.

При выборе схем синтеза практически ценных соединений актуальна возможность количественной оценки их эффективности.

Нами предлагается метод количественной оценки химических превращений по следующей формуле: $E = STR * Y * OP * T * P * t_p$

где *STR* – изменение структурной сложности от субстрата к продукту по Берцу;

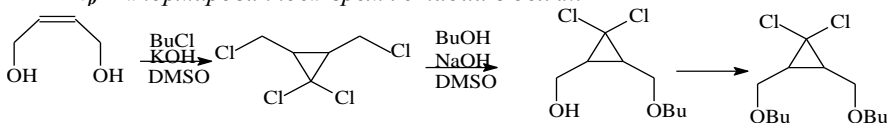
Y – суммарный выход конечного продукта в долях;

OP – энантиомерная чистота в долях;

T – приведенный интервал температур, в котором осуществляется схема, в долях;

P – приведенный интервал давлений, в котором осуществляется схема, в долях;

t_p – «нормированное» время стадии в долях.



Структурную сложность субстратов и 2,3-бис(бутоксиметил)-гем-дихлорциклопропана определяли по Берцу с использованием теории графов. Остальные величины определены в долях 1.

В качестве примера нами использованы две схемы синтеза 2,3-бис(бутоксиметил)-гем-дихлорциклопропана (схема 1 [1], схема 2 [2]).

Результаты расчетов приведены в табл.

Таблица Результаты расчетов эффективности схем синтезов 2,3-бис(бутоксиметил)-гем-дихлорциклопропана

	STR	Y	OP	ΔT	ΔP	t_p	E
Схема 1	47,51	0,98	0,5	0,99	1	0,15	0,0620
Схема 2	47,51	0,8	0,5	0,92	1	0,14	0,0429

Из представленных данных следует, что наиболее эффективной из рассмотренных схем является последовательность превращений, описанная в работе [1].

Литература

- Аминова Э.К. Синтезы на основе цис-2-бутен-1,4- диола // Башкирский химический журнал. -2012. - Т.19.-№3. С. 5-7.
- Аминова Э.К. Синтезы на основе цис-1,4-дихлорбутена-2 / Автореферат на соискание ученой степени к.н. -Уфа, 2013.- 22 с.

СИНТЕЗ ФЕНИЛТЕТРАЗОЛСУЛЬФАНИЛ- И МЕТАНОФУЛЛЕРЕНИЛМОДИФИЦИРОВАННЫХ МОНОМЕРОВ НОРБОРНЕНОВОГО РЯДА И СОПОЛИМЕРА НА ИХ ОСНОВЕ

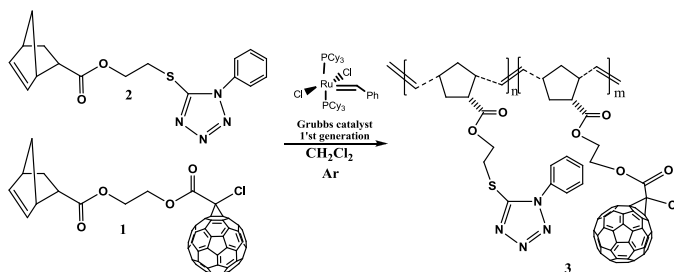
Михеев В.В.¹, Торосян С. А.², Загитов В.В.¹, Биглова Ю. Н.¹

¹Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

²Институт органической химии УНЦ РАН, г.Уфа, Россия

Фуллеренсодержащие полимеры ценны уникальными возможностями технологического применения, в особенности, в качестве п-типа проводящих материалов в оптоэлектронных устройствах. Подобные материалы должны обладать достаточной стабильностью в эксплуатационных условиях и показывать хорошую растворимость в используемых органических растворителях, что важно для приготовления тонких пленок. Особый же интерес к производным тетразола обусловлен спецификой их физико-химических свойств – уникальным сочетанием высокой термостабильности и значительной энергоемкости. В этой связи, целью данной работы является синтез фенилтетразолсульфанил- и метанофуллеренилмодифицированных мономеров норборненового ряда **1** и **2** и сополимера **3** на их основе в условиях метатезисной полимеризации с раскрытием цикла в присутствии металлокомплексного катализатора Граббса I поколения (схема 1). Мономеры **1** и **2** получены на базе моноакрилового эфира этиленгликоля путем соответствующих модификаций по гидроксильной группе и активированной двойной связи.

Схема 1



При проведении сополимеризации в эквимольных соотношениях мономеров **1** и **2** синтезирован сополимер **3** с конверсией 74%. Структуры мономеров и сополимера идентифицированы методами ЯМР ¹H, ¹³C, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии. Содержание звеньев фуллерен- и тетразолсодержащих мономеров в сополимере **3** определяли по соотношениям интегральных интенсивностей различающихся сигналов SCH₂ и OCH₂ в спектре ЯМР ¹H. Эти данные указывают о 30%-ном «вхождении» мономера **1** в состав сополимера **3**.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 14-02-97008, № 14-03-31610 мол_а.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СИНТЕЗОВ КАПАРРАТРИЕНА

Саяхов Р.Р., Тухватшин В.С., Вакулин И.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При выборе схем синтеза практически ценных соединений актуальна возможность количественной оценки их эффективности. Нами предлагается метод количественной оценки химических превращений по следующей формуле

$$E = STR \cdot Y \cdot OP \cdot \Delta T \cdot \Delta P \cdot t_p$$

где **STR**-изменение структурной сложности от субстрата к продукту по Берцу; **Y**-суммарный выход конечного продукта в долях; **OP**-энантиомерная чистота в долях; ΔT -приведенный интервал температур, в котором осуществляется схема, в долях; ΔP -приведенный интервал давлений, в котором осуществляется схема, в долях; t_p -«нормированное» время стадии в долях. Структурную сложность субстратов и капарратриена определяли по Берцу с использованием теории графов. Остальные величины определены в долях. В качестве примера использованы 2 схемы синтеза капарратриена.

Схема 1

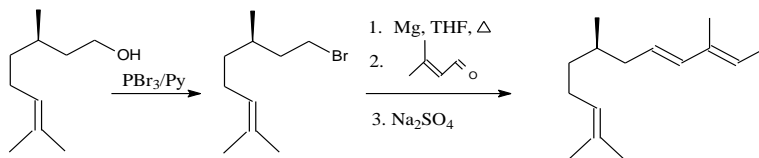


Схема 2

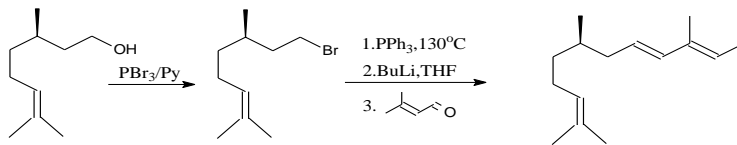


Таблица 1

Результаты расчетов эффективности схем синтезов капарратриена

	STR	Y	OP	ΔT	ΔP	t_p	E
Схема 1	0,744	0,665	0,5	0,933	1	0,316	0,073
Схема 2	0,746	0,644	0,5	0,655	1	0,375	0,059

Из приведенных в табл. 1 данных следует, что наиболее эффективной является последовательность превращений, описанная схемой 1.

© Саяхов Р.Р., Тухватшин В.С., Вакулин И.В., 2014 г.

УДК 547.596 + 547.596.4

ОКИСЬ (*R*)-4-МЕНТЕН-3-ОНА В РЕАКЦИИ РИТТЕРА

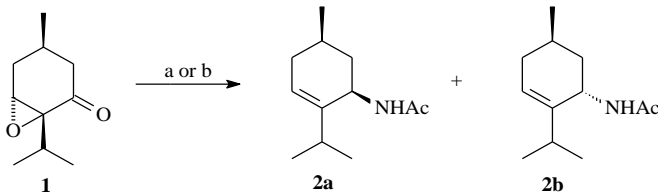
Тухватшин В.С., Ишмуратов Г.Ю., Яковлева М.П., Муслухов Р.Р.,
Талипов Р.Ф.

ФГБУН Институт органической химии Уфимского научного центра РАН
ФГБОУ ВПО Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Удобным и распространенным методом синтеза потенциально фармакологически активных ацетамидов является реакция Риттера с участием производных терпенов [1].

В связи с этим нами изучено поведение эпоксида (*R*)-4-ментен-3-она (**1**) [2] в условиях этой реакции. Так, по данным капиллярной ГЖХ и ЯМР установлено, что окись (**1**), подобно (1*R*,3*R*)-*n*-ментен-3-олу [3], при использовании в качестве катализаторов как H₂SO₄, так и BF₃·OEt₂ образует смеси ацетамидов (**2a**) и (**2b**) в соотношениях (56 : 44) и (70 : 30) соответственно.

Образование ацетамидов (**2a**) и (**2b**) свидетельствует о том, что указанная реакция протекает нестандартно – с участием карбонильной группы окиси (**1**) в образовании ацетамидов (**2a**) и (**2b**) - по аналогии с производными адамантана [4].



Реагенты и условия: а) MeCN, H₂SO₄, 20°C (65%); б) MeCN, BF₃·OEt₂, 80°C (52%).

Литература

1. Карташов В.Р., Малкова К.В. и др. Гетерополикислоты - новые катализаторы реакции Риттера // Журн. орг. химии, 2006, Т. 42, С. 986-989.
2. Katsuhara J and etc. Absolute configuration of menthenone oxide // Bull. Chem. Soc. Jpn., 1970, V. 43, P. 1584-1585.
3. Ишмуратов Г.Ю., Тухватшин В.С., Яковлева М.П. и др. (*R*)-*n*-Мент-4-ен-3-он и его производные в реакциях с азотсодержащими реагентами // Химия. природ. соедин., 2014, № 2., С. 241-244.
4. Averina N.A., Zefirova O.N., Zefirov N.S. and etc. Synthetic approaches to physiologically active polycyclic compounds: V. Ritter reaction of 4-hydroxyadamantan-2-one // Russ. Journal Org. Chem., 2004, V. 40, P. 1437-1440.

© Ишмуратов Г.Ю., Тухватшин В.С., Яковлева М.П.
Муслухов Р.Р., Талипов Р.Ф. 2014 г.

(R)-*n*-МЕНТ-4-ЕН-3-ОН В СИНТЕЗЕ (S)-(+)-ГИДРОПРЕНА

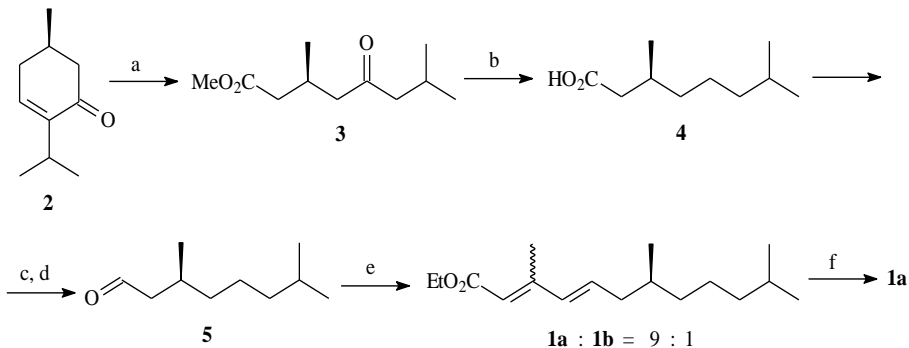
Г.Ю. Ишмуратов, В.С. Тухватшин, Р.Ф. Галипов

ФГБУН Институт органической химии Уфимского научного центра РАН
ФГБОУ ВПО Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

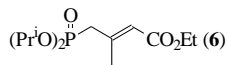
Действующим веществом широко известного гормонально-ювенильного препарата гидропрена (**1**) является этиловый эфир 3,7,11-триметил-2*E*,4*E*-додекадиеновой кислоты.

Нами осуществлен новый путь синтеза оптически чистого диеноата (**1**) из метил (3*S*)-3,7-диметил-5-оксооктаноата (**3**) - продукта озонлиза доступного из *l*-ментола [1] (*R*)-4-ментен-3-она (**2**) в присутствии пиридина или триэтиламина в среде смеси (1 : 1) хлористого метилена и метанола [2].

Последующее дезоксигенирование эфира (**2**) по Хуанг-Минлону, сопровождающееся омылением сложноэфирной группы, дало (3*S*)-3,7-диметил-5-оксооктановую кислоту (**4**), которая последовательными реакциями гидридного восстановления и окисления по Кори переведена в альдегид (**5**). Конденсация последнего с фосфонатом (**6**) в присутствии КОН и [*n*-Bu₄N]OH, согласно [13], ведет к образованию целевого (S)-(+)-гидропрена (**1**) в виде смеси (9 : 1, по данным ГЖХ и ПМР) (2*E*,4*E*)-(**1a**)- и (2*Z*,4*E*)-(**1b**)-изомеров с общим выходом 32% в расчете на эфир (**3**). Из соотношения интенсивностей синглетных сигналов протонов метильной группы при Δ²-связи в области 2.26 м.д. (*E*-изомер **1a**) и 1.98 м.д. (*Z*-изомер **1b**) в спектре ПМР следует, что преобладающим является (2*E*,4*E*)-стереоизомер (**1a**). Индивидуальный (2*E*,4*E*)-изомер (**1a**) выделен колоночной хроматографией.



Реагенты и условия: а) O_3 , Pu или NEt_3 , CH_2Cl_2 - $MeOH$ (1 : 1) [11]; б) $N_2H_4 \cdot H_2O$; затем KOH , Δ ; в) $LiAlH_4$, Et_2O ; д) PCC , CH_2Cl_2 ; е)



, $[n-Bu_4N]OH$, KOH ; ф). SiO_2 .

Литература

1. Treibs W., Albrecht H. // J. Prakt. Chem., 1961, V. 13, P. 291.
2. Ишмуратов Г.Ю., Латыпова Э.Р., Баннова А.В. и др. // Вестник Башкирского университета, 2010, Т. 15, № 1, С. 18.
3. Крышталъ Г.В., Жданкина Г.М., Серебряков Э.П. // Изв. АН. Сер. хим., 1993, № 6, С. 1094.

© Ишмуратов Г.Ю., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф. 2014 г.

СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 543.555

ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ КИСЛОТНО-ОСНОВНОГО ТИТРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА PLS

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Барановская В.А.,
Майстренко В.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Титриметрические методы в анализе объектов окружающей среды имеют широкое распространение при определении многих загрязнителей, как органической, так и неорганической природы. Использование титриметрических реакций различных типов расширяют возможности каждого инструментального метода анализа, в котором физико-химический параметр согласованно меняется в процессе титрования как функция природы и концентрации титруемых веществ. Неизбежно применение способа титрования в условиях малой селективности отклика, когда прямое определение индивидуальных веществ в реальных объектах затруднительно. К таким методам, например, относится кондуктометрия. Развитие электроники и компьютерных технологий позволило развить кондуктометрические методы анализа и разделять импеданс системы на две составляющих – активную и реактивную. Результаты исследований в области импедансометрии демонстрируют широкие возможности метода в исследовании межфазного переноса заряда, диффузии, адсорбции и других явлений на границе раздела фаз. Импедансная спектроскопия в потенциодинамическом режиме регистрации спектров увеличивает разрешающую способность метода и позволяет на уровне атомов и молекул контролировать динамику межфазных процессов. Для химиков-аналитиков импедансометрия открывает новые возможности анализа на поверхности, определения микроколичеств веществ с высокой чувствительностью.

В данной работе нами предложен новый способ титрования с использованием импедансометрии и проекции на латентные структуры PLS. Разработан алгоритм расшифровки многомерных кривых титрования для вычисления последовательных точек эквивалентности в условиях протекания кислотно-основных реакций. На примере титрования сильных и слабых многоосновных кислот оценены чувствительность и точность импедансометрического титрования, проведена сравнительный анализ результатов потенциометрического, визуального и импедансометрического титрования кислот и оснований.

© Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Барановская В.А.,
Майстренко В.Н., 2014 г.

**ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ИССЛЕДОВАНИЯ
СОРБЦИИ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ МЕТОДОМ PLS**

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Баймуратова Г.Р., Кудашева Ф.Х.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Импедансная спектроскопия - метод исследования различных объектов, основанный на измерении и анализе зависимостей импеданса от частоты переменного тока. Разные объекты и процессы характеризуются разными зависимостями активного и реактивного сопротивлений от частоты, что делает возможным использование этого метода для изучения процессов, протекающих как на поверхности исследуемых объектов, так и в растворах. Результаты исследований в области импедансометрии демонстрируют широкие возможности метода в исследовании межфазного переноса заряда, диффузии, адсорбции и других явлений на границе раздела фаз. Импедансная спектроскопия в потенциодинамическом режиме регистрации спектров увеличивает разрешающую способность метода и позволяет на уровне атомов и молекул контролировать динамику межфазных процессов.

При создании новых материалов, таких как сорбенты, мембраны, важное значение имеет информация о кинетике процессов сорбции-десорбции, концентрирования, переноса веществ, влиянии мешающих ионов и др. С этой целью используются различные инструментальные методы, каждый из которых имеет свои ограничения. Актуальным является разработка методов on-line и in-line контроля процессов сорбции в динамических режимах (в условиях формирования структуры сорбента, изменения матрицы раствора при переходе от однокомпонентных растворов к многокомпонентным, при протекании химических реакций с участием сорбатов и мешающих ионов). С этой целью необходимо применять универсальные методы контроля химического состава как на поверхности сорбентов (или внутри материалов), так и в растворах. Не менее важной является задача миниатюризации детектирующих устройств. В этой связи электрохимические методы обладают преимуществом перед другими методами анализа, позволяют применять микроэлектроды и вводить их непосредственно в исследуемые образцы. В данной работе предложены электрохимические системы и хемометрические подходы к извлечению информации о кинетике сорбции из спектральных данных импеданса. Методом проекций на латентные структуры (PLS) установлены оптимальные условия преобразования многомерной спектральной информации импеданса в кинетические кривые сорбции-десорбции с использованием кинетического фактора t . Представлены кинетические кривые сорбции алифатических спиртов на производных урацила, полученные методом импедансной спектроскопии.

УДК 543.555

ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА PLS

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Барановская В.А., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последние двадцать лет востребованность импедансной спектроскопии как метода изучения процессов и свойств в фундаментальных и прикладных исследованиях чрезвычайно возросла. Его применяют в качестве информативного рабочего инструмента в различных областях электрохимии, физике, науках о материалах. С одной стороны, это обусловлено возросшим уровнем технического и программного обеспечения метода, что сокращает временные затраты на получение и обработку экспериментальных данных. С другой стороны, сейчас разработаны и научно обоснованы подходы, позволяющие получить уникальную информацию как о свойствах изучаемой системы, так и о механизме процессов, протекающих в ней. Это позволяет создавать новые принципы анализа сложных многокомпонентных смесей как органической, так и неорганической природы с использованием импедансометрии. К таким смесям относятся, например, нефть или нефтяные эмульсии, в присутствии которых определение многих веществ становится затруднительным. Особенно актуален контроль содержания АПАВ в нефтедобывающей промышленности, применяемый в различных технологиях повышения нефтеотдачи пластов, подготовке и транспортировки нефти.

Среди методов определения АПАВ в водных средах и водонефтяных эмульсиях наиболее широко в настоящее время используются методы спектрофотометрии и потенциометрии. Однако, эти методы при использовании к многокомпонентным водно-органическим средам и водонефтяным эмульсиям, содержащим вязкие органические компоненты, нефть, требуют предварительного разделения и очистке, тем самым усложняя и удорожая анализ.

В данной работе предложены электрохимические системы и хемометрические подходы к извлечению информации об определении АПАВ на основе олефинсульфонатов натрия в водонефтяных эмульсиях с помощью импедансометрического способа. Важным преимуществом способа является высокая чувствительность измерений, отсутствие требований к селективности электродов, присутствию окрашенных компонентов, наличию гетерогенных фаз и др. Методом PLS установлены оптимальные условия преобразования многомерной спектральной информации импеданса в кривые титрования с использованием кинетического фактора t .

УДК 543.544

АДСОРБЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА АКТИВИРОВАННОЙ УГЛЕРОДНОЙ ТКАНЬЮ

Фазылова Г.Ф., Валинурова Э.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время, активированные углеродные волокна привлекают все большее внимание, так как их отличают высокая пористость, сочетание фильтрующих и высоких сорбционно-кинетических характеристик с удовлетворительной прочностью, термической и радиационной стойкостью [1]. В то же время, наличие различных текстильных форм, в виде волокон, тканей, лент, войлока, позволяет разнообразить аппаратное оформление сорбционных процессов, что в свою очередь, расширяет возможность их применения во многих областях техники [2].

Целью данной работы явилось исследование сорбционной активности активированной углеродной ткани УВИС-АК к нитро- и хлор-производным анилина. В водные растворы анилинов с концентрациями 0.02–0.8 мг/мл помещали доведенные до постоянной массы навески адсорбентов (0.0200г), перемешивали, выдерживали до установления равновесия при комнатной температуре. Равновесные концентрации анилинов определяли методом высокоэффективной жидкостной хроматографии. Анализ проводили на жидкостном хроматографе Hewlett Packard 1090 с диодно-матричным детектором.

Установлено, что все углеродная ткань количественно извлекает нитроанилины. Характеристическая энергия взаимодействия с поверхностью исходного углеродного материала для нитроанилинов возрастает в ряду: п-нитроанилин < м-нитроанилин < о-нитроанилин от 11.8 до 15.9 кДж/моль.

Сравнение полученных экспериментальных данных, обработанных с использованием двух моделей мономолекулярной адсорбции (табл.), показало, что для углеродной ткани для всех производных анилина в приведенных условиях эксперимента изотермы адсорбции лучше описываются уравнением Лэнгмюра, о чем свидетельствуют рассчитанные коэффициенты корреляции спрямленных изотерм ($r^2=0.999$).

Таблица

Сорбционные параметры производных анилина активированной
углеродной тканью

Сорбаты	Уравнение Лэнгмюра				Уравнение Дубинина-Радушкевича		
	a_m , г/г	$-\Delta G$, кДж/ моль *К	r^2	К	E , кДж/ моль	a_0 , г/г	r^2
о-Нитроанилин	0.77	15.9	0.9998	650	15.9	0.99	0.9368
м-Нитроанилин	0.83	14.7	0.9991	400	17.1	1.12	0.9804
п-Нитроанилин	0.91	12.8	0.9988	260	11.8	1.21	0.9738
о-Хлоранилин	0.91	12.8	0.9556	183	-	-	-
м-Хлоранилин	0.91	9.8	0.9776	55	13.2	1.39	0.9795
п-Хлоранилин	1.00	14.2	0.9986	333	12.3	2.37	0.9632
2,4- Динитроанилин	1.00	7.9	0.9931	25	14.8	0.72	0.9624

Литература

1. Валинурова Э.Р., Фазылова Г.Ф., Хатмуллина Р.М. и др. // Вестник Башк. ун-та. 2010. Т. 15. № 3. С. 604–606.
2. Варшавский В.Я. Углеродные волокна. М.: Варшавский, 2007. 500 с.
© Фазылова Г.Ф., Валинурова Э.Р., 2014 г.

УДК 543.554

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ИДЕНТИФИКАЦИИ ТЕХНИЧЕСКИХ И ПИЩЕВЫХ МАСЕЛ

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Мухамедьяров Т.Н.,
Майстренко В.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Многие проблемы применения вольтамперометрии в аналитическом контроле, связанные с недостаточной селективностью сигнала, можно

разрешить, если вместо одного электрода использовать несколько, имеющих различные характеристики сигналов. За такими системами закрепилось название «мультиэлектродные системы» или «электронный язык». Побудительными мотивами применения таких систем, являются:

- расширение перечня определяемых соединений;
- одновременное определение нескольких соединений, сигналы которых частично перекрываются друг с другом и с сигналами матричных или мешающих компонентов;
- установление значений сигналов нескольких компонентов, взаимно влияющих друг на друга;
- получение непараметрической информации, связанной с химическим составом и качеством объекта анализа.

Первые две системы не отличаются от традиционных вольтамперометрических систем. Другие же – предполагают обработку массива данных измерений с помощью методов хемометрики, особенно в случае нелинейных и многопараметрических концентрационных зависимостей сигнала, и выделение сигналов индивидуальных соединений. Отдельный интерес представляют вольтамперометрические системы, призванные решать задачи, связанные с установлением различий и близости объектов по априорным или апостериорным критериям, которые применяются в вольтамперометрических экспертных системах типа «электронный язык».

В докладе рассмотрены наиболее часто применяемые в экологическом контроле «интеллектуальные» вольтамперометрические системы, приведены примеры обработки данных вольтамперометрических измерений, основанные на математическом и статистическом моделировании. Большое внимание уделено вольтамперометрическим устройствам типа «электронный язык», приведены примеры их использования в электрохимическом анализе для идентификации состава и идентификации природы многокомпонентных растворов электроактивных и неэлектроактивных веществ, таких как моторные масла и пищевые оливковые и подсолнечные масла, рассмотрены перспективы развития исследований в данной области, применяемые электроды, способы их модифицирования, модулирования сигналов, аппаратура.

© Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Мухамедьяров Т.Н.,
Майстренко В.Н., 2014 г.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ
ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ
РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫМ МЕТОДОМ АНАЛИЗА**

Бадикова А.Д., Файзрахманов И.С., Алехина И.Е., Клецкова Д.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из наиболее эффективных и технологически несложных способов уменьшения потерь металла от коррозии является ингибиторная защита. Защитный эффект используемых сегодня ингибиторов обеспечивается в основном соединениями аминного типа, сложными эфирами, продуктами оксиэтилирования и нитрования, а также фосфорсодержащими соединениями [1]. В настоящее время есть тенденция к усложнению технологий производства ингибиторов и использованию в качестве сырья промышленных отходов. Исследования в области создания и изучения свойств ингибиторов коррозии современными методами анализа являются актуальными. Тем не менее, основным методом анализа антикоррозионных свойств остается гравиметрический метод, отличающийся длительностью выполнения.

В этой связи целью работы явилось исследование возможности определения защитного эффекта от коррозии экспериментальных образцов ингибиторов. Синтез ингибиторов коррозии осуществлялся с вовлечением сероводорода, при этом получали S, N-содержащие соединения. Испытания защитных свойств образцов проводились на пластинках марки НКТ в соответствии с гостированной методикой [2]. Анализ самих пластинок после испытаний в агрессивной среде с ингибитором и без него осуществлялся рентгенофлуоресцентным спектральным методом анализа (РФА). Анализ проводился на энергодисперсионном рентгенофлуоресцентном спектрометре EDX-800 (Shimadzu) с рентгеновской трубкой с родиевым анодом (напряжение 15-50кВ, ток 20-1000 мкА) в атмосфере вакуума методом фундаментальных параметров, при варьировании коллиматора 1-10 мм и времени измерения 10-15 мин, с программным обеспечением, позволяющим использовать каналы [Ti-U], [C-Sc], [Rh-Cd], [Zn-As, Pb], [Cr-Fe], [S-K]. Результаты представлены в таблице 1.

В результате исследований определено, что защитный эффект синтезированных ингибиторов составляет 82-95%. Показано, что S,N-содержащие трициклы обладают высоким эффектом защиты от коррозии и энергодисперсионный рентгенофлуоресцентный спектральный метод анализа можно использовать как экспресс-метод для исследования защитных свойств ингибиторов коррозии.

Таблица 1.

Определение состава пластинки методом РФА

Наименование образца	Содержание, % масс.									
	Fe	Si	Al	Mn	Cl	Cu	Cr	Ca	O	S
Пластинка	98,72	0,40	0,38	0,36	0,13	-	-	-	-	-
Пластинка (среда HCl)	78,36	0,40	-	0,79	0,96	0,23	0,13	-	19,03	0,09
Пластинка (HCl + инг.1)	95,89	0,70	-	0,97	-	0,18	0,17	-	-	2,09
Пластинка (HCl + инг.2)	97,55	0,32	-	0,97	-	0,22	0,15	0,22	-	0,57
Пластинка (HCl + инг.3)	98,18	0,26	-	0,83	0,21	-	0,15	-	-	0,38
Пластинка (HCl + инг.4)	95,62	0,35	-	0,92	0,32	0,23	0,15	-	-	2,40

Литература

1. Рахманкулов Д.Л. Ингибиторы коррозии. Т.3. / Д.Л. Рахманкулов. – М.: Химия, 2005. -346 с.
2. Техника и методы коррозионных испытаний: Учебное пособие / С.Н.Давыдов, И.Г. Абдуллин. – Уфа: УГНТУ, 1998. – С.66-69.

© Бадикова А.Д., Файзрахманов И.С., Алехина И.Е., Клецкова Д.И., 2014 г.

СТАБИЛЬНОСТЬ ДЕЗИНФИЦИРУЮЩЕГО СРЕДСТВА НА ОСНОВЕ ОКИСЛЕННЫХ ФОРМ ЙОДА

Нигметзянов А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Препараты однохлористого йода (ICl) обладают широким спектром антимикробного действия, фунгицидным, противовирусным действием, а также активны по отношению к микобактериям туберкулеза, вирусам, спорам бактерий. Антимикробные препараты, содержащие в качестве действующего вещества йод, в отличие от антибиотиков не вызывают привыкания к ним патогенных микроорганизмов.

Известен способ получения водного раствора однохлористого йода окислением йодида калия йодатом калия, взятыми в стехиометрическом соотношении, в кислой среде (в присутствии избытка соляной кислоты).

В состав раствора однохлористого йода вводятся вещества – стабилизаторы, увеличивающие его устойчивость в разбавленных растворах HCl, поскольку однохлористый йод стабилен только в растворах с высокой концентрацией кислот. В составе, содержащем 0,04% HCl и 0,02% ICl, ICl без стабилизаторов полностью разрушался в течение нескольких минут. В кислой среде композиция коррозионно активная.

Мы добились решения данной проблемы, путем внесения в состав композиции стабилизирующих добавок NaCl и NH₄Cl и противокоррозионных компонентов (этиленгликоля, глицерина). Установлено, что в присутствии 5-10 % NaCl или NH₄Cl концентрация однохлористого йода в составе композиции дезинфицирующего средства уменьшается не более чем на 15% за 1 месяц, а благодаря присутствию 2-10 % глицерина или этиленгликоля наблюдается снижение температуры замерзания композиции (на 10 °С) и коррозионной активности.

Таким образом предложены композиции дезинфицирующего средства:

1. Хлороводородная кислота 5-15%; йодид калия 0,1-0,2%; йодад калия 0,05-0,15%; хлорид натрия 1-10%; вода 80-94%
2. Хлороводородная кислота 5-15%; йодид калия 0,1-0,2%; йодад калия 0,05-0,15%; хлорид аммония 1-10%; вода 80-94%
3. Хлороводородная кислота 5-15%; йодид калия 0,1-0,2%; йодад калия 0,05-0,15%; глицерин 1-10%; вода 80-94%
4. Хлороводородная кислота 5-15%; йодид калия 0,1-0,2%; йодад калия 0,05-0,15%; этиленгликоль 1-10%; вода 80-94%

© Нигметзянов А.Р., 2014 г.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И ПОЛЯРНОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ СОРБЕНТА МСМ-41

Сухарева Д. А.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Поверхность большинства сорбентов неоднородна по своей структуре, что приводит к отсутствию воспроизводимости сорбционных характеристик между различными партиями сорбентов. Представляет интерес выяснить, будет ли для мезоструктурированного пористого материала МСМ-41 (Mobil Composition Materials) наблюдаться геометрическая составляющая адсорбционной неоднородности, и каково будет влияние химической неоднородности.

Исследование проводилось на хроматографе «Агат» с детектором по теплопроводности. Сорбент кондиционировался в токе азота в течение 10 часов при температурах $T_k=170^\circ\text{C}$ и 200°C . Параметры удерживания *n*-алканов (С6-С9), *n*-спиртов (С2-С4), изо-спиртов (С2-С4), сложных эфиров и аренов (С6 - С7) определялись в режиме бесконечного разбавления проб.

Было обнаружено, что константа Генри молекулы этанола больше, чем у молекулы гексана, что связано со значительными донорно-акцепторными взаимодействиями с гидроксильными группами поверхности. В сравнении с силихромом константы Генри алканов и аренов выше, а спиртов – ниже. Это свидетельствует о том, что МСМ-41 менее полярен, чем коммерчески доступные силикагели. Для спиртов и аренов наблюдается существенно большие значения констант Генри на колонке $T_k=170^\circ\text{C}$ по сравнению с колонкой с $T_k=200^\circ\text{C}$. Аналогичные явления наблюдаются и для термодинамических функций адсорбции.

Рассчитанные значения полярности МСМ-41 для образцов, термостатированных при $T_k = 170^\circ\text{C}$ и $T_k = 200^\circ\text{C}$ составляют 28,5 и 22,5 соответственно.

Наличие функции неоднородности по *n*-бутанолу и отсутствие таковой по *n*-гексану свидетельствуют о том, что для МСМ-41 адсорбционная неоднородность характерна лишь в виде химической составляющей. В то же время, геометрическая неоднородность поверхности как наличие энергетических центров с различным геометрическим строением для сорбента МСМ-41 отсутствует.

Абсолютная геометрическая однородность позволяет предполагать ускоренный массообмен при адсорбции, воспроизводимость сорбционных характеристик, и позволяет управлять процессами модификации материала и расширении направлений его использования.

© Сухарева Д. А., 2014 г.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАТОРОВ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕФТИ АСКАРОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ.

Зайнуллина Ф., Ширяева Р.Н.

Башкирский государственный университет г. Уфа, Россия

В настоящее время уделяется большое внимание освоению и вводу в промышленную разработку месторождений высоковязких нефтей. Основной причиной аномальной вязкости тяжелых нефтей является высокое содержание в них смолисто асфальтовых веществ (САВ). На практике для снижения вязкости нефтей используют различные химические реагенты, депрессорные присадки, магнитные поля. Подбор реагентов, как правило, осуществляется эмпирически.

В данной работе исследовано влияние опытных партий модификаторов на вязкостно-температурные свойства высоковязкой нефти Аскарковского месторождения, содержащей 39,9 % масс. парафино-нафтеновых углеводородов, 4,6 % масс. спирто- бензольных смол и 2,6 % масс. асфальтенов. В качестве модификаторов использовали В-45, В-19, W-26, BASF. Действие модификаторов оценивали по изменению динамической вязкости нефти в интервале температур 20-60 °С . Добавки вводили в количестве 0,01-0,2 % масс. Реологические параметры нефти определяли на ротационном вискозиметре «Реотест-2» в интервале скоростей сдвига $D\dot{\gamma}=3-1312 \text{ с}^{-1}$. В области температур 20-40 °С исследуемая нефть является псевдопластической жидкостью. С повышением температуры нефть приобретает свойства ньютоновской жидкости , и ее вязкость становится пропорциональной приложенному усилию. Аналогичный характер зависимостей сохраняется и при введении в нефть реагентов.

Установлено, что реагенты В-45, В-19 в количестве 0,05 % масс. при 20 °С снижают вязкость нефти во всем диапазоне скоростей сдвига.

Таким образом, для снижения вязкости нефти Аскарковского месторождения могут быть рекомендованы реагенты В-45 и В-19 с дозировкой 0,05 % масс.

© Зайнуллина Ф., Ширяева Р.Н., 2014 г.

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ
АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ НА ЭЛЕКТРОДАХ,
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ**Зильберг Р.А., Храмилова А.В., Яркаева Ю.А., Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Развитие аналитических методов, с использованием химически модифицированных электродов является актуальным как в научном, так и в практическом плане, поскольку расширяет ассортимент доступных и эффективных методов контроля лекарственных средств, БАД, биологических жидкостей. Модифицированием электродной поверхности токопроводящими полимерными пленками, которые содержат специфические функциональные группы, можно создать настолько благоприятные условия, что сигнал сенсора будет не только высокочувствительным, но и специфичным. Многие проблемы, связанные с недостаточной селективностью сигнала, можно разрешить, если вместо одного электрода использовать несколько, имеющих различные сигналы-отклики по отношению к определяемому веществу. В этом случае массив экспериментальных данных обрабатывают с помощью методов хемометрики, направленных на установление различий и близости анализируемых объектов по сравнению со стандартными. Такие системы получили название «электронный язык». Основная его идея – использование массива неспецифических сенсоров, обладающих перекрестной чувствительностью, и обработка полученных данных методами хемометрики, с помощью которых анализируемые объекты относят к соответствующим классам. В качестве анализируемых лекарственных препаратов выбрали антиаритмические препараты, входящие в группу β -адреноблокаторов. Были выбраны лекарства с разными действующими веществами: амидарон, анаприлин, атенолол. В качестве модификаторов стеклоэлектродных электродов использовались полиарилентфалиды. Вольтамперограммы антиаритмических препаратов снимали на фоне 0.1 М растворов HCl и NaOH. Обработку полученных вольтамперограмм проводили с помощью МГК-моделирования. Из графиков счетов МГК-моделирования (рис. 1 и 2) видно, что анализ лучше проводить в щелочной среде, т.к. исследуемые препараты содержат аминогруппы, которые окисляются в щелочной среде легче, чем в кислой.

На примере исследования амидорона, анаприлина, атенолола показано, что оптимальными условиями для проведения электрохимического анализа указанных препаратов на предложенных электродах являются скорость развертки потенциалов 1В/с и pH исследуемого раствора >10 (0.1М NaOH в качестве фонового электролита).

Вольтамперограммы антиаритмических препаратов снимали при скоростях развёртки потенциалов 0.1 В/с и 1 В/с. После снятия циклических вольтамперограмм и обработки их методом главных компонент было выявлено, что при скорости развёртки потенциалов 1 В/с происходит лучшее разделение на плоскости главных компонент, а так же скорость анализа выше в 10 раз, что не маловажно при создании экспресс-систем для контроля качества лекарственных препаратов. Поэтому для дальнейших исследований была выбрана скорость развёртки потенциалов 1 В/с.

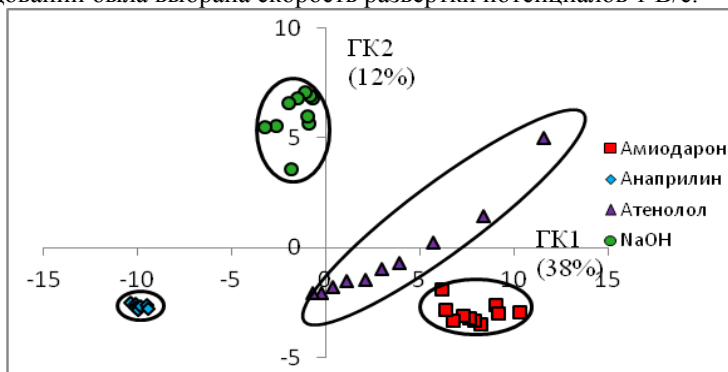


Рис.1. График счетов МГК-моделирования циклических вольтамперограмм амиодарона, анаприлина, атенололана фоне 0.1 М НСl и фонового раствора на СУЭ, при скорости развёртки 1 В/с.

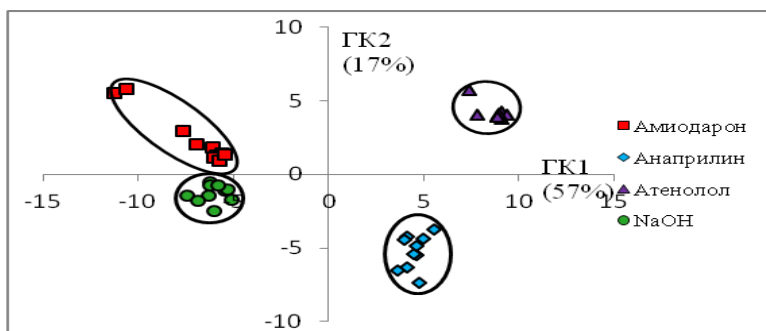


Рис.2. График счетов МГК-моделирования циклических вольтамперограмм амиодарона, анаприлина, атенолола на фоне 0.1 М NaOH и фонового раствора на СУЭ, при скорости развёртки 1 В/с.

УДК 543.552.054.1

ИДЕНТИФИКАЦИЯ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ ЭЛЕКТРОДАХ

Зильберг Р.А., Сидельников А.В., Аничкова Ю.Г., Яркаева Ю.А.,
Сахипова И.И., Батыров Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В связи с повышенными требованиями к качеству лекарственных средств в последнее время возрастает значимость использования современных унифицированных методов их анализа. Наряду с использованием хроматографических, оптических методов определения органических веществ широко используются электрохимические методы анализа, в частности вольтамперометрия.

Впервые для вольтамперометрического анализа антиаритмических лекарственных препаратов предложены новые трехэлектродные мультисенсорные системы с использованием в качестве модификаторов различных полиарилефталидов [1].

С целью установления, подходит ли данный метод для идентификации препаратов, выпущенных разными производителями под одним торговым названием, нами проведена идентификация одинаковых антиаритмических препаратов, выпущенных разными производителями. В качестве исследуемых препаратов были выбраны анаприлин, атенолол и метопролол, так как данные препараты выпускаются большим количеством заводов-изготовителей. Вольтамперограммы снимали на стеклоуглеродном электроде при скорости развёртки потенциала 1 В/с на фоне 0.1 М NaOH.

С использованием метода главных компонент (МГК) и метода SIMCA показана возможность надежной идентификации рассматриваемых антиаритмических препаратов без выделения действующих веществ из лекарственных форм. При этом точность идентификации препаратов по методу SIMCA составляет от 70% и выше.

Показано, что предложенная нами мультисенсорная система оказывается чувствительной к составу таблетированных лекарственных форм, что позволяет надежно различать лекарственные формы одного препарата выпущенные различными производителями.

Литература:

1. Будников Г. К., Евтюгин Г. А., Майстренко В. Н. Модифицированные электроды для вольтамперометрии в химии биологии и медицине. // М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. - 2009. – С.415.

МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ ЭЛЕКТРОДЫ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ

Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.,

Храмилова А.В., Сахипова И.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В связи с повышенными требованиями к качеству лекарственных средств в последнее время возрастает значимость использования современных унифицированных методов их анализа. Наряду с использованием хроматографических, оптических методов определения органических веществ широко используются электрохимические методы анализа, в частности вольтамперометрия.

В последнее время интерес вызывает создание и практическое применение химически модифицированных электродов. На их основе созданы сенсоры, с помощью которых проводят определение большого числа различных веществ, прежде всего лекарственных соединений. При модифицировании на поверхность электродного материала наносят химические соединения, полимерные пленки, которые существенным образом изменяют способность последнего к вольтамперометрическому отклику в результате появления специфических свойств. Причем использование модификаторов позволяет проводить анализ лекарственных веществ без предварительной пробоподготовки и концентрирования [1].

Впервые для вольтамперометрического анализа антиаритмических лекарственных препаратов предложены новые трехэлектродные мультисенсорные системы с использованием в качестве модификаторов различных полиариленфталидов.

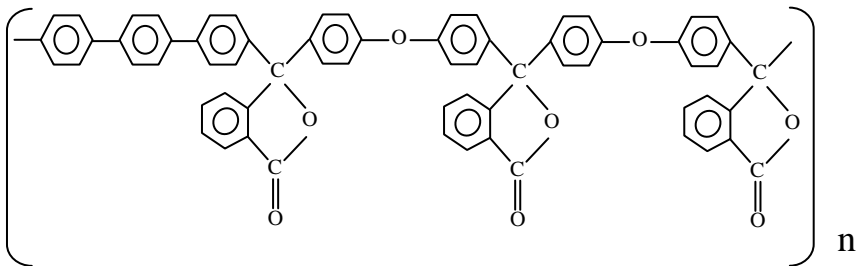


Рис.1. Структура модификатора ПЛ-9.

На примере вольтамперометрического анализа амиодарона, анаприлина, атенолола, метопролола и сотагексала с применением предложенной нами мультисенсорной системы показано, что использование в качестве модификаторов электропроводящих полиариленфталидов с различным числом фталидных звеньев в полимерной цепи при создании мультисенсорной системы электродов позволяет снизить предел обнаружения действующих веществ в указанных препаратах и оптимизировать процесс пробоподготовки за счет исключения стадии предварительного концентрирования и удаления вспомогательных компонентов лекарственных форм.

Эксперимент проводился на фоне 0.1 М NaOH и фонового раствора на СУЭ модификаторами ПЛ-6, ПЛ-9, ПЛ-78 при скорости развёртки 1 В/с.

Исследование полученных вольтамперограмм антиаритмических препаратов проводили с помощью хемометрических методов: метод главных компонент (МГК) и метода SIMCA. Каждый исследуемый антиаритмический препарат имеет индивидуальный отпечаток образа на графике счетов МГК-моделирования. В качестве примера на рис. 2 предоставлен отпечаток образа анаприлина. При этом точность идентификации препаратов по методу SIMCA составляет от 70% и выше.

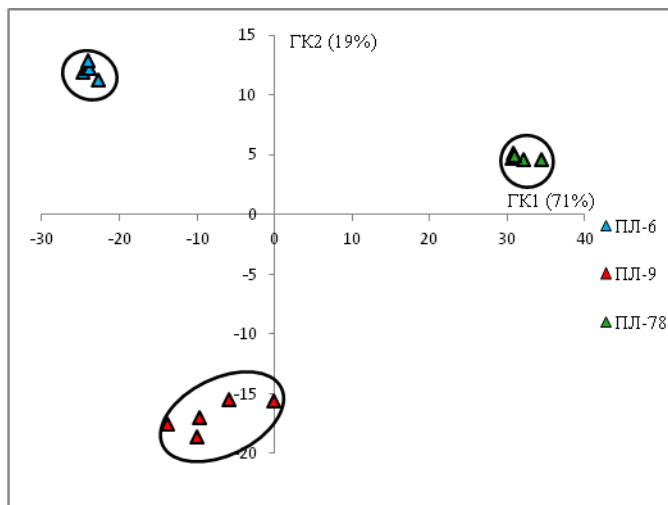


Рис. 2. График счетов МГК-моделирования циклических вольтамперограмм анаприлина на фоне 0.1 М NaOH на модифицированных СУЭ модификаторами ПЛ-6, ПЛ-9, ПЛ-78, при скорости развёртки 1 В/с.

© Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.,
Храмилова А.В., Сахипова И.И., 2014 г.

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 532.978:542.943

СИНЕРГИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В РЕАКЦИИ ИНГИБИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА ДОБАВКАМИ НИТРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ И АРОМАТИЧЕСКОГО АМИНА

Бирюкова А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нитроксильные радикалы нашли широкое применение в качестве ингибиторов для предотвращения полимеризации мономеров на стадии их очистки и хранения. Представляет практический интерес возможность удлинения срока действия ингибирующих свойств нитроксильных радикалов за счет их регенерация в реакциях обрыва цепей и синергического эффекта совместного действия.

Исследовано влияние 3-х стабильных нитроксильных радикалов на основе пиперидина, пирролидина и пиррола на окисление 1,4-диоксана. Окисление диоксана проводили при температуре 75 °С в присутствии классического инициатора окисления - азодиизобутиронитрила (АИБН). За кинетикой реакции следили по поглощению кислорода на дифференциальной манометрической установке. В отсутствие ингибирующих добавок кинетическая кривая поглощения кислорода диоксаном имеет линейный вид, параметр окисляемости субстрата совпадает с литературными данными. Добавки в систему нитроксильного радикала приводят к появлению четкого периода индукции на кинетических кривых поглощения кислорода. Величина периода индукции линейно зависит от концентрации добавленного ингибитора.

В присутствии добавок уксусной кислоты в окисляющийся диоксан величина периода торможения нитроксильным радикалом резко возрастает и составляет намного больше 3-х часов. Спектрофотометрически было показано, что добавки уксусной кислоты снижают скорость расходования нитроксильного радикала многократно. Наиболее вероятной причиной снижения скорости расходования нитроксильного радикала и как следствие увеличение периода торможения процесса окисления диоксана является реакция их регенерации в стадиях обрыва цепей в кислой среде.

Совместное присутствие нитроксильного радикала и α -нафтиламина приводит к увеличению периода индукции в реакции окисления диоксана в 4- 5 раз. По-видимому, в этом случае проявляется синергизм совместного действия двух ингибиторов окисления.

© Бирюкова А.А., 2014 г.

**АДСОРБЦИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ
СОРБЕНТОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ МЕЛАМИНОМ ПО
ДАНЫМ ОБРАЩЁННОЙ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ**

Абдуллина Л. Я., Гайнуллина Ю.Ю., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Многие гетероциклические соединения способны образовывать ассоциаты из неограниченного числа мономеров – супрамолекулярные структуры. Среди них выделяется меламина (1, 3, 5-триазино-2, 4, 6-триамин). Особенностью его структуры является то, что она, на первый взгляд, не имеет каких-либо полостей. Однако из семи молекул меламина, образующих одно звено супрамолекулярной структуры, шесть связаны между собой в структуру типа «цветка» водородными связями, а седьмая молекула меламина соединяется с шестью остальными за счёт более слабых ван-дер-ваальсовых связей. При десорбции последней может быть получена полость размером около 5 Å. Поэтому представляет интерес выяснить, может ли быть получен сорбент на основе имеющей полости супрамолекулярной структуры меламина.

В качестве исходных сорбентов были выбраны инертный носитель Chromaton NAW и пористые полимерные сорбенты с различным средним размером пор d . Модифицирование проводилось из водных растворов путём отгона растворителя при 60 °С. Количество наносимого модификатора составляло 1 и 10% от массы исходного полимера.

Установлено, что модифицированных меламинам пористых полимерах наблюдается стерические эффекты связанные с адсорбцией молекул в полости размером 5 Å образующиеся в результате десорбции центральной молекулы меламина. На образце сорбенте с нанесен пиримидинофаном обнаружены размерные эффекты для молекул способных к образованию водородных связей. Обнаружено, что наблюдаемые размерные эффекты обусловлены в взаимодействии с 7 и 19 атомами азота молекулой пиримидинофана. Адсорбция молекул спиртов в полости пиримидинофана будет носить делокализованный характер в случае, когда в полости адсорбируются две молекулы спирта, и локализованный в случае адсорбции одной молекулы.

В результате модифицирования меламинам полярность пористых полимеров будет возрастать. Полярность поверхности сорбента на основе пиримидинофана будет близкой к полярности силикагелей.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проект №:14-03-31025 мол-а) и Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках базового государственного задания

КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА С 5-АМИНОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ: ПОЛУЧЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Борисова Н.С., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящей работе изучено взаимодействие 5-гидрокси-6-метилурацила (5-ОН-6-МУ) с 5-аминосалициловой кислотой (5-АСК). Методом УФ спектроскопии установлено, что в разбавленных водных растворах 5-ОН-6-МУ и 5-АСК образуют комплексное соединение состава 1:1. Значение константы равновесия реакции образования комплекса $K = (3.0 \pm 0.4) \cdot 10^3$ л/моль свидетельствует о его устойчивости в водной среде. Изучено влияние условий проведения реакции (температура, время реакции, соотношение реагентов) на выход комплексного соединения.

На основании полученных данных была разработана методика синтеза комплекса 5-ОН-6-МУ...5-АСК, позволяющая с количественным выходом получать целевое соединение. На следующем этапе работы были исследованы токсичность и противовоспалительная активность* комплексного соединения 5-ОН-6-МУ с 5-АСК. Установлено, что данное соединение по классификации ГОСТ 12.1.007-76 относится к IV классу опасности, т.е. является малоопасным веществом.

Противовоспалительную активность комплексного соединения изучали на мышах на модели острого каррагенинового воспаления. В качестве препаратов сравнения использовали 5-ОН-6-МУ и 5-АСК. Контрольным животным вводили воду. Установлено, что в группах мышей, которым вводили комплексное соединение в дозах 50 и 100 мг/кг, процент выраженности отека был соответственно в 1.4 и в 1.6 раза меньше, чем у группы контроля. Комплексное соединение в дозе 50 мг/кг угнетало воспаление на 26.4%, а в дозе 100 мг/кг – на 36.2%. Препараты сравнения (5-ОН-6-МУ и 5-АСК) уменьшали выраженность отека соответственно в 1.2 и 1.3 раза по сравнению с контролем. Процент угнетения воспаления в этих группах составил 13.3% и 20.0%, соответственно.

Таким образом, на модели каррагенинового воспаления комплексное соединение 5-гидрокси-6-метилурацила с 5-аминосалициловой кислотой в дозах 50 мг/кг и 100 мг/кг проявило более высокую противовоспалительную активность по сравнению с исходными соединениями.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект 14-03-97026 p_поволжье_a) и проекта (код проекта: 299, 2014 г.), выполняемого в рамках проектной части госзадания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности.

* Фармакологические исследования выполнены в лаборатории биоорганической химии Института органической химии УНЦ РАН.

**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ КОНДИЦИОНИРОВАНИЯ НА
СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ**

Гайнуллина Ю.Ю., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При применении пористых полимерных сорбентов (ППС) для нужд пробоподготовки при извлечении адсорбированных загрязнителей, часто применяется метод термодесорбции. Важнейшими свойствами, определяющими применение ППС для целей микроконцентрирования, является максимальная сорбционная активность ППС при низких температурах – температурах концентрирования, и минимальная при температурах десорбции. Получение пористых полимерных сорбентов с такими свойствами является важной задачей.

В качестве исследуемых сорбентов были выбраны малоизученный пористый полимер DIAION HP-2MG на основе метакриловой кислоты, с удельной поверхностью $1,2 \text{ м}^2/\text{г}$ и средним размером пор 170 \AA , а также Поролас-Т – пористый полимер, полученный сополимеризацией стирола с дивинилбензолом. Его удельная поверхность, определённая тепловой десорбцией азота при 77 К , составляет $710 \text{ м}^2/\text{г}$, а общий объем пор по бензолу – $1,83 \text{ см}^3/\text{г}$. Средний диаметр пор – 40 \AA .

Исследование проводилось на газовом хроматографе «Сrom-5»(Чехия), оснащённым детектором по теплопроводности. В качестве газаносителя использовался азот. Скорость газаносителя азота варьировалась от 45 до 63 мл/мин. Полимер DIAION HP-2MG кондиционировали в токе газаносителя при температурах 160, 170, 180 и 190 °С. Поролас-Т кондиционировался в колонке в токе N_2 при температурах 200, 220, 240 и 260 °С.

Рекомендуемая максимальная температура, при которой может использоваться DIAION HP-2MG, составляет 170°С, при увеличении температуры кондиционирования данный пористый полимер подвергается деполимеризации. Вероятно, это связано с матрицей сорбента .

Поролас-Т сохраняет свои сорбционные свойства при повышении температуры кондиционирования до 260 °С. Было обнаружено, что при повышении температуры кондиционирования с 200 до 240 °С устраняется молекулярно-ситовый эффект. Поролас-Т откондиционированный при 260°С будет обладать большей эффективностью при микроконцентрировании загрязнителей из атмосферы и воды.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проект №:14-03-31025 мол-а) и Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках базового государственного задания.

© Гайнуллина Ю.Ю., Кудашева Ф.Х., 2014 г.

РАЗДЕЛЕНИЕ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕНТОЛА, КАМФЕНА И КАМФОРЫ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ НА НОВОЙ НЕПОДВИЖНОЙ ФАЗЕ НА 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛЕ

Гайнуллина Ю.Ю., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Долгое время среди учёных господствовало представление, что энантиомеры невозможно разделить хроматографическим методом. Однако в конце 60-х годов прошлого века Гил-Авом и сотр. впервые было проведено разделение энантиомеров в условиях газовой хроматографии. В качестве неподвижной фазы были взяты производные хиральных аминокислот. На сегодняшний день в мире разделены рацематы практически любого класса соединений, от неполярных до полярных, а в литературе имеются сведения о десятках тысяч разделений в нескольких тысячах работ в этой области. Впервые было проведено разделение энантиомеров в условиях газовой хроматографии. В настоящей работе предлагается новая неподвижная фаза для разделения энантиомеров – 5-гидрокси-6-метилурацил. В качестве исходного вещества был выбран инертный носитель Inerton NAW. Модификатором являлся 5-гидрокси-6-метилурацил (ГМУ). ГМУ наносился из разбавленного водного раствора при температуре ≈ 60 °С путём испарения воды. Полученный сорбент доводился до постоянной массы при 120 °С. Было получено 2 образца с 1 и 10 массовыми % ГМУ. Использовался газовый хроматограф Chrom 5 (Чехия) с пламенно-ионизационным детектором. В качестве газа-носителя применялся азот, скорость газа-носителя составляла 20 мл/мин. Использовалась насадочная колонка длиной 1 м и внутренним диаметром 3 мм. Использовались рацемат камфена (Aldrich), а также (+)-камфен и (-)-камфен (оба – Aldrich), рацемат ментола, (-)-ментол и (+)-ментол (Fluka), а также (+)-камфора и смесь энантиомеров камфоры и ментола (Институт органической химии УНЦ РАН, Россия). Все исследуемые оптически активные соединения успешно разделяются на предложенной в работе неподвижной фазе. На колонке с 10% ГМУ камфора и ментолы имеют одинаковое значение α . Наилучшую селективность новая неподвижная фаза продемонстрировала к наименее полярному камфену. Это даёт основание предположить, что разделение энантиомеров происходит в полости *B* супрамолекулярной структуры ГМУ. Данная полость имеет формальный размер 14 Å и 4 метильных группы внутри. При образовании слоя ГМУ эти метильные группы могут быть ориентированы несимметрично относительно плоской супрамолекулярной структуры, приводя к хиральности поверхности. Таким образом, новая хиральная неподвижная фаза на основе 5-гидрокси-6-метилурацила показала высокую способность к разделению энантиомеров.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований (проект №:14-03-31025 мол-а) и Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках базового государственного задания

ВЫЩЕЛАЧИВАНИЕ ВАНАДИЯ ИЗ ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯКузьмина Е.В.⁽¹⁾, Колосницын В.С.⁽¹⁾, **Ибатуллина Ю.Р.**⁽²⁾, Зимин Ю.С.⁽²⁾¹⁾ Институт органической химии УНЦ РАН, г.Уфа, Россия²⁾ Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Тепловые электростанции (ТЭС) играют ведущую роль в производстве электроэнергии в России (67%). Основным сырьем ТЭС являются жидкое органическое топливо (мазут) и кокс. В России порядка 13% сырья (7 млн т/год) ТЭС содержат супер экотоксикант ванадий в пределах от 1,5% до 50% V₂O₅ в зависимости от сырья. Продукты сжигания ТЭС накапливаются в окружающей среде в виде твердых продуктов сжигания, содержащих токсические соединения ванадия – золошлаков, шламов, золы «уноса».

Целью данной работы была разработка метода выщелачивания ванадия (V) из ванадий-содержащих продуктов сжигания мазутов ТЭС.

В работе использовали модельную систему, включающую в себя сажу (45% масс.), V₂O₅ (20 % масс.), Fe₂(SO₄)₃ (5% масс.) и Ca(OH)₂ (30% масс.). Выщелачивание проводили в течение 30 мин при постоянном перемешивании (200 об./мин.) при комнатной температуре (25±1 °С). Соотношение твердой и жидкой фаз было 1:4 по массе. Содержание ванадия в продуктивных растворах выщелачивания определяли спектрофотометрически по интенсивности окраски его комплекса с перекисью водорода в 1М растворе H₃PO₄ при 333 нм.

Исследования показали, что наиболее эффективным выщелачивающим агентом является 1М раствор LiOH. (таблица). Однако сопоставлением цены выщелачивающего агента и эффективности выщелачивания можно заключить, что наиболее оптимальным выщелачивающим агентом является 1М раствор серной кислоты.

Таблица

Эффективность выщелачивания ванадия из модели продуктов сжигания мазута на ТЭС

Выщелачивающий агент	Эффективность выщелачивания, %	Стоимость выщелачивающего агента, руб/тонн
H ₂ O	1	4000
1М КОН	3	49900
1М H ₃ PO ₄	6	25000
6% NH ₄ OH	25	4400
1М H ₂ SO ₄	56	3500
1М LiOH	80	35000

© Кузьмина Е.В., Колосницын В.С., Ибатуллина Ю.Р., Зимин Ю.С., 2014 г.

КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ОЗОНА С ПОЛИВИНИЛОВЫМ СПИРТОМ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Кутлугильдина Г.Г., Зиннатуллина Д.К., Зимин Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно [1, 2], что окисление спиртов (S) разной атомности озоном имеет разные закономерности. Так, расходование O_3 в реакции с одно- и двухатомными спиртами подчиняется закону второго порядка. В то же время, эффективная константа скорости второго порядка ($k_{эфф}$) окисления одноатомных спиртов в области больших концентраций субстрата не остается постоянной, а возрастает с увеличением $[S]_0$. При окислении полиатомных (с числом ОН-групп $n \geq 3$) спиртов – глицерина, триола, пентаэритрита и маннита – величина $k_{эфф}$, наоборот, с ростом $[S]_0$ падает. Отмеченное многообразие экспериментальных данных нашло объяснение в рамках схемы [1, 2], учитывающей образование промежуточного комплекса $S \cdots O_3$. При этом различие в кинетических законах связано с разными стадиями, которые лимитируют окислительный процесс. В этой связи интерес вызывают кинетические закономерности озонированного окисления поливинилового спирта (ПВС). С одной стороны, ПВС – полиатомный спирт, для которого можно ожидать характерных для спиртов высшей атомности ($n \geq 3$) закономерностей расходования озона. С другой стороны, в молекуле ПВС (в отличие от изученных ранее полиатомных спиртов) имеются не только α -СН-, но и β -СН-связи, которые также могут участвовать в реакции с O_3 и приводить, соответственно, к изменению закономерностей его расходования.

Кинетику реакции озона с поливиниловым спиртом в водной среде изучали спектрофотометрическим методом при $6 \div 32^\circ C$. Начальные концентрации ПВС изменяли в диапазоне $(0.2 \div 2.0) \cdot 10^{-2}$ моль/л (из расчета на одно структурное звено); в этих условиях $[ПВС]_0 \gg [O_3]_0$.

Установлено, что кинетические кривые расходования озона в реакции с ПВС хорошо ($r \geq 0.996$) линеаризуются в координатах уравнения $\ln([O_3]_0/[O_3]_t) = k't$, что свидетельствует о первом порядке реакции по O_3 . Эффективные константы скорости k' прямо пропорциональны начальным концентрациям ПВС ($k' = k[ПВС]_0$, $r \geq 0.995$), что указывает на первый порядок реакции по спирту. Таким образом, расходование озона в реакции с поливиниловым спиртом однозначно описывается законом второго порядка. В настоящей работе изучена температурная зависимость константы скорости k , откуда получены значения активационных параметров: $\lg A = 15 \pm 3$, $E = 78 \pm 9$ кДж/моль.

Литература

1. Komissarov V.D., Zimin Yu.S., Trukhanova N.V., Zaikov G.E. // Oxid. Commun. 2005. V. 28, № 3. P. 559-567.

2. Зимин Ю.С. Дисс. ... докт. хим. наук. – Уфа, 2006. 302 с.

УДК 547-38

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗОМЕРОВ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ, ЦИНКА, КАЛЬЦИЯ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Мифтахова Г.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Аминокислотные комплексы биометаллов широко применяются в современной медицине в качестве биодобавок. В последнее время стало известно, что аминокислоты, взаимодействуя с ионами биометаллов, принимают участие в регуляционных механизмах организма, то есть являются биологически активными и гормоноподобными веществами. Аминокислоты регулируют секреторную функцию желудка, печени, поджелудочной железы, кишечника, принимают участие в кроветворении, обладают детоксицирующими свойствами, регулируют аппетит, повышают иммунитет [1]. Биогенные металлы выполняют первостепенную роль в организме. Так, например, медь способна выполнять функцию переноса кислорода и переноса электронов. Цинк входит в состав активного центра многих важных ферментов, которые катализируют реакции гидролиза пептидов, коллагена, фосфолипидов и др. Ионы кальция участвуют в процессах свертывания крови, а также служат одним из универсальных вторичных посредников внутри клеток и регулируют самые разные внутриклеточные процессы — мышечное сокращение, экзоцитоз, в том числе секрецию гормонов и нейромедиаторов. [2].

Нами были синтезированы хелатные комплексы аминокислот **1-7** с некоторыми биометаллами [3], в частности, Cu, Zn, Ca. Выход продуктов составил в пределах 30-70 %. Для идентификации данных комплексов был использован метод ИК-спектроскопии (ИК-Фурье спектрометр Shimadzu FTIR-8400S) (таблица 1).

В результате исследования было обнаружено, что $\Delta\nu(\text{COO}^-)$ частот колебаний карбоксильных групп *бис*-хелатов биометаллов **1-7** отлична для *цис*- и *транс*-изомеров (**a** и **b**). Также выявлено, что частота колебаний ассиметричных карбоксильных групп $\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$ превышает частоту колебаний $\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$ симметричных групп.

Таблица 1. Полосы поглощения (см^{-1}) функциональных групп комплексов **1-7** в ИК-спектрах

Продукты	Выход, %	Частота колебаний, см^{-1}			
		$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	$\Delta\nu(\text{COO}^-)$	$\nu(\text{NH}_2^-)$
Глицин (gly)	-	1608	1412	196	-
(DL)-треонин (thr)	-	1626	1418	208	-
(DL)-валин (val)	-	1595	1418	177	-
L-аланин (ala)	-	1593	1410	183	-
<i>cis</i> -[Cu(gly) ₂] (1)	35	1580, 1593, 1605	1396 1404	201	3267, 3165
<i>trans</i> -[Ca(gly) ₂] (2a)	32,5	1598	1394	204	3100, 3110
<i>cis</i> -[Ca(gly) ₂] (2b)		1607, 1567	1406	170	
[Zn(gly) ₂] (3)	71	1597	1410	187	3250, 3450
[Ca((DL)-thr) ₂] (4)	56,5	1627	1417	210	3307, 3272
<i>cis</i> -[Cu(L-ala) ₂] (5a)	57	1576	1394	182	3240, 3141
<i>trans</i> -[Cu(L-ala) ₂] (5b)		1618	1358	260	
<i>cis</i> -[Zn((DL)-val) ₂] (6a)	31	1596	1419	177	3144, 2959
<i>trans</i> -[Zn((DL)-val) ₂] (6b)		1563	1364	199	3200, 3210
<i>trans</i> -[Cu((DL)-val) ₂] (7)	33	1621	1412	209	3302, 3255

Литература

1. Болотин С.Н. Координационная химия природных аминокислот. ЛКИ-2008. -240с.

2. Улахович, Н.А., Медянцева, Э.П., Бабкина, С.С., Кутырева, М.П., Гатаулина, А.Р. Металлы в живых организмах. Казань: Казанский университет, 2012. -102 с.

3. Мифтахова Г.В., Берестова Т.В. «Изучение размерности частиц аминокислотных комплексов в зависимости от природы биометалла». Сборник статей «Актуальные вопросы науки и техники». Воронеж, 2014. - 50с.
© Мифтахова Г.В., 2014 г.

**ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ УРАЦИЛОВ
ОЗОН-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСЬЮ**

Хайруллина Л.Р., Насретдинова Р.Н., Зимин Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пиримидиновые основания широко распространены в природе и встречаются во всех клетках животных и растений, в микроорганизмах и вирусах, главным образом в составе нуклеиновых кислот, нуклеотидов, некоторых коферментов, витаминов и др. Интерес к проблеме окисления пиримидиновых оснований продолжает расти в последние годы и связан с необходимостью понимания процессов разрушения и восстановления ДНК, синтеза маркеров окислительного стресса. Весьма полезными в этом отношении могут оказаться данные по озонированному окислению производных урацила.

В настоящей работе обнаружена хемилюминесценция в видимой области спектра при окислении урацилов (6-метилурацила, 5-амино-6-метилурацила, 5-бром-6-метилурацила, 5-гидрокси-6-метилурацила, 5-нитро-6-метилурацила, 5-фторурацила, 3,6-диметилурацила и 1,2,3-триметилурацила) озон-кислородной смесью в водных растворах. Исследования выполнены при 14-60°C и начальных концентрациях окисляемых субстратов $(0.1-1.0) \cdot 10^{-3}$ моль/л. При этом в проводимых экспериментах всегда выполнялось условие: $[S]_0 \gg [O_3]_0$, где $[S]_0$ и $[O_3]_0$ – начальные концентрации урацилов и озона в растворе, соответственно.

Было установлено, что интенсивность свечения I (после прекращения подачи O_3-O_2 смеси) уменьшается во времени t по экспоненциальному закону: $I_t = I_0 \cdot e^{-k't}$, где I_0 , I_t – начальная и текущая интенсивности свечения (отн. ед.), k' – эффективная константа скорости реакции (c^{-1}). С увеличением начальных концентраций урацилов эффективные константы скорости k' линейно возрастают: $k' = k [S]_0$, где k – константа скорости реакции второго порядка (л/моль·с). Из зависимостей $k' = f([S]_0)$ были определены значения k при разных температурах. Обработка полученных результатов в координатах уравнения Аррениуса позволила определить кинетические параметры изучаемого процесса – предэкспоненциальные множители (A) и энергии активации (E). Оказалось, что между $\lg A$ и E наблюдается линейная корреляция (компенсационный эффект), свидетельствующая о едином механизме лимитирующей стадии процесса окисления изученных урацилов озон-кислородной смесью.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект 14-03-97026 р_поволжье_a) и проекта (код проекта: 299, 2014 г.), выполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности.

УДК 532.978:542.943

КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИНЕРГИЗМА В ИНГИБИРУЮЩЕЙ КОМПОЗИЦИИ «НИТРОКСИЛЬНЫЙ РАДИКАЛ + АРОМАТИЧЕСКИЙ АМИН»

Носова А.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нитроксильные радикалы нашли широкое применение в качестве ингибиторов для предотвращения полимеризации мономеров на стадии их очистки и хранения. Представляет практический интерес возможность удлинения срока действия ингибирующих свойств нитроксильных радикалов за счет синергического эффекта их совместного действия. По литературным данным известно, что стабильные нитроксильные радикалы эффективные акцепторы алкильных радикалов, ароматические амины эффективны по отношению к пероксильным радикалам.

Исследовано влияние 3-х стабильных нитроксильных радикалов на основе пиперидина, пирролидина и пиррола на окисление 1,4-диоксана. Окисление диоксана проводили при температуре 75 °С в присутствии классического инициатора окисления - азодиизобутиронитрила (АИБН). За кинетикой реакции следили по поглощению кислорода на дифференциальной манометрической установке.

Ранее было установлено, что совместное присутствие нитроксильного радикала и α -нафтиламина приводит к увеличению периода индукции в реакции окисления диоксана в 4- 5 раз. Данный эффект объясним явлением синергизма совместного действия двух ингибиторов окисления. Количественные характеристики синергизма установлены для 3-х нитроксильных радикалов в присутствии α -нафтиламина. Период торможения в окислении 1,4-диоксана ингибирующей композицией экстремально зависит от соотношений компонентов. Наибольший ингибирующий эффект наблюдается для смеси, содержащей 40% нитроксильного радикала. Так как окисление 1,4-диоксана протекает в кинетическом режиме, где концентрация пероксильных радикалов намного больше алкильных, мы считаем данное соотношение наиболее оптимальным.

© Носова А.Н., 2014 г.

РАСТВОРЕНИЕ МОНОЗАМЕЩЕННЫХ МЕТАНОФУЛЛЕРЕНОВ В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ

Рыженко М.А., Биглова Ю.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Проведено спектроскопическое исследование растворения C_{60} и его монозамещенных ранее синтезированных производных – метанофуллеренов в концентрированной (98%) серной кислоте [1,2]. Показано, что метанофуллерены растворяются в серной кислоте значительно лучше, чем исходный C_{60} . Из-за высокой гидрофобности кристаллический фуллерен C_{60} плохо растворим в 98%-ной серной кислоте. По всей видимости, в кристалле лишь незначительная часть поверхности фуллереновых ядер контактирует с кислотой. Что касается его производных, то независимо от природы и длины заместителя в ядре C_{60} , вид спектральных кривых монозамещенных 1,2-дигидро- C_{60} -фуллеренов идентичен: в ближней ультрафиолетовой области регистрируются три максимума поглощения (при 218, 251 и 317 нм), интенсивность которых со временем увеличивается и через некоторое время достигает постоянных значений (рис. 1 а). После этого оптическая плотность не меняется, что может свидетельствовать о завершении процесса растворения 1,2-дигидро- C_{60} -фуллеренов. В длинноволновой части спектра отмечается противоположная картина: интенсивность появившихся полос поглощения со временем уменьшается. Наиболее существенны изменения в области 450-850 нм (рис. 1 б).

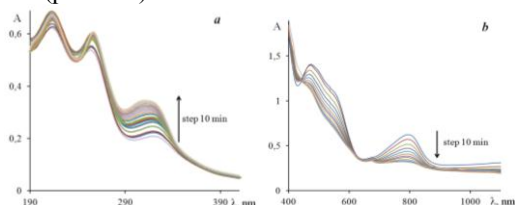


Рис. 1. Эволюция электронного спектра поглощения в коротковолновой (а) и длинноволновой (б) областях при растворении монозамещенного метилового эфира [6,6]-фенил- C_{61} -бутиловой кислоты в 98 % серной кислоте (аналогичный характер изменения спектра наблюдается и для всех остальных изученных соединений).

Различие в растворимости фуллерена C_{60} и его функционализированных производных в концентрированной серной кислоте может быть положено в основу методики их разделения.

1. *Torosyan S.A., Biglova Y.N., Mikheev V.V. et al. // Mend. Comm. 2012. Vol. 22. P. 199.*
2. *Торосян С.А., Гималова Ф.А., Михеев В.В. и др. // Журн. орган. химии. - 2011. - 47. № 12. - С. 1771.*

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В ПРОЦЕССЕ ПОЛУЧЕНИЯ ЖИДКИХ КОМПЛЕКСНЫХ УДОБРЕНИЙ.

Сабитова Ф.С., Шарипов Т.В., Кинзябулатова Г.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сельскохозяйственные культуры в зависимости от их биологических особенностей предъявляют различные, но достаточно высокие требования к плодородию почвы и к условиям минерального питания. Только благодаря использованию широкого комплекса удобрений, учитывающих все особенности растений, возможно ведение интенсивного земледелия, получение высоких и полноценных по качеству урожаев [1].

Разработан способ получения ЖКУ, включающий нейтрализацию экстракционной фосфорной кислоты карбамидом в виде водного раствора, взятого в мольном отношении карбамид: H_3PO_4 , равном (1,5-2,5):1, процесс нейтрализации ведут при температуре 95-99°C и плотности реакционной массы 1,22-1,28 г/см³ до достижения показателя рН реакционной среды 6,5-7,2 в присутствии кальцийсодержащего агента, взятого в мольном отношении кальций : фтор, равном 1:2. Отделение осадка нерастворимых примесей из полученной суспензии проводят при достижении рН среды 5,0-5,9 [2]. Исследовано распределение компонентов между твердой и жидкой фазами при получении ЖКУ на основе экстракционной фосфорной кислоты (ЭФК), полученной из фосфоритов Каратау. Общеизвестно, что фосфоритовая ЭФК характеризуется повышенным содержанием примесей фтористых соединений, железа, алюминия и магния.

В лабораторных опытах использовали подупаренную фосфоритовую ЭФК следующего состава, в %: 40,4 P_2O_5 , 2,8 SO_3 , 1,3 F, 0,06 Ca, 0,84 Mg, 0,83 Fe_2O_3 и 1,3 Al_2O_3 .

Определено, что при использовании известняка в качестве кальцийсодержащего агента, полученный базовый питательный раствор характеризуется содержанием в %: 12-16 N, 12-16 P_2O_5 , 0,01 Fe, 0,02 Al, 0,02 Ca, 0,15 Mg и не более 0,01 F. В процессе синтеза ЖКУ обеспечивается эффективная очистка питательного раствора от примесей. Установлено, что в твердую фазу переходит 96% фтористых соединений, 95% железа и 94% алюминия, 41 % кальция и 69% магния.

Список литературы

1. Кононов А.В. Основы технологии комплексных удобрений / А.В. Кононов, В.Н. Стерлин, Л.И. Евдокимова. – М.: Химия, 1988. – 320 с.
2. Шарипов Т.В., Мустафин А.Г., Кинзябулатова Г.С. и др. Способ получения жидких комплексных удобрений. Патент РФ № 2510626, опубл. 10.04.2014.

© Сабитова Ф.С., Шарипов Т.В., Кинзябулатова Г.С., 2014 г.

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РАЗНОЛИГАНДНЫХ ХЕЛАТОВ
Mn(II) И Mg(II)**

Сайфутдиярова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Актуальность исследования заключается в получении и изучении новых разнолигандных хелатных комплексов Mn^{2+} и Mg^{2+} с природными аминокислотами (глицин, *DL*-валин, *L*-аргинин).

Марганец и магний относятся к жизненно необходимым микроэлементам и участвуют в регуляции важнейших биохимических процессов. Их хелатные соединения нашли широкое применение в различных областях. Например, *хелат марганца* 13% (EDTA) для приготовления растворов. Это кристаллическое, полностью растворимое в воде удобрение для листовой и почвенной подкормки огородных и сельскохозяйственных культур [1]. Также были синтезированы антианемические препараты на основе меди, цинка, йода и *марганца*, хелатированных органическими лигандами (глицин, тирозин, аспарагин) [2]. В свою очередь *магний* входит в состав природного органического соединения, а именно зеленый пигмент растений *хлорофилл*. *Жидкий хлорофилл* применяется как биологически активная добавка (стимулирует кроветворение, иммунную систему и др.). Также был создан пищевой антиоксидант E329, представляющий собой *лактат магния*. Его можно встретить в химическом составе замороженных мясных полуфабрикатов, в кондитерских и хлебобулочных изделиях. Кроме того, пищевой антиоксидант E329 используют как влагоудерживающий агент в процессе изготовления косметических и медицинских препаратов, а также табачных изделий [3].

Марганец участвует в основных нейрохимических процессах в центральной нервной системе, в образовании костной и соединительной тканей, регуляции жирового и углеводного обмена, обмене витаминов С, Е, холина и витаминов группы В.

Магний поддерживает нормальную функцию нервной системы и мышцы сердца, оказывает сосудорасширяющее действие, стимулирует желчеотделение, повышает двигательную активность кишечника, что способствует выведению из организма холестерина.

С целью изучения возможности образования устойчивых хелатов $Mn(II)$ и $Mg(II)$ синтезированы разнолигандные комплексы с такими аминокислотами как глицин, (*DL*)-валин, (*DL*)-аргинин на основе методики [4] с выходами 62-96% (таблица 1). Полученные комплексы были охарактеризованы методами ТСХ и ИК-спектроскопии (ИК-Фурье спектрометр Shimadzu FTIR-8400S).

Таблица 1. Полосы поглощения (см^{-1}) функциональных групп комплексов **1-7** в ИК-спектрах

Комплекс	Выход, %	Полосы поглощения функциональных групп					
		$\nu(-\text{C}(\text{CO}))$		$\nu(-\text{O}(\text{CO})-)$		$\nu(-\text{CO})$	$\nu(-\text{NH}_2)$ (<i>as, s</i>)
		<i>as</i>	<i>s</i>	<i>as</i>	<i>s</i>		
глицин		1608	1412				
<i>DL</i> -валин		1612	1473				
Mn(gly)(<i>DL</i> -val) (1)	62	1595.02	1415	1504	1327	1134	2962
Mg(gly)(<i>DL</i> -val) (2)	96	1595.02	1415	1506.30	1328	1130	2961
Mg(gly)(<i>L</i> -arg) (3)	77	1596.95	1417.58	1504.37	1358	1132.14	2582.51

Установлено, что наиболее информативные полосы поглощения функциональных групп аминокислотных хелатов в ИК-спектрах **1-3** находятся в области $2582.51-2962 \text{ см}^{-1}$ и соответствуют валентным колебаниям $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2-)$ и $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2-)$, а также в области $1586-1612 \text{ см}^{-1}$ для $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$ и $1412-1473 \text{ см}^{-1}$ для $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$.

Таким образом, выявлено, что полученные разнолигандные хелаты Mn(II) и Mg(II) **1-3** представляют собой строго симметричные молекулы, которые мы предварительно отнесли к *транс*-изомерам.

Литература

1. <http://www.znamagro.com.ua/ru/>
2. Бушов А.В. Профилактика анемии поросят хелатированными микроэлементами // Кормление и разведение животных. – С.85
3. <http://findfood.ru/component/pishevoj-antioksidant-E329-laktat-magnia>
4. <http://www.findpatent.ru/patent/243/2430733.html>

© Сайфутдиярова Р.Р., 2014 г.

УДК 541.14:547.551.2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНГИБИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1, 4- ДИОКСАНА

Шарипова Г., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я., Сахибгареева М.В*., Спивак С.И.

ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет», Уфа, Россия
*ООО "УфаНИПИнефть", Уфа, Россия

Окисление органических соединений относится к классу вырожденно-разветвленных цепных реакций, механизм которых хорошо изучен. В то же время, определение кинетических характеристик элементарных стадий в ряде случаев затруднительно или даже невозможно, что связано с

методическими сложностями регистрации малых концентраций. В настоящей работе с целью исследования механизма реакции радикально-цепного окисления 1,4-диоксана в присутствии добавок урацила был применен программный комплекс «ХимКинОптима» [1].

В результате решения прямой и обратной задач химической кинетики были восстановлены значения констант скорости всех элементарных стадий. Найденные значения констант скорости удовлетворительно описывают экспериментальные данные в рамках предлагаемого механизма реакции; в частности, в результате решения прямой кинетической задачи теоретические кинетические кривые поглощения кислорода удовлетворительно совпадают с экспериментом (рис.1)

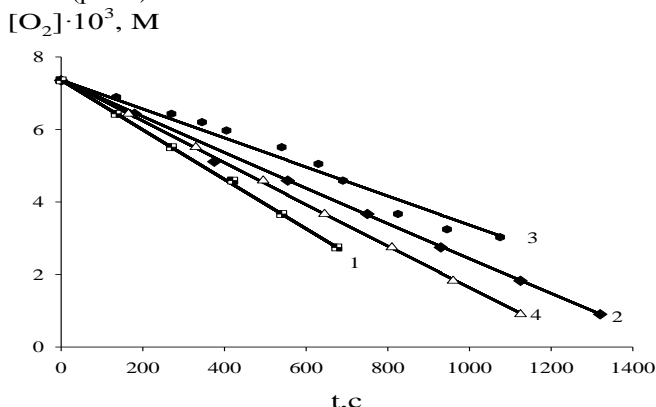


Рис.1 Типичные кинетические кривые расходування кислорода при окислении 1,4-диоксана в присутствии 5-амино-6-метилурацила (точки - экспериментальные значения, линия - расчетные значения) $[InH], M=0,0$ (1), $0,75 \cdot 10^{-4}$ (2), $1,75 \cdot 10^{-4}$ (3), $5 \cdot 10^{-4}$ (4); 348 К.

Литература

1. Программный комплекс «ХимКинОптима» для математического моделирования и оптимизации химических реакций на основе кинетики с использованием параллельных вычислений и базы данных: свидетельство о регистрации электронного ресурса / М. В. Тихонова, Д. Ф. Масков, С. И. Спивак, И. М. Губайдуллин // ИНИПИ РАО ОФЭРНиО. № 19247; дата рег. 30.05.2013

© Шарипова Г., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я., Сахибгареева М.В., Спивак С.И., 2014 г.

УДК 543.544.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ

Ганиева А.Г., Валиева Э.М., Кудашева Ф.Х. Гуськов В.Ю.
Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

Большинство твердых тел, используемых в качестве сорбентов, катализаторов и др. имеют геометрическую и химическую неоднородность. В настоящее время недостаточно данных, позволяющих оценить энергетическую неоднородность поверхности.

В работе изучена энергетическая неоднородность поверхности пористого полимерного сорбента модифицированного полиэтиленгликолем 4000 (ПЭГ), полиэтиленгликольадипинатом (ПЭГА) и трипропионитриламином (ТПА). В качестве исходного полимера был выбран сорбент Dowex L-285 с удельной поверхностью 800 м²/г и средним размером пор 25 Å. Нанесение ПЭГ, ПЭГА и ТПА на поверхность полимера осуществлялось из водных растворов путем выпаривания растворителя. Количество наносимых модификаторов варьировалось от 10⁻⁵% до 1% от массы полимерного сорбента.

Исследование проводили методом обращенной газовой хроматографии в режиме конечной концентрации на хроматографе АГАТ с детектором по теплопроводности. Применялась стальная колонка размерами 300*3 мм. Скорость газа-носителя азота составляло 60 мл/мин. Измерения проводились при 200 °С. В качестве тест-сорбатов были выбраны н-бутанол, н-пропанол и гексан. Из хроматограмм были рассчитаны значения удельных удерживаемых объемов, величины равновесной адсорбции и концентрации сорбата в газовой фазе, а также мольные изменения энергии Гельмгольца. По формуле (1):

$$\chi = \frac{Ac}{a_m kT} \quad (1)$$

рассчитывались значения функции неоднородности χ , ммоль/кДж, где A – константа, рассчитываемая из зависимости удерживаемого объема от концентрации сорбата в газовой фазе c ; a_m – емкость моно слоя, ммоль/г; k – постоянная Больцмана, T – температура колонки, К.

Было установлено, что построение графиков зависимости функции неоднородности от свободной энергии адсорбции не позволяет обнаружить изменения свойств поверхности даже при нанесении 1% модификатора. Поэтому было предложено использовать зависимость функции χ от степени заполнения поверхности θ . Полученные функции позволили обнаружить изменения неоднородности от 0,1% модификатора и выше.

Для снижения предела чувствительности функции неоднородности было предложено использовать её первую производную по степени заполнения (χ_2). Построенные функции χ_2 от θ позволили обнаружить

нанесение полиэтиленгликоля на уровне ppm при использовании в качестве тест-сорбата н-бутанола и 0,1 ppm при использовании гексана. Для сорбентов, модифицированных полиэтиленгликолядипинатом и трипропионитриламином функция χ_2 от θ как в случае н-пропанола и н-бутанола, так и в случае гексана позволила обнаружить изменения свойств поверхности на уровне 0,1 ppm.

© Ганиева А.Г., Валиева Э.М., Кудашева Ф.Х. Гуськов В.Ю., 2014 г.

УДК: 544.165

**QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ
ЦИКЛООКСИГЕНАЗЫ-2 В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ
ПРОСТРАНСТВЕННО ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ, ТИАЗОЛОНА
И ОКСАЗОЛОНА**

Хайруллина В.Р.¹, Герчиков А.Я.¹, Зигангиров А.С.¹, Ф.С. Зарудий²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа,
Россия

Целью настоящей работы было построение и валидация QSAR-моделей селективных ингибиторов ЦОГ-2 для производных ди-трет-бутилфенола, тиазолон и оксазолон на основе двухмерного представления их структурной формулы. С использованием программы GUSAR выполнен количественный анализ взаимосвязи между структурой и эффективностью ингибирования каталитической активности циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2) тридцатью двумя производными ди-трет-бутилфенола, тиазолон и оксазолон в интервале значений $IC_{50} = 6,4 \div 6300,0$ нмоль/л. На основе MNA- и QNA-дескрипторов, а также их сочетания, построено шесть статистически значимых консенсус-моделей прогноза численных значений IC_{50} , характеризующихся высокой точностью прогноза IC_{50} для структур обучающих и тестовой выборок. Выявлены структурные признаки, снижающие эффективность ингибиторов ЦОГ-2. Эта информация может быть учтена при молекулярном дизайне новых ингибиторов данного фермента. Установлено, что влияние природы атомов на ингибирующую эффективность производных изоиндола в отношении ЦОГ-2 неоднозначно и зачастую зависит от природы близлежащих структурных фрагментов соединения. Кроме того, при анализе вклада атомов в активность необходимо учитывать, в какую функциональную группу они входят. Можно предположить, что природа данного явления объясняется разным механизмом взаимодействия исследуемых соединений с активным центром ЦОГ-2. В целом, функциональные группы с выраженными нуклеофильными

свойствами снижают активность ингибиторов ЦОГ-2. Кроме того, замещение атомов водорода в пара-положениях бензольных фрагментов на функциональные группы, не способные к образованию водородных связей с активным центром ЦОГ-2, также негативно влияет на ингибирующую активность по отношению к ЦОГ-2. Введение достаточно объемных заместителей в оксазолоновый и тиазолоновый циклы способствует снижению эффективности ингибиторов ЦОГ-2. Выводы о влиянии структурных фрагментов на активность ингибиторов ЦОГ-2, полученные нами на основе визуального анализа с использованием программы GUSAR, не противоречат результатам, основанных на экспериментальных данных.

©Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С., Ф.С. Зарудий, 2014 г.

УДК: 544.165

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ ДИХЛОРФЕНИЛАМИНОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ В АКТИВНЫЕ ЦЕНТРЫ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ

Хайруллина В.Р.¹, Герчиков А.Я.¹, Зигангиров А.С.¹, Ф.С. Зарудий²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Башкирский государственный медицинский университет,
г. Уфа, Россия

Целью настоящей работы был молекулярный докинг производных дихлорфениламиноуксусной кислоты I-IX (рис. 1), полученных в результате молекулярного дизайна активного компонента НПВП «Диклофенак» в активные центры циклооксигеназы-1 (ЦОГ-1) и циклооксигеназы-2 (ЦОГ-2) с целью изучения механизма связывания их с данными ферментами, и, следовательно, изучения селективности ингибирующего действия этих веществ в отношении изоформ ЦОГ.

Молекулярный докинг структур I-IX проводили с помощью программы Autodock 4.2 в цепь А макромолекулы 1PXX (модель ЦОГ-2) (<http://www.rcsb.org>) и в цепь В макромолекулы 3N8X (модель ЦОГ-1). Молекулы белков были жесткими, в то время как молекулы лигандов были подвижными. Активный центр изоформ ЦОГ помещали в трехмерный бокс размером 50×50×50 шагов с разметкой решетки 0.375 Å, рассчитанный в программе AutoDockTools. За центр бокса принимали положение известного ингибиторов ЦОГ – нимесулида и диклофенака. Докинг проводился с использованием Ламарковского генетического алгоритма с параметрами по умолчанию, за исключением угла вращения вокруг ординарных связей и вращательного движения молекул, которые были равны 30⁰. Оценку

качества позиционирования характеризовали величиной RMSD, представляющей собой среднеквадратичное отклонение положения лиганда после докинга от его нативного положения в белке. Решения докинга кластеризовали на основе величины $RMSD = 2,0 \text{ \AA}$. Оценка эффективности связывания лигандов с белком проводилась по полуэмпирической оценочной функции AutoDock 4.2 при наложении силового поля AMBER.

На основании результатов молекулярного докинга можно заключить, что все сконструированные соединения эффективно связываются с активными центрами изоформ ЦОГ, по энергии связывания они сопоставимы с тестовыми лигандами и значительно превосходят арахидоновую кислоту, которая является естественным субстратом данных ферментов. Вместе с тем структуры I, V, VII-IX связываются с активным центром ЦОГ-2 более эффективно чем с ЦОГ-1. Следует ожидать, что они будут более селективно ингибировать активность ЦОГ-2 в условиях *in vivo*, а следовательно, обладать улучшенным фармакологическим профилем по сравнению с диклофенаком.

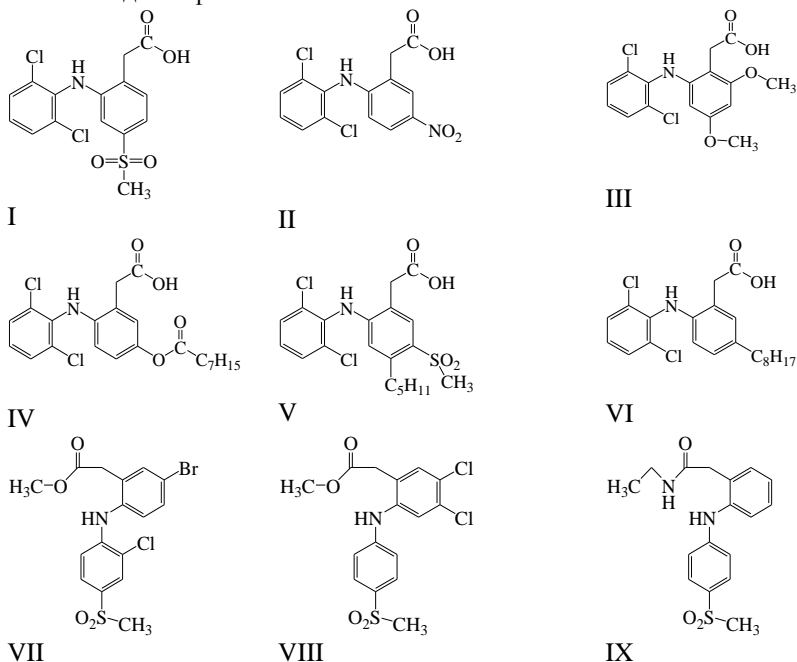


Рис. 1. Структуры моделируемых соединений.

©Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С., Ф.С. Зарудий, 2014 г.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ХИМИИ»

ИЗУЧЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА CHEMCALCULATOR

Салахутдинов Р.Р., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия.

Нами разрабатывается программа, позволяющая освоить основы органического синтеза с применением современных компьютерных технологий. Особенностью программы является использование on line базы данных по методам синтеза, в которой в формализованном виде представлены ключевые параметры синтетических методов (запрещенные и разрешенные функциональные группы, условия проведения реакции, выход и др.). На основе этих параметров в программе с помощью подпрограммы «Калькулятор сложности химических реакций» количественно оценивается сложность предлагаемых схем, что в свою очередь позволяет предлагать оптимальные схемы синтеза.

На первом этапе оцениваются сложности отдельных органических соединений. В дальнейшем обучающемуся предлагаются несколько вариантов схем синтеза, которые оцениваются им по расчетному коэффициенту сложности химических реакций. В дальнейшем задача может быть усложнена за счет генерирования схем синтеза самим обучающимся.

Выбор оптимального варианта рассматриваемых схем без количественной оценки представляется затруднительным. По результатам работы программы рассчитываются коэффициенты сложности каждой из схем, которые позволяют однозначно определить оптимальный вариант.

Программа Chemcalculator предназначена для студентов, изучающих органическую химию, а также преподавателям для составления учебных задач.

© Салахутдинов Р.Р., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2014 г.

УДК 159.9

АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЕДИНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА ПО ХИМИИ В РБ ЗА 2014 ГОД

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

В основной день в ЕГЭ по химии участвовали 3 581 человек, из которых 3 466 выпускники республиканских общеобразовательных организаций (школ, гимназий, лицеев) текущего года; 115 – выпускники прошлых лет или выпускники учреждений профессионального образования. Средний балл, показанный первыми, равен 54,2 баллам, вторыми – 43,7 баллам, в совокупности – 53,9 баллам. 405 выпускников школ текущего года, к сожалению, не смогли преодолеть минимальный порог в 36 баллов, что составляет 11,7% (в 2013 году – 2,3%). Процент «высокобалльников» (более 80 баллов в основной день набрали 217 выпускников, что равно 6,2%) в 5 раз ниже этого показателя за прошлый год (32,5%). Резкое снижение среднего балла по республике и по России в целом вызваны прозрачными условиями проведения экзаменов.

Анализ процентов выполнения заданий ЕГЭ показывает, что самыми сложными для школьников являются задания третьей части, а именно С2, С3 и С4. Среди названных трудных заданий самый низкий процент выполнения имеет задание С2. Задание С2 оформлено в виде описания мысленного эксперимента, по данному описанию необходимо записать 4 уравнения химических процессов. Предлагаем методические рекомендации для выполнения этого трудного задания.

На первом этапе необходимо по названиям реагентов написать химические формулы. К сожалению, даже на этой стадии бывают досадные ошибки. В дальнейшем с использованием подсказок выбрать тип протекающей реакции и написать химические формулы всех продуктов реакции. Основная трудность задания С2 заключается в том, что продукт первой реакции является исходным веществом для второй, продукт второй реакции является исходным веществом для третьей и т.д. По этой простой причине ошибка на первой стадии мысленного эксперимента вызывает неверную вторую реакцию. Для исключения названных ошибок необходимо использовать подсказки в задании: а именно – цвета растворов, цвета газов, осадков, фазовые состояния продуктов реакции. Важно помнить качественные реакции на катионы, анионы, тривиальные названия химических веществ. Следует помнить, что реакция оценивается одним баллом, если приведены все исходные и конечные продукты реакции и расставлены стехиометрические коэффициенты. Схема реакций не оценивается.

© Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н., 2014 г.

УДК 159.9

МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ РАСЧЕТНЫХ ЗАДАЧ ПО ХИМИИ НА АЛГОРИТМ «ИЗБЫТОК- НЕДОСТАТОК»

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Решение расчетных задач предполагает обязательное владение теоретическим материалом по химии, знание законов математики и физики. Особую трудность как у школьников, так и у студентов вызывают задачи на алгоритм «избыток-недостатак». Данный алгоритм реализуется, если в условиях задачи даны численные значения для обоих исходных реагентов.

Следует выделить два разных случая. Первый из них: избыток одного реагента не вызывает протекания в системе дополнительных реакций. Данный случай реализуется, если вещество, взятое в избытке, не реагирует с продуктом реакции. Например. Вычислить массу нитрата магния, которая образуется при взаимодействии 80г оксида магния с раствором азотной кислоты, содержащим 126г кислоты. Согласно условиям задачи необходимо записать уравнение процесса. Далее определяем тип задачи: так как даны численные значения для обоих исходных веществ, то задача на «избыток-недостатак». В данной задаче оксид магния дан в избытке, расчет массы соли проводим по азотной кислоте. Важно, что избыток оксида магния не реагирует с полученной солью.

В докладе рассмотрены 3 способа определения избытка-недостатка реагентов. Наиболее наглядным прозрачным способом авторы считают анализ по логике: сколько было, сколько прореагировало, сколько образовалось продуктов реакции, сколько осталось в избытке исходного вещества.

Второй случай. Вещество, взятое в избытке, взаимодействует с продуктом реакции. Часто об этой дополнительной реакции в условиях задачи нет прямых указаний, но исходя из того, какой исходный реагент остался в избытке, какова природа полученного продукта, необходимо дописать завуалированную реакцию. В качестве примера. Средняя соль двух-, трехосновной кислоты в присутствии избытка кислоты или ее оксида превращается в кислую соль, амфотерные гидроксиды в присутствии избытка щелочей превращаются в комплексные соли. Пример такой задачи. Водный раствор, содержащий 3,7г гидроксида кальция, поглотил 1,68л (н.у.) углекислого газа. Вычислить массу осадка. Согласно условию задачи записываем реакцию образования карбоната кальция. Анализ на избыток-недостатак показывает, что углекислый газ остается в избытке. Но избыток углекислого газа неравнодушен к полученной средней соли! По этому избыток реагента вызывает дополнительную реакцию в данной системе.

© Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н., 2014 г.

ТРЕБОВАНИЯ К СОСТАВЛЕНИЮ ТЕСТОВЫХ ЗАДАНИЙ

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Английское слово «test» переводится как проверка или испытание. В настоящее время тестирование принимает всеобщий характер: тестируют (испытывают) на силу, знания, характер и т.д. Отбор по определенным качествам необходим как при обучении школьников, студентов, так и при приеме на работу, учебу. Но в отличие от программированного опроса, от психологических тестов педагогические тесты имеют свои особенности. Эти особенности вытекают из самого определения теста. Тест определяется как система заданий специфической формы разной трудности, которая позволяет качественно оценить структуру знаний и количественно измерить уровень знаний. Таким образом, в самом определении теста особое внимание уделяется формам заданий и обязательной статистической обработке результатов тестирования..

Существуют четыре формы тестовых заданий: закрытые, открытые, тесты на установление соответствия и последовательности действий.

Тестовые задания должны быть оформлены в виде предложений в утвердительной форме. Вопросительные предложения не рекомендуются. Каждое задание перед студентом должно поставить одну проблему. Тестовые задания должны иметь предметную чистоту; например, задания по физической химии отражают законы данного предмета, а не физики и химии в сумме. Во всех заданиях ключевое слово (термин) должно идти на первом месте. Тестовые задания не рекомендуется формулировать в отрицательной форме, т.к. до правильного ответа нужно ещё одно отрицание; следует учесть что при этом внимание студента будет сконцентрировано на неправильном утверждении.

Набор составленных заданий нельзя назвать тестом, пока не было апробации и количественно не вычислены доля правильных и неправильных ответов за каждое задание. После таких расчетов из набора заданий отбираются те, на которые ответили все испытуемые и на которые не ответил никто. Хорошими заданиями считаются те, на которые правильный ответ дала половина опрашиваемых в группе, так как эти задания разделили группу на знающих и на не знающих. На основе данных обработок результатов вычисляется коэффициент надежности теста. Кроме коэффициента надежности каждый тест должен быть охарактеризован т.н. валидностью (пригодностью) для определения структуры и измерения уровня знаний студентов.

© Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н., 2014 г.

**УСИЛЕНИЕ РОЛИ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В
ПРЕПОДАВАНИИ ДИСЦИПЛИН ПРОФИЛЯ
«ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»**

Мустакимов Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Успехи современных технологий связаны с тем, что стали доступными подходящие материалы. Лишь сравнительно недавно ученые поняли, что существует соответствие между структурными элементами, составляющими материал, и его свойствами. Чем лучше ученый или инженер знаком с различными характеристиками материала и соотношением между его структурой и свойствами, равно как и с технологией получения изделий, тем более умелым и надежным будет его выбор материала, основанный на определенных критериях.

Прежде всего, необходимо четко охарактеризовать условия применения изделия, поскольку именно они определяют необходимые свойства материала. Лишь в очень редких случаях существует материал, который в максимальной степени или идеально отвечает предъявляемым требованиям. Поэтому зачастую приходится пренебрегать одними характеристиками материала по сравнению с другими более важными. Далее, необходимо основывать выбор на том, насколько могут снижаться свойства материала в процессе эксплуатации изделия. И, наконец, решающий аргумент может быть связан с экономическими соображениями. Какова будет стоимость конечного изделия? Можно найти материал, который идеально подходил бы по своим свойствам всем предъявляемым требованиям, но был бы чрезмерно дорог. И здесь опять-таки неизбежен определенный компромисс.

Достаточно часто основой для создания современных «прогрессивных» материалов (композитов, «умных» материалов, материалов биомедицинского назначения и т.д.) являются полимеры, т.к. именно они более всего удовлетворяют вышеперечисленным критериям.

Известно, что в случае высокомолекулярных соединений очень ярко проявляется взаимосвязь «структура – свойство» и имеются простые и эффективные возможности для управления свойствами получаемых на основе ВМС изделий. Поэтому, несомненно, что наряду с фундаментальными основами знаний в области ВМС, студенты профиля «Высокомолекулярные соединения» в рамках общих и специальных курсов должны овладеть навыками выбора способа получения и переработки полимера, имеющего в конечном итоге комплекс свойств, необходимых для создания современных «прогрессивных» материалов.

© Мустакимов Р.А., 2014 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ВКР В ОБЛАСТИ ФИЗИЧЕСКОЙ КУЛЬТУРЫ И СПОРТА

Загитов В.В., Базунов А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При выполнении выпускных квалификационных работ (ВКР) в области физической культуры и спорта студенты вузов сталкиваются с необходимостью доказательства гипотезы исследования с помощью методов математической статистики. Опыт показывает, что к завершающему этапу обучения в вузе навыки статистической обработки данных многими студентами утрачиваются и ВКР, представляемые к защите, содержат большое количество методологических и методических неточностей, ошибок. Все ошибки в ВКР можно условно разделить на две группы: 1) Ошибки в организации и проведении исследования (методологические); 2) Ошибки в статистической обработке полученных данных (методические).

К первой группе относятся, прежде всего, ошибки формирования выборок испытуемых при создании экспериментальных групп. Зачастую выборки малы и в них попадают «случайные» испытуемые. Рекомендуется, чтобы численность экспериментальных групп была не менее 30 – 35 человек и при их формировании применялась стратегия рандомизации – случайный отбор или распределение испытуемых, при котором все субъекты имеют равные шансы попасть в группу. Следующим важным моментом является некорректное применение параметрических статистических методов. Все они подразумевают соответствие распределения данных нормальному закону. Поэтому только после проверки распределения данных на «нормальность» имеет смысл рассчитывать средние значения, дисперсии и стандартные отклонения, заниматься построением столбчатых диаграмм и их описанием. Известно, что параметрические методы являются более чувствительными, но менее надежными в сравнении с непараметрическими, поэтому студенту-выпускнику целесообразно знать, что если выборка испытуемых меньше 50 человек, то, как правило, она не подчиняется закону нормального распределения данных.

Итак, для доказательства гипотезы о существовании различий в выраженности показателей наиболее целесообразно применять U-критерий Манна-Уитни; для доказательства гипотезы о существовании связи между показателями – коэффициент ранговой корреляции Спирмена; для доказательства гипотезы о влиянии показателей – H-критерий Крускала-Уоллиса. В этой ситуации показатели описательной статистики – средние значения – могут быть адекватно заменены на усредненные значения ранговых сумм измеренных показателей.

© Загитов В.В., 2014 г.

МАТЕМАТИКА

СЕКЦИЯ «КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И ТЕОРИЯ ФУНКЦИИ»
УДК 517.53

ТОЧНЫЕ ОЦЕНКИ ВЕРХНИХ ГРАНЕЙ ПРОИЗВОДНЫХ НА КУСОЧНО-КВАЗИГЛАДКИХ ДУГАХ

Гайсин Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пусть γ – квазигладкая дуга, α и β – концы этой дуги,
 $C_{00}(M_n; \gamma) = \{f \in C^\infty(\gamma) : \sup_{z \in \gamma} |f^{(n)}(z)| \leq K_f^n M_n, f^{(n)}(\alpha) = f^{(n)}(\beta) = 0 \ (n \geq 0)\}$,

где $M_n > 0$, $M_n^{\frac{1}{n}} \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$. Через $\{M_n^c\}$ обозначим последовательность, полученную из $\{M_n\}$ путем выпуклой регуляризации посредством логарифмов. Как известно, $M_n^c \leq M_n \ (n \geq 0)$ [1]. Речь идет о совпадении классов Карлемана $C_{00}(M_n^c; \gamma)$ и $C_{00}(M_n; \gamma)$ и теореме типа Банга.

Теорема. Пусть γ – кусочно-квазигладкая дуга, $\gamma = \bigcup_{s=1}^n \Gamma_s$, где Γ_s – квазигладкие дуги. Тогда справедливы следующие утверждения:

1) если

$$M_{n+1} \leq C^n M_n \quad (n \geq 0) \quad (1)$$

и $C_{00}(M_n; \gamma_s) \neq \{0\}$ для любого $s = 1, 2, \dots, n$, то

$$\sup_{z \in \gamma} |f^{(n)}(z)| \leq C_f^n M_n^c \quad (n \geq 0);$$

2) если

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{M_n^c}{M_{n+1}^c} = \infty,$$

то класс $C_{00}(M_n; \gamma)$ является квазианалитическим.

Первое утверждение ранее было известно только для отрезка. Второе утверждение является аналогом теоремы Банга [2] для класса $C_{00}(M_n; \gamma)$ на квазигладкой дуге γ в случае произвольных, необязательно возрастающих $M_n > 0$, но удовлетворяющих условию (1). Последнее означает, что класс $C_{00}(M_n; \gamma)$ является инвариантным относительно дифференцирования.

Литература

[1] Мандельброт С. Примыкающие ряды. Регуляризация последовательностей. Применения. М.: ИЛ, 1955.

[2] Bang T. Om quasi-analytiske funktioner. Thesis. Univ. of Copenhagen. 1946.

О НОВЫХ ФУНКЦИЯХ ТИПА ИНТЕГРАЛОВ ФРЕНЕЛЯ

Гой Тарас Петрович

Прикарпатский национальный университет имени Василия Стефаника,
г. Ивано-Франковск, Украина

Для произвольных чисел $x \in \mathbf{R}$ и $m \in \mathbf{N}$ факториальной степенью m с шагом $k \in \mathbf{R}$ называют выражение $x^{m(k)} = x(x+k)(x+2k) \dots (x+(m-1)k)$. Факториальную степень называют возрастающей, если $k > 0$, и убывающей, если $k < 0$.

Для произвольных $x \in \mathbf{R}$ и $m \in \mathbf{N}$ центральной факториальной степенью m с шагом $k > 0$ называют выражение

$$x^{m(k)} = x(x+mk/2-k)(x+mk/2-2k) \dots (x-mk/2+k).$$

Обозначим $x^{\bar{m}} \equiv x^{m(1)}$, $x^{\underline{m}} \equiv x^{m(-1)}$, $x^{[m]} \equiv x^{m(1)}$.

Тригонометрические функции $\sin x$, $\cos x$ задаются через известные степенные ряды, построенные с помощью убывающих факториальных степеней ($n! = n^{\underline{n}}$). Заменяя в этих рядах убывающие факториальные степени соответствующими центральными факториальными степенями, в [1] получены новые неэлементарные функции действительной переменной

$$\text{Sinc } x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{(2n+1)^{[2n+1]}}, \quad \text{Cosc } x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{(2n)^{[2n]}}.$$

Обозначим через $S(x), C(x)$ функции, определенные формулами

$$S(x) = \int_0^x \text{Sinc } t^2 dt, \quad C(x) = \int_0^x \text{Cosc } t^2 dt.$$

Теорема. Для всех $x \in \mathbf{R}$ имеют место равенства

$$S(x) = \frac{x^3}{3} F\left(\frac{3}{4}, 1; \frac{5}{6}, \frac{7}{6}, \frac{7}{4}; -\frac{x^4}{27}\right), \quad C(x) = x - \frac{x^5}{20} F\left(1, \frac{5}{4}; \frac{4}{3}, \frac{5}{3}, \frac{9}{4}; -\frac{x^4}{27}\right),$$

где $F(a_1, a_2; b_1, b_2, b_3; z)$ – обобщенная гипергеометрическая функция, т.е.

$$F(a_1, a_2; b_1, b_2, b_3; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_1^{\bar{n}} a_2^{\bar{n}} z^n}{b_1^{\bar{n}} b_2^{\bar{n}} b_3^{\bar{n}} n!}.$$

Литература

[1] Гой Т. П. О дифференциальных уравнениях функций, порожденных центральными факториальными степенями / Тезисы Крымской междунар. матем. конф. Том 2. – Симферополь: Изд-во КНЦ НАНУ, 2013. – 4-5 с.

О РАЗЛОЖЕНИИ ФИШЕРА ДЛЯ ОПЕРАТОРОВ С ОДНОРОДНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИМИ ФУНКЦИЯМИ

Губайдуллина Эльвира Фанировна
Институт математики с ВЦ УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Разложение Фишера - это представление заданного пространства функций в виде ядра дифференциального оператора и главного идеала. Характеристическая функция дифференциального оператора и функция, порождающая идеал, называются парой Фишера. Изучение пар Фишера началось с работы Фишера [1] 1917г., в которой получена следующая *теорема*: если $P(z) \in H_k$ (H_k - пространство однородных полиномов степени k в \square^n), то всякий полином $Q(z) \in H_m$, $0 \leq m < \infty$, представляется в виде $Q(z) = f_1(z) + f_2(z)$, где $f_1, f_2 \in H_m$, причём f_2 кратно P , а f_1 удовлетворяет дифференциальному уравнению $P^*(D)f_1 = 0$,

$$D = (D_1, \dots, D_n), D_j = \frac{\partial}{\partial z_j}, P^*(z) = \overline{P(\bar{z})}.$$

В 1989г. Шапиро [2] обобщил теорему Фишера на пространство $H(\square^n)$:

Теорема. Пусть P - произвольный однородный полином в \square^n . Тогда любую функцию $f \in H(\square^n)$ можно представить единственным образом в виде $f = f_1 + f_2$, где $f_1, f_2 \in H(\square^n)$, причём $\frac{f_2}{P} \in H(\square^n)$ и $P^*(D)f_1 = 0$.

Нам было сообщено, что в данной работе была допущена ошибка. Нами был найден новый метод доказательства теоремы Шапиро, опирающийся на оценки коэффициентов разложения целой функции в ряд.

Литература

- [1] Fisher E. // J.Math. 148 (1917), p. 1-78.
[2] Shapiro H.S. An algebraic theorem of E.Fisher, and the holomorphic Goursat problem // Bull. London Math. Soc. 21 (1989), p. 513-537.

INVARIANT SUBSPACES OF THE HARDY SPACE OVER THE POLYDISC

Koca B.B.

Department of Mathematics
Istanbul University, Istanbul, Turkey

In the fundemantal work [1], Beurling established that every invariant subspace of the Hardy space over the disc $H^2(\Delta)$ under the multiplication operator by the independent variable is generated by a single inner function. It is clear that in the case of the Hardy space over the polydisc $H^2(\Delta^2)$, the subspaces generated by inner functions are also invariant under the multiplication operators by the independent variables. However, it follows from a result of Jacewicz [2] that there is a invariant subspace of $H^2(\Delta^2)$ under the multiplication operators by the independent variables is generated by two functions and can not be generated by any one function. Moreover Rudin [3] gave an example of invariant subspace of $H^2(\Delta^2)$ that are not finitely generated.

Further, he showed that there are invariant subspaces of $H^2(\Delta^2)$ that contain no bounded elements in contrast with one variable case, every invariant subspaces contains and generated by a bounded function. Therefore "one can ask for a classification or an explicit description (in some sense) of all invariant subspaces of $H^2(\Delta^2)$ ". This question was asked by Rudin in his book [3, p.78]. In this talk we describe invariant subspaces of the Hardy space over the polydisc under the multiplication operators by the independent variables which are generated by an inner function. Then we show that existence of invariant subspaces of the Hardy space over the polydisc under the multiplication operators by the independent variables which are generated by a non-inner function.

References

1. A. Beurling, On two problems concerning linear transformations in Hilbert space, Acta Math. 81, (1948).
2. C.A. Jacewicz, A nonprincipal invariant subspace of the Hardy space on the torus, Proc. Amer. Math. Soc. 31, 127-129 (1972)
3. W. Rudin, Function theory in polydiscs, W. A. Benjamin, Inc., New York-Amsterdam, 1969, p.vii+188

Пусть $h(t)$ – выпуклая функция на конечном интервале $I = (a; b)$ вещественной оси, тогда определено гильбертово пространство

$$L_h^2(I) = \left\{ f : \int_I |f(t)|^2 e^{-2h(t)} dt < \infty \right\} \text{ со скалярным произведением}$$

$$(f, g) = \int_I f(t) \overline{g(t)} e^{-2h(t)} dt, \quad f, g \in L_h^2(I). \text{ Для выпуклой функции } h(t),$$

причем $h(t) \neq ct + d$, рассматривается геометрическая характеристика выпуклости $\rho_h(t)$ на вещественной оси. [1]

Утверждение 1. Следующие условия эквивалентны: 1)

$$\int_{x-\rho_h^-(x)}^{x+\rho_h^+(x)} |\tilde{h}'(x) - \tilde{h}'(t)| dt \equiv 1; \quad 2) \quad \tilde{h}(x - \rho_h^-(x)) + \tilde{h}(x + \rho_h^-(x)) - 2\tilde{h}(x) \equiv 1; \quad 3)$$

$$\int_0^{\rho_h^-(x)} (\tilde{h}'(x+t) - \tilde{h}'(x-t)) dt \equiv 1.$$

Утверждение 2. Если функция $h(x)$ имеет вторую производную, то

для нее и функции $\rho_h(x)$ верно соотношение $\frac{C_1}{\sqrt{h''(x)}} \leq \rho_h(x) \leq \frac{C_2}{\sqrt{h''(x)}}$,

где $C_1 = \sqrt{1 - \frac{h^{(4)}(x)}{12(h''(x))^2}}$, $C_2 = 1$, то есть $\rho_h(x) \sim \frac{1}{\sqrt{h''(x)}}$.

Литература

1. Луценко В.И., Юлмухаметов Р.С. Обобщение теоремы Пэли – Винера на весовые пространства // Математические заметки. 1990. Т. 48, № 5. С. 80 – 87.

ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ОПЕРАТОРА СВЕРТКИ НА ВЫПУКЛЫХ ОБЛАСТЯХ

Зименс Карина Раисовна, Напалков Валентин Васильевич
Уфимский государственный авиационный технический университет,
Институт математики с ВЦ УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Пусть D - выпуклая область, $H(D)$ - пространство аналитических функций в D , $H^*(D)$ - сопряженное к $H(D)$ пространство. Обозначим $\varphi(z) = (F, e^z)$ преобразование Лапласа функционала F , а за пространство P_D - преобразование Лапласа всех функционалов из $H^*(D)$.

Рассмотрим оператор свертки $M_\varphi[f(z)], f(z) \in H(D)$. Введем условие, что функция $\varphi(z)$ вполне регулярного роста [1]. Тогда оператор $M_\varphi[f(z)]$ линейный, непрерывный, сюръективный и действует из $H(D)$ в $H(D_2)$. Считаем, что D_1 сопряженная диаграмма функции $\varphi(z)$ такая, что $D_1 + D_2 = D$. Тогда $\forall \varepsilon > 0$ выполняется $|\varphi(z)| \leq C(\varepsilon)e^{(h_\varphi(\theta) + \varepsilon)|z|}$, где $h_\varphi(\theta)$ - индикатриса роста функции $\varphi(z)$.

Для оператора M_φ рассмотрим задачу. Пусть в каждой точке μ_k задан конечный набор комплексных чисел $a_{kj}, j = 0, 1, \dots, s_k - 1$. Многоточечная задача Валли Пуссена состоит в следующем: существует ли функция $u(z)$ из ядра M_φ в $H(D)$ такая, что $u^{(j)}(\mu_k) = a_{kj}, j = 0, 1, \dots, s_k - 1$.

Теорема. Пусть функция $\psi(z) \in H(D)$ имеет нули μ_k кратности s_k такие, что $\mu_k > \mu_{k-1}, \mu_k \in \square_+, k = 1, 2, \dots$ и предел μ_k лежит на границе. Функция $\varphi(z)$ вполне регулярного роста, обозначим λ_k такие нули этой функции, которые лежат на луче, перпендикулярном касательной к области D в предельной точке μ_k , лежащей на границе, и $\lambda_k \square \infty$. Тогда задача Валли Пуссена разрешима для M_φ .

Литература

[1] Левин Б.Я. Распределение корней целых функций. М.: Гос. издат. техн.-теоретич. лит.-ры. 1956. 632 с.

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ»

УДК 517.955.8

АСИМПТОТИКА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ

Ершов А.А.¹, Гадыльшин Р.Р.²

¹Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия,

²Башкирский педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Пусть $x = (x_1, x_2, x_3)$, Ω – ограниченная односвязная область в \mathbb{R}^3 с границей $\partial\Omega \in C^\infty$. И пусть эта область имеет два конечных плоских участка, с которыми мы свяжем две декартовы координатные системы $O_1x_1x_2x_3$ и $O_2y_1y_2y_3$. Множества γ_1 и γ_2 – замыкания ограниченных односвязных областей на плоскостях $x_3 = 0$ и $y_3 = 0$ соответственно, $\partial\gamma_1 \in C^\infty$, $\partial\gamma_2 \in C^\infty$, $0 < \varepsilon \ll 1$. Обозначим $\gamma_k^\varepsilon = \{z : \varepsilon^{-1}z \in \gamma_k\}$, $k = 1, 2$. Электрический потенциал моделируется с помощью решения $u(x, \varepsilon) \in C^\infty(\bar{\Omega} \setminus \{\partial\gamma_1^\varepsilon \cup \partial\gamma_2^\varepsilon\}) \cap C(\bar{\Omega})$ следующей краевой задачи:

$$\begin{cases} \Delta u = 0, & x \in \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0, & x \in \partial\Omega \setminus \{\gamma_1^\varepsilon \cup \gamma_2^\varepsilon\}, \\ u = 1, & x \in \gamma_1^\varepsilon, \\ u = -1, & x \in \gamma_2^\varepsilon, \end{cases}$$

где \mathbf{n} – внешняя нормаль. Методом согласования асимптотических разложений [1] построено асимптотическое разложение функции $u(x, \varepsilon)$ по малому параметру ε , характеризующему размер участков γ_1^ε и γ_2^ε . Получена следующая формула для электрического сопротивления образца формы Ω с контактами γ_1^ε и γ_2^ε :

$$R = \frac{1}{\varepsilon} \cdot \frac{C_1 + C_2}{2\pi\sigma \cdot C_1 C_2} - \frac{1}{2\pi\sigma} (g_2(O_1) + g_1(O_2)) + O(\varepsilon),$$

где σ – проводимость материала, $C_1 > 0$ и $C_2 > 0$ – ёмкости дисков γ_1 и γ_2 , g_1 и g_2 – некоторые функции, зависящие только от x и Ω .

Работа первого автора поддержана РФФИ (проект № 14-31-50424-мол_нр) и "Фондом поддержки молодых ученых "Конкурс Мёбиуса". Работа второго автора выполнена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки России.

Литература

1. Ильин А. М. Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. – М.: Наука, 1989. – 336 с.

ЗАДАЧА ДИРИХЛЕ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА С БЫСТРООСЦИЛЛИРУЮЩИМ И ДЕЛЬТООБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛАМИ

Гадыльшин Т. Р.

Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

В работе рассматривается следующая краевая задача:

$$-u''_{\mu,\varepsilon} + (q(x, \mu^{-1}x) + \varepsilon^{-1}Q(\varepsilon^{-1}x))u_{\mu,\varepsilon} = f(x, \mu^{-1}x) = 0, \quad x \in (a, b) \quad 1)$$

$$u_{\mu,\varepsilon}(a) = u_{\mu,\varepsilon}(b) = 0, \quad 2)$$

где $q(x, \xi)$, $f(x, \xi)$ – 1-периодические по ξ функции из $C([a, b] \times (-\infty, \infty))$, $a < 0 < b$, $Q(\xi) \in C_0(-\infty, \infty)$, $0 < \mu, \varepsilon \ll 1$, $q(\xi) > 0$, $Q(\xi) \geq 0$. Обозначим

$$[g] = \int_0^1 g(\xi) d\xi, \quad \langle Q \rangle = \int_0^1 Q(\xi) d\xi.$$

Методами согласования асимптотических разложений и усреднения (см., например, [1]) показана справедливость следующего утверждения.

Теорема 1. *Существует единственное решение краевой задачи (1), (2) и для него справедливо равенство $\|u_{\mu,\varepsilon} - u_0\|_{C[a,b]} = O(\varepsilon + \mu)$, где $u_0(x)$ – решение краевой задачи*

$$-u_0'' + [q]u_0 = [f], \quad x \in (a, 0) \cup (0, b) \quad u_0(a) = u_0(b) = 0, \\ u_0'(+0) - u_0'(-0) = \langle Q \rangle u_0(0).$$

Пусть δ – функция Дирака. Тогда для последней краевой задачи используется и следующая запись (см., например [2]):

$$-u_0'' + [q]u_0 + \langle Q \rangle \delta u_0 = [f], \quad x \in (a, 0) \cup (0, b), \quad u_0(a) = u_0(b) = 0.$$

Литература

1. Ильин А. М., Данилин А. Р. Асимптотические методы в анализе – М.: Физматлит, 2009.
2. Альберверо С., Гестези Ф., Хёгг-Крон Р., Хольден Х. Решаемые модели в квантовой механике – М.: Мир, 1991.

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ НУЛЕВОГО И ПЕРВОГО ПОРЯДКОВ ДЛЯ ОДНОЙ ЭВОЛЮЦИОННОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ.

Гайсина Регина Науфилевна

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящей работе рассматривается система уравнений вида:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + f(x, t, u, v, u_x, v_x) \\ v_t = -v_{xx} + \varphi(x, t, u, v, u_x, v_x) \end{cases} \quad (1)$$

Определены системы уравнений (1), которые обладают законами сохранения нулевого и первого порядков.

Справедливо следующее утверждение.

Теорема. Система уравнений (1), которая имеет закон сохранения нулевого порядка

$$D_t A(x, t, u, v) = D_x B(x, t, u, v, u_x, v_x), \quad (2)$$

точечными преобразованиями приводится к системе вида:

$$\begin{cases} u_t = p_x \\ v_t = -v_{xx} + \varphi(x, t, u, v, p, v_x) \end{cases} \quad (3)$$

где $p = u_x + a(x, t, u, v)v_x + b(x, t, u, v)$.

Получены условия на правые части системы уравнений (3), при которых она обладает законом сохранения первого порядка:

$$D_t A(x, t, u, v, u_x, v_x) = D_x B(x, t, u, v, u_x, v_x, u_{xx}, v_{xx}). \quad (4)$$

Также в работе рассмотрены частные случаи системы уравнений (1). Например, нелинейное уравнение Шредингера:

$$\begin{cases} iu_t = u_{xx} + f(|u|^2)u \\ -i\bar{u}_t = \bar{u}_{xx} + f(|u|^2)\bar{u} \end{cases}, \quad (5)$$

где $|u|^2 = u\bar{u}$ и $f \neq 0$.

Законы сохранения нулевого и первого порядков имеют вид:

$$D_t(uv) = D_x(vu_x - uv_x) \quad \text{и}$$

$$D_t(u_x v_x - \int f(uv)d(uv)) = D_x(v_t u_x - u_t v_x).$$

Отметим, что в работах [1],[2] найдены классы уравнений типа (1), обладающие бесконечным набором законов сохранения.

Литература

[1] Михайлов А.В., Шабат А.Б. Условия интегрируемости систем двух уравнений вида $u_t = A(u)u_{xx} + F(u, u_x)$. // ТМФ. 1985. Т. 62, № 2. С. 163-185.

[2] Шабат А.Б., Ямилов Р.И. О полном списке интегрируемых систем уравнений вида: $iu_t = u_{xx} + f(u, v, u_x, v_x)$, $-iv_t = v_{xx} + g(u, v, u_x, v_x)$. // Препринт. Уфа: БФАН СССР. 1985. С. 28.

ЗАДАЧА ДИРИХЛЕ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ПЕРЕМЕННЫМ ПОКАЗАТЕЛЕМ НЕЛИНЕЙНОСТИ

Камалетдинов Александр Шамилевич (научный руководитель -
Кожевникова Л.М.),
СФ БашГУ, г. Стерлитамак, Россия

Для анизотропного квазилинейного эллиптического уравнения второго порядка в произвольной неограниченной области $\Omega \subseteq R_n$, $n \geq 2$ рассматривается задача Дирихле

$$\sum_{\alpha=1}^n (a_\alpha(\mathbf{x}, \nabla u))_{x_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^n (\Phi_\alpha(\mathbf{x}))_{x_\alpha}, \quad \mathbf{x} \in \Omega; \quad (1)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (2)$$

Предполагается, что функции $a_\alpha(\mathbf{x}, \xi)$, $\alpha = \overline{1, n}$, каратеодоривы, пусть существуют числа \bar{a} , $\hat{a} > 0$ такие, что для п.в. $\mathbf{x} \in \Omega$ и любых $\xi, \eta \in R_n$ справедливы неравенства

$$\sum_{\alpha=1}^n a_\alpha(\mathbf{x}, \xi) \xi_\alpha \geq \bar{a} |\xi|^{p(\mathbf{x})}; \quad (3)$$

$$\sum_{\alpha=1}^n (a_\alpha(\mathbf{x}, \xi) - a_\alpha(\mathbf{x}, \eta)) (\xi_\alpha - \eta_\alpha) > 0, \quad \xi \neq \eta. \quad (4)$$

Здесь $p(\mathbf{x})$ измеримая и удовлетворяют условию

Определим пространство Соболева-Орлича $\dot{H}_{p(\cdot)}^1(\Omega)$ как пополнение $C_c^\infty(\Omega)$ по норме $\|u\|_{\dot{H}_{p(\cdot)}^1(\Omega)} = \|\nabla u\|_{p(\cdot)}$.

Определение. Обобщенным решением задачи (1), (2) с $\alpha = \overline{1, n}$, назовем функцию $u(\mathbf{x}) \in \dot{H}_{p(\cdot)}^1(\Omega)$ для любой функции $v(\mathbf{x}) \in \dot{H}_{p(\cdot)}^1(\Omega)$ удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\sum_{\alpha=1}^n \int_{\Omega} (a_\alpha(\mathbf{x}, \nabla u) - \Phi_\alpha) v_{x_\alpha} dx = 0.$$

Теорема. Пусть выполнены условия (3) - (5), тогда существует единственное обобщенное решение задачи (1), (2)

ЧАСТНЫЕ РЕШЕНИЯ ОДНОГО УРАВНЕНИЯ В КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЯХ.

Хакимова Айгуль Ринатовна

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Данная работа посвящена методу обратной задачи рассеяния . К дискретной системе

$$\begin{cases} u_{n,m+1} - u_{n+1,m} + u_{n+1,m+1}((u_{n,m+1} - u_{n+1,m})v_{n+1,m} + \varepsilon) = 0 \\ v_{n+1,m} - v_{n,m+1} + v_{n,m}((v_{n+1,m} - v_{n,m+1})u_{n,m+1} + \varepsilon) = 0 \end{cases}$$

были применены общие схемы построения явного частного решения. Заданная дискретная система является условием совместности пары

$$y(n+1, m) = f(n, m)y(n, m)$$

линейных уравнений вида: $y(n, m+1) = g(n, m)y(n, m)'$

где $y(n, m)$ матричная функция. Итак, имеется два уравнения на одну неизвестную функцию. В общем случае, такая система не имеет решений. В нашем случае система имеет решение, если она является условием коммутирования двух дискретных операторов $L = D_n^{-1}f$ и $M = D_m^{-1}g$, где

$$f = \begin{pmatrix} \lambda + u_{n,m}v_{n,m} & v_{n,m} \\ u_{n,m} & 1 \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} \lambda + \varepsilon + u_{n-1,m+1}v_{n,m} & v_{n,m} \\ u_{n-1,m+1} & 1 \end{pmatrix},$$

D_n - оператор сдвига по переменной $n: D_n f(n, m) = f(n+1, m)$, D_m - по m , иными словами выполняется следующее условие: $D_m(f)g = D_n(g)f$.

Метод нахождения явного частного решения подробно описан в [1] и применен к заданной динамической системе. В общем случае, решение ищется в виде асимптотического разложения:

$$y_{n,m} = T(n, m, \lambda) e^{\sum_{n=-\infty}^{\infty} \ln h_j(n, m)} \quad \text{где}$$

$$T(n, m, \lambda) = T_0(n, m) + T_1(n, m)\lambda^{-1} + T_2(n, m)\lambda^{-2} + \dots$$

$$h(n, m, \lambda) = h_0(n, m) + h_1(n, m)\lambda^{-1} + h_2(n, m)\lambda^{-2} + \dots \quad \text{и}$$

В некоторых случаях, $y_{n,m}$ можно записать компактно в удобной форме:

$$y_{n,m} = A\lambda + B/\lambda - \eta, \text{ с помощью которой можно легко найти}$$

явные частные решения. В нашем случае решение имеет вид:

$$\begin{cases} u_{n,m} = (\eta - \mu) p q / \eta (\mu^n (\mu + \varepsilon)^m q - \eta^n (\eta + \varepsilon)^m p) \\ v_{n,m} = (\eta - \mu) \eta^{n+1} (\eta + \varepsilon)^m \mu^n (\mu + \varepsilon)^m / (\eta \mu^n (\mu + \varepsilon)^m q - \mu \eta^n (\eta + \varepsilon)^m p) \end{cases}$$

где m, z, p, q константы.

Литература

[1] И.Т. Хабибуллин, А.Г. Шагалов, Численная реализация метода обратной задачи рассеяния. Физика. Том 83, №3, июнь, 1990г.

[2] М. Абловиц, Х. Сегур, Солитоны и метод обратной задачи. М., 1987.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЮСОВ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ПЕНЛЕВЕ-4

Щелконогов Алексей Александрович
Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

Работа посвящена изучению распределения полюсов специальных решений нелинейного уравнения Пенлеве-4. Эти решения представляют собой рациональные функции. Задача состоит в вычислении этого распределения в пределе при бесконечном числе полюсов. Впервые подобную задачу поставил и решил Т.Стилтьес в 1885 году на вещественной прямой, причем в его ответе координаты зарядов совпадали с нулями классических полиномов Эрмита.

В данной работе исследуется поведение полюсов решений уравнения Пенлеве-4 на комплексной плоскости в случае бесконечного числа полюсов. Методом скейлингового предела показано, что полюса решений уравнения Пенлеве-4 в предельном случае совпадают с нулями эллиптической функции Вейерштрасса, а также при определенных условиях с полюсами эллиптического синуса.

Литература

- [1] И.Р. Итс, А.А. Капаев, В.Ю. Новокшенов, А.С. Фокас, «Трансценденты Пенлеве. Метод задачи Римана», Москва, Ижевск, 2005.
[2] Г. Бейтмен, А. Эрдейн. Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции. Функции Ламе и Матье, Москва, 1967, с. 9-68.

УДК 517.9

ФОРМАЛЬНАЯ ДИАГНОНАЛИЗАЦИЯ ОПЕРАТОРА ЛАКСА И ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ¹

Янгубаева Марина Валерьевна, УГУЭС, г.
Уфа, Россия

Исследуется динамическая система $\varepsilon(D_m D_n \mathbf{u}, D_m \mathbf{u}, D_n \mathbf{u}, \mathbf{u}) = 0$, пара Лакса которой имеет вид

$$y(n+1, m) = P(\mathbf{u}, \lambda) Z y(n, m), y(n, m+1) = R(\mathbf{u}, \lambda) y(n, m) \quad (1)$$

¹ Работа выполнена при поддержке РФФИ: гранты № 13-01-00070 А, 14-01-97008 р_поволжье_a

где $\mathbf{u} = \mathbf{u}(n)$ – функциональный параметр – векторно-значная функция дискретного аргумента n , λ – спектральный параметр, $Z = \text{diag}(\lambda^{\gamma_1}, \lambda^{\gamma_2}, \dots, \lambda^{\gamma_N})$ – диагональная матрица, показатели γ_i – целые числа, $\gamma_1 < \gamma_2 < \dots < \gamma_N$. Введем операторы сдвига D_n, D_m , действующий по правилу $D_n t(n, m) = t(n+1, m)$, $D_m t(n, m) = t(n, m+1)$.

Гипотеза. Рассмотрим дискретный оператор $L = D_n^{-1} P(\mathbf{u}(n), \lambda) Z$. Предположим, что для любого целого n функция $P(\mathbf{u}(n), \lambda)$ является аналитической в некоторой окрестности точки $\lambda = \infty$ (или $\lambda = 0$), и все главные миноры матрицы $P(\mathbf{u}(n), \infty)$ (или $P^{-1}(\mathbf{u}(n), 0)$) отличны от нуля. Тогда существует формальный ряд $T = \sum_{i \geq 0} T_i \lambda^{-i}$ (или $T = \sum_{i \geq 0} T_i \lambda^i$) такой, что оператор $L_0 = T^{-1} L T$ имеет вид $L_0 = D_n^{-1} h Z$, где h – формальный ряд с диагональными коэффициентами.

Для построения законов сохранения динамической системы (1) рассмотрим операторы $L = D_n^{-1} P Z$ и $M = D_m^{-1} R$. Доказано, что если оператор P удовлетворяет условию Гипотезы, и функция R мероморфна в окрестности точки $\lambda = \infty$, то операторы L и M приводятся к диагональному виду при помощи одного и того же преобразования. Получим операторы $L_0 = T^{-1} L T$ и $M_0 = T^{-1} M T$, которые можно представить в виде формальных рядов $L_0 = D_n^{-1} h Z$ и $M_0 = D_m^{-1} S$ с диагональными коэффициентами.

Окончательно, законы сохранения получаем из выражения

$$(D_m - 1) \ln h = (D_n - 1) \ln S. \quad (2)$$

Полагая $h = h_0 + h_1 \lambda^{-1} + h_2 \lambda^{-2} + \dots$ и $S = S_0 + S_1 \lambda^{-1} + S_2 \lambda^{-2} + \dots$, равенство (2) примет вид

$$(D_m - 1) \left(\ln h_0 + \frac{h_1}{h_0} + \left(\frac{h_2}{h_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{h_1}{h_0} \right)^2 \right) + \dots \right) = (D_n - 1) \left(\ln S_0 + \frac{S_1}{S_0} + \left(\frac{S_2}{S_0} - \frac{1}{2} \left(\frac{S_1}{S_0} \right)^2 \right) + \dots \right)$$

Литература

- [1]. В.Вазов, Асимптотическое разложение решений обыкновенных дифференциальных уравнений. М., Мир, 1968.
- [2]. И.Т.Хабибуллин, Дискретная система Захарова-Шабата и интегрируемые системы, Записки научных семинаров Ломи, Ленинград, Наука, Т.145, 1985.

Θ - PSEUDO-DIFFERENTIAL OPERATORS

Niyaz Tokmagambetov
Al-Farabi Kazakh National University,
Almaty, Kazakhstan

Pseudo-differential operators and Θ -toroidal symbols generated by a non-local boundary value problem are investigated. Formula for compositions with pseudo-differential operators generated by a non-local boundary value problem is derived. In the Hilbert space $L_2(0,1)$ concepts of the Fourier transform and convolution generated by a non-local boundary value problem are introduced.

Let us introduce in the Hilbert space $L_2(0, 1)$ the differential operator L

$$Ly(x) = -i \frac{dy(x)}{dx}, 0 < x < 1$$

with the domain $D(L) = \{y \in W_2^1[0, 1]: \theta y(0) - y(1) = 0\}$, where $\theta \geq 1$. The symbolic analysis on \mathbb{R} commute with the classical Fourier transform, which is a unitary transform in the Hilbert space $L_2(-\infty, +\infty)$. It is generated by the operator of differentiation $(-i \frac{d}{dx})$, because the system of exponents $\{\exp(i\lambda x), \lambda \in \mathbb{R}\}$ is a system of "eigenfunctions" corresponding to its continuous spectrum. Instead of the differential operator $(-i \frac{d}{dx})$ in the space $L_2(-\infty, +\infty)$, consider an operator L in the Hilbert space $L_2(0,1)$, which is generated by the differential operator $(-i \frac{d}{dx})$ and non-local boundary condition $\theta y(0) - y(1) = 0$.

Indeed, we start an direction of discrete analysis based on elliptic boundary value problems, continuing, in a sense, the analysis on the torus started by M. Ruzhansky and V. Turunen [1], in which case one may think of a problem having periodic boundary conditions.

References

[1] M. Ruzhansky, V. Turunen, Quantization of Pseudo-differential Operators on the Torus, J. Fourier Anal. Appl., 16, 943–982 (2010).

УДК 517.9

ЛИНЕЙНЫЕ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ С ПОСТОЯННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

Воронова Юлия Геннадьевна²

Уфимский государственный авиационный технический университет,
г. Уфа, Россия

В работе рассматривается система уравнений вида

$$\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} U + a \frac{\partial}{\partial x} U + b \frac{\partial}{\partial y} U + cU = 0, \quad (1)$$

где a, b, c - постоянные матрицы второго порядка, U - столбец неизвестных $(U^1(x, y), U^2(x, y))^T$.

Мы предполагаем, что для системы уравнений (1) выполнены условия существования и единственности обобщенных инвариантов Лапласа [1]. Получен общий вид обобщенных инвариантов Лапласа для линейных систем уравнений (1):

Теорема. Пусть инварианты Лапласа H_1, H_2, \dots, H_k уравнения (1) – невырожденные матрицы, а $\text{Rang} H_{k+1} = 1$. Тогда обобщенный инвариант порядка n вычисляется по формуле

$$X_n = (\alpha, \beta)^{n-k-1} X_{k+1}, \quad n = k+1, k+2, \dots$$

здесь $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$, $\beta = (\beta_1, \beta_2)$, $H_{k+1} = \alpha^T \cdot \beta$.

Описаны системы уравнений (1), для которых обобщенные инварианты Лапласа есть нулевые матрицы и для них построено общее решение. Также проведена классификация систем уравнений третьего порядка с постоянными коэффициентами, у которых инвариант H_1 имеет ранг 2, а обобщенный инвариант Лапласа $X_2 = 0$.

Литература

[1] Жибер А.В., Соколов В.В. Точно интегрируемые гиперболические уравнения лиувиллевского типа. УМН. – 2001. – Т. 56. – №1. – С. 63 - 106.

² Работа поддержана грантом РФФИ № 14-01-97008 р-поволжье-а

СЕКЦИЯ «СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

УДК 517.984:517.928.8

АСИМПТОТИКИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ В ОБЛАСТИ С МАЛЫМ ОТВЕРСТИЕМ

Давлетов Д.Б.¹, Файзулина К.И.²

¹ Башкирский государственный педагогический университет, г. Уфа, Россия,

² Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пусть Ω, ω – ограниченные связные области в R^n , $n \geq 3$, содержащие начало координат, $\partial\omega, \partial\Omega \in C^\infty$, $|S_n|$ – площадь единичной сферы в R^n , $c(\omega) > 0$ – гармоническая емкость ω , $a_{ij}, a \in C^\infty(\bar{\Omega})$, $a_{ij} = a_{ji}$,

$$\alpha_1 |\xi|^2 \leq \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x) \xi_i \xi_j \leq \alpha_2 |\xi|^2, \quad \alpha_1, \alpha_2 > 0, \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall \xi = (\xi_1, \dots, \xi_n),$$

$\omega_\varepsilon = \{x : \varepsilon^{-1}x \in \omega\}$, $\Omega_\varepsilon = \Omega \setminus \bar{\omega}_\varepsilon$, а $0 < \varepsilon \ll 1$. Доказана теорема.

Теорема 1. Пусть λ_0 – двукратное собственное значение краевой задачи:

$$-\sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u_0}{\partial x_j} \right) + a(x) u_0 = \lambda_0 u_0, \quad x \in \Omega, \quad u_0 = 0, \quad x \in \partial\Omega,$$

$\psi_0^{(1)}$ и $\psi_0^{(2)}$ – соответствующие ортонормированные в $L_2(\Omega)$ собственные функции такие, что $\psi_0^{(1)}(0) \neq 0$, $\psi_0^{(2)}(0) = 0$. Тогда существуют два простых собственных значения $\lambda_\varepsilon^{(1)}$ и $\lambda_\varepsilon^{(2)}$ краевой задачи:

$$-\sum_{i,j=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{ij}(x) \frac{\partial u_\varepsilon}{\partial x_j} \right) + a(x) u_\varepsilon = \lambda_\varepsilon u_\varepsilon, \quad x \in \Omega_\varepsilon, \quad u_\varepsilon = 0, \quad x \in \partial\Omega_\varepsilon,$$

сходящиеся к λ_0 , и они имеют следующие асимптотики соответственно:

$$\lambda_0 + \varepsilon^{n-2} \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \lambda_{i+n-2,0}^{(1)} + d(n) \varepsilon^{2(n-2)} \ln \varepsilon \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{i=(n-2)p}^{\infty} \varepsilon^i \ln^p \varepsilon \lambda_{i+2(n-2),p+1}^{(1)},$$

$$\lambda_0 + \varepsilon^n \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \lambda_{i+n,0}^{(2)} + d(n) \varepsilon^{2(n-2)+2} \ln \varepsilon \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{i=(n-2)p}^{\infty} \varepsilon^i \ln^p \mathcal{E} \lambda_{i+2(n-2)+2,p+1}^{(2)},$$

$$\lambda_{n-2,0}^{(1)} = (n-2)c(\omega) |S_n| |\psi_0^{(1)}(0)|^2,$$

$$\lambda_{n,0}^{(2)} = |S_n| |\nabla \psi_0^{(2)}(0) C_2(\omega) \nabla \psi_0^{(2)}(0)| > 0,$$

где $C_2(\omega)$ – положительно определенная $(n \times n)$ -матрица, зависящая только от геометрии ω , а $d(n)=0$ при нечетных n и $d(n)=1$ при четных n .

© Давлетов Д.Б., Файзулина К.И., 2014 г.

**ЗАДАЧА СТЕКЛОВА В ПОЛУЦИЛИНДРЕ С МАЛЫМ
ОТВЕРСТИЕМ**

Кожевников Денис Владимирович, Хуснуллин Ильфат Хамзиевич
Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумуллы,
г. Уфа, Россия

Пусть Σ - $(n-1)$ -мерная ограниченная область, $n \geq 3$, $\partial\Sigma \in C^\infty$,
 $\Pi := \Sigma \times (a, +\infty)$, $a < 0$, $\{0\} \in \Pi$, ω - ограниченная область в R^n ,
 $\partial\omega \in C^\infty$, $\omega_\varepsilon = \{x : \varepsilon^{-1}x \in \omega\}$, $0 < \varepsilon \ll 1$, $\Pi_\varepsilon := \Pi \setminus \overline{\omega_\varepsilon}$, а $|S_n|$ -
площадь единичной сферы в R^n , $c(\omega) > 0$ - емкость области ω . Методом
согласования асимптотических разложений [1] доказана

Теорема 1.1 Пусть λ_0 - простое собственное значение краевой задачи

$$\Delta\psi_0 = 0, \quad x \in \Pi, \quad \psi_0 = 0, \quad x \in \partial\Pi \setminus \Sigma_a, \quad -\frac{\partial\psi_0}{\partial x_n} = \lambda_0\psi_0, \quad x \in \Sigma_a := \Sigma \times \{a\},$$

ψ_0 - соответствующая нормированная в $L_2(\Sigma_a)$ собственная функция.

Тогда собственное значение λ_ε краевой задачи $\Delta\psi_\varepsilon = 0$, $x \in \Pi_\varepsilon$,

$$\psi_\varepsilon = 0, \quad x \in \partial\Pi_\varepsilon \setminus \Sigma_a, \quad -\frac{\partial\psi_\varepsilon}{\partial x_n} = \lambda_\varepsilon\psi_\varepsilon, \quad x \in \Sigma_a, \quad \text{сходящееся к } \lambda_0, \quad \text{при}$$

$\varepsilon \rightarrow 0$ имеет асимптотику $\lambda_\varepsilon = \lambda_0 + \varepsilon^{n-2} \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \lambda_{i+n-2}$, где

$\lambda_{n-2} = c(\omega)|S_n|(n-2)\psi_0^2(0)$. Причем, если $\psi_0(0) = 0$, то

$\lambda_{n-2} = \lambda_{n-1} = 0$, а $\lambda_n = |S_n|\nabla\psi_0(0)C(\omega)\nabla\psi_0(0)$, где $C(\omega)$ -
симметричная положительная $n \times n$ -матрица, компоненты которой
зависят только геометрии области ω .

Работа второго автора выполнена в рамках базовой части
государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки
России.

Литература

1. Ильин А.М. Согласование асимптотических разложений решений
краевых задач. М.: Наука. 1989. – 336.

**ФОРМУЛА ЛЕФШЕЦА ДЛЯ ПОТОКА НА РАССЛОЕННОМ
МНОГООБРАЗИИ.**

Павленко Виктор Александрович

Башкирский государственный аграрный университет, г. Уфа, Россия

Пусть компактное многообразие X является тотальным пространством расслоения $\pi : X \rightarrow S^1$ над окружностью. Пусть на X задан поток $T_t : X \rightarrow X$, сохраняющий расслоение π . Гладкое векторное поле, порождённое данным потоком, представляется в виде:

$$V(y) = v_0(y) + a(y) \frac{\partial}{\partial y},$$

где $v_0(y)$ – векторное поле, касающееся слоёв расслоения π . Предположим, что поток имеет конечное число неподвижных точек $\alpha_1, \dots, \alpha_k$, которые являются невырожденными, что означает, $\forall j = 1, \dots, k$ справедливо $a(\alpha_j) = 0$, при этом $a'(\alpha_j) \neq 0$. Рассмотрим слоение Φ , задаваемое слоями расслоения π . Основной целью работы является написать формулу Лефшеца, которая связывает неподвижные точки и замкнутые орбиты потока. Орбита потока T_t называется замкнутой, если $\exists \tau > 0$, такое что $T_\tau(x) = x \quad \forall x \in X$. Числом Лефшеца потока T_t определяется по формуле:

$$L(T) = \sum_{s=0}^{n-1} (-1)^s \operatorname{tr}(T_t^* : \overline{H}^s(\Phi) \rightarrow \overline{H}^s(\Phi)),$$

где $\overline{H}^s(\Phi)$ – послойные когомологии де Рама. Проблема заключается в том, что в данном случае оператор T_t^* не является ядерным. Случай, когда поток не имеет неподвижных точек, был рассмотрен Ю.А. Кордюковым и Х.Л. Альваресом. В нашем случае формула Лефшеца имеет вид:

$$L(T) = C\chi(\Phi)\delta_0, \quad \text{где} \quad \chi(\Phi) = \sum_{s=0}^{n-1} (-1)^s \dim H^s(F).$$

**О ПОВЕДЕНИИ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ ПРИ
СИНГУЛЯРНОМ ВОЗМУЩЕНИИ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА ДЛЯ
ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ**

Репьевский С.В.¹, Гадьльшин Р.Р.²

¹ Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия,

² Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Пусть Ω – круг единичного радиуса с центром в начале координат, (r, φ) – полярные координаты, $\gamma^\varepsilon := \{x \in \partial\Omega : a\varepsilon < \varphi < b\varepsilon\}$, $0 < \varepsilon \ll 1$, $a < 0 < b$. Рассмотрим краевую задачу

$$\begin{aligned} -\Delta \psi^\varepsilon &= \lambda^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad x \in \Omega, & \psi^\varepsilon &= 0, \quad x \in \gamma^\varepsilon, \\ \frac{\partial \psi^\varepsilon}{\partial r} &= 0, \quad x \in \partial\Omega \setminus \gamma^\varepsilon. \end{aligned} \quad (1)$$

Хорошо известно (см. [1]), что собственные значения задачи (1) при $\varepsilon \rightarrow 0$ сходятся к собственным значениям задачи

$$-\Delta \psi_0 = \lambda_0 \psi_0, \quad x \in \Omega, \quad \psi_0 = 0, \quad x \in \partial\Omega, \quad (2)$$

Задача (2), в свою очередь, имеет либо простые собственные значения, совпадающие с квадратами нулей производной функции Бесселя нулевого порядка, либо двукратные собственные значения, совпадающие с квадратами нулей производной функции Бесселя m -го порядка, $m \geq 1$. Методом согласования асимптотических разложений [2] доказана следующая теорема.

Теорема 1. *Существует собственное значение λ^ε краевой задачи (1), сходящееся к двукратному собственному значению λ_0 краевой задачи (2),*

которое имеет асимптотику $\lambda^\varepsilon = \lambda_0 + \varepsilon^2 \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{1}{\varepsilon} \rfloor} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{1}{\varepsilon} \rfloor} \varepsilon^i \ln^k \varepsilon \mathcal{E}_{i+2k}$, где

$$\lambda_{2+2k,k} = m^2 \left(1 - \frac{m^2}{\lambda_0} \right)^{-2} \left(-\frac{(a-b)^2}{8} \right)^{k+1} \left(\frac{\lambda_0}{2} + 4 \right)^k, \quad k \geq 0.$$

Литература

1. Гадьльшин Р.Р. Спектр эллиптических краевых задач при сингулярном возмущении граничных условий, Асимптотические свойства решений дифференциальных уравнений, Уфа, БНЦ УрО АН СССР, 1988, С.4-16

2. Ильин А.М. Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М.: Наука. 1989. – 336.

АСИМПТОТИКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ СО СМЕНОЙ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

Шишкина Е.А.¹, Репьевский С.В.², Гадыльшин Р.Р.¹

¹ Башкирский педагогический университет им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия,

² Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Пусть Ω – круг единичного радиуса с центром в начале координат, (r, φ) – полярные координаты, $\gamma^\varepsilon := \{x \in \partial\Omega : a\varepsilon < \varphi < b\varepsilon\}$, $0 < \varepsilon \ll 1$, $a < 0 < b$. Хорошо известно, что краевая задача на собственные значения

$$-\Delta \psi_0 = \lambda_0 \psi_0, \quad x \in \Omega, \quad \psi_0 = 0, \quad x \in \partial\Omega. \quad (1)$$

имеет либо простые, либо двукратные собственные значения. Методом согласования асимптотических разложений [1] доказаны следующие теоремы.

Теорема 1. *Собственное значение λ^ε краевой задачи*

$$-\Delta \psi^\varepsilon = \lambda^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad x \in \Omega, \quad \psi^\varepsilon = 0, \quad x \in \partial\Omega \setminus \gamma^\varepsilon, \quad \frac{\partial \psi^\varepsilon}{\partial r} = 0, \quad x \in \gamma^\varepsilon, \quad (2)$$

сходящееся к простому собственному значению задачи (1), имеет

$$\text{асимптотику} \quad \lambda^\varepsilon = \lambda_0 + \varepsilon^2 \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{i}{2} \rfloor} \varepsilon^i \ln^k \mathcal{E} \lambda_{i+2k}, \quad \text{где } \lambda_{2+2k,k} = \frac{(-\lambda_0)^{k+1} (b-a)^{2(k+1)}}{2^{4k+3}},$$

$k \geq 0$.

Теорема 2. *Собственные значения $\lambda^{\varepsilon,(1)}, \lambda^{\varepsilon,(2)}$ краевой задачи (2), сходящиеся к двукратному собственному значению λ_0 задачи (1), являются простыми и имеют асимптотики*

$$\lambda^{\varepsilon,(1)} = \lambda_0 + \varepsilon^2 \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{i}{2} \rfloor} \varepsilon^i \ln^k \mathcal{E} \lambda_{i+2k}^{(1)}, \quad \lambda^{\varepsilon,(2)} = \lambda_0 + \varepsilon^4 \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{i}{4} \rfloor} \varepsilon^i \ln^k \mathcal{E} \lambda_{i+4k}^{(2)}$$

где

$$\lambda_{2+2k,k}^{(1)} = \frac{(-\lambda_0)^{k+1} (b-a)^{2(k+1)}}{2^{4k+3}}, \quad k \geq 0,$$

$$\lambda_{4+2k,k}^{(2)} = -\frac{m^2 \lambda_0}{4} \left(\frac{(a-b)^2 (5a^2 + 6ab + 5b^2)}{16} \right)^{k+1} \left(\frac{\lambda_0}{8} - \frac{\lambda_0^2}{16} \right)^k, \quad k \geq 0.$$

Литература

1. Ильин А.М. Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М.: Наука. 1989. – 336.

СЕКЦИЯ «МЕХАНИКА»

УДК 532.546

ФИЛЬТРАЦИЯ ЖИДКОСТИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Белова С.В.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,
г. Бирск, Россия

В настоящее время добыча углеводородного сырья перемещается к месторождениям, с аномально низкими коэффициентами проницаемости порядка миллиарды и даже ниже этого значения. В связи с этим извлечение жидких углеводородов из коллекторов с супернизкими значениями коэффициента проницаемости становятся еще более проблематичным.

В данной ситуации большую актуальность приобретают горизонтальные скважины и создание вокруг них систем трещин. При такой технологии жидкость в основной массе в скважины поступает через трещины.

В настоящей работе полагая, что трещиновато-пористая среда представляет собой систему из блоков «столбов» или блоков «булыжников» построена модель фильтрации. Предполагается, что основное макроскопическое течение происходит по щелям между блоками. Для описания процесса течения жидкости из блоков к щелям используется уравнение одномерной фильтрации в рамках радиальной и сферической симметричной схем течения.

На основе такой модели решены простейшие модельные задачи, применительно к проблемам гидродинамических исследований скважин (ГИС).

Литература

1. Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Движение жидкостей и газов в пористых пластах. М.: Недра, 1984.
2. Басниев К.С., Власов А.М., Кочина И.Н., Максимов В.М. Подземная гидравлика. М.: Недра, 1986.

© Белова С. В., 2014 г.

МЕТОД СМЕНЫ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ ФИЛЬТРАЦИИ С ПРЕДЕЛЬНЫМ ГРАДИЕНТОМ

Дударева О.В.

Бирский филиал Башкирского государственного университета, г. Бирск,
Россия

В последнее время, в связи с уменьшением запасов углеводородного сырья все большую актуальность приобретает разработка низкопроницаемых пластов.

Из имеющихся экспериментальных данных [1-2] видно, что при фильтрации нефти через такие пласты законы фильтрации становятся нелинейными. Причем данная нелинейность наблюдается в областях, где величина градиента давления становится ниже некоторого предельного градиента давления q . Фильтрация жидкости будет происходить в тех зонах, где величина градиента давления выше этого предельного градиента давления.

В работе предложена теоретическая модель, с предельным градиентом давления, описывающая наблюдаемые в опытах зависимости скорости фильтрации от градиента давления. Данная модель учитывает темп выхода фильтрации к линейному закону Дарси. На основе данной модели методом последовательной смены стационарных состояний (ПССС) и численно решены задачи для плоскоодномерного и радиального фильтрационного потока. Выявлено, что приближенные решения, полученные методом ПССС в плане описания распределений давления и расхода жидкости, согласуются с численным решением уравнением фильтрации. Это дает основание на возможность использования метода ПССС для построения приближенных решений.

Литература

1. Байков В.А., Колонских А.В., Макатров А.К., Политов М.Е., Телин А.Г. Нелинейная фильтрация в низкопроницаемых коллекторах. Лабораторные фильтрационные исследования керна Приобского месторождения. Вестник ОАО НК «Роснефть». 2013. Выпуск 31. №2. С. 4-7
2. Q. Lei, W. Xiong, J. Yuan, S.Gao, Y. Wu. Behavior of Flow trough Low-Permeability Reservoirs // SPE 113144. 2008. Pp. 1-10.
3. Басниев К.С., Власов А.М., Кочина И.Н., Максимов В.М. Подземная гидравлика. Москва: Недра, 1986.

© Дударева О.В., 2014 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ И ПЛОТНОСТИ КОРРОЗИОННОГО УЧАСТКА ТРУБЫ ПО СОБСТВЕННЫМ ЧАСТОТАМ ПРОДОЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ.

Галеева Дилара Рустэмовна

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящей работе представлен метод определения длины и средней плотности коррозионного участка по собственным частотам продольных колебаний трубы. Решены задачи двух видов: прямая и обратная. Прямая задача заключается в поиске собственных частот продольных колебаний трубы с коррозионным участком. В обратной задаче необходимо определить по двум собственным частотам продольных колебаний, где заканчивается коррозионный участок и его среднюю плотность.

Труба моделировалась в виде неоднородного стержня, состоящего из трех участков с различными физическими свойствами и одинаковой площадью сечения. Один конец стержня жестко закреплен, другой – свободен. Известно, что коррозионный участок начинается с координаты x_c .

В работе выведено характеристическое уравнение для поиска собственных частот, а также длины коррозионного участка и скорости распространения волны на этом участке:

$$E_2 c_1 \sin\left(\frac{\omega_k(L-l-x_c)}{c_1}\right) \cdot \left[E_1 c_2 \sin\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) \cdot \cos\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) + E_2 c_1 \cos\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) \cdot \sin\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) \right] +$$

$$E_1 c_2 \cos\left(\frac{\omega_k(L-l-x_c)}{c_1}\right) \cdot \left[E_1 c_2 \sin\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) \cdot \sin\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) - E_2 c_1 \cos\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) \cdot \cos\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) \right] = 0$$

где c_1 , c_2 – скорости распространения волны, E_1 , E_2 – модули упругости материалов, ω_k – частота продольных колебаний, L – длина трубы, l – длина коррозионного участка.

Зная c_2 , можно определить среднюю плотность коррозионного участка:

$$\tilde{\rho}_2 = \frac{E_2}{c_2^2}.$$

Литература

1. Ахтямов А.М., Галеева Д.Р. Исследование прямой и обратной задачи о колебаниях неоднородного стержня, состоящего из двух различных участков // Контроль. Диагностика. 2014. №4. С.58-63.

ОБОБЩЕНИЕ ТЕОРЕМЫ РАММА

Ахтямов Азамат Мухтарович

Институт механики Уфимского научного центра РАН, г. Уфа, Россия

Кумушбаев Рустем Райманови

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Кумушбаева Элина Эдуардовна

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При решении многих прикладных задач математической физики возникают спектральные задачи с полиномиальным вхождением параметра в краевые условия. Многие из таких задач сводятся к решению обратных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений с параметром в краевых условиях. Обратная задача для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с параметром λ описывалась во многих работах. Постановка такой задачи состоит в определении коэффициентов дифференциального уравнения по собственным заданным значениям и по другим спектральным характеристикам.

В работах [1,2] решалась задача восстановления краевых условий спектральной задачи по ее известным собственным значениям.

В настоящей работе решается задача отыскания целой функции $f(\lambda)$, которая входит в одно из краевых условий спектральной задачи, по ее собственным значениям. Получено также обобщение теоремы Рамма [3].

Полученный результат может быть применен к задаче акустической диагностики об определении параметров закрепления сложной механической системы.

Литература

1. Садовничий В. А., Султанаев Я. Т., Ахтямов А. М. Аналоги теоремы единственности Борга в случае нераспадающихся краевых условий // Доклады Академии наук. 1999. Т. 367, № 6, 739–741.

2. Ахтямов А. М. Об определении краевого условия по конечному набору собственных значений // Дифференц. уравнения. 1999. Т. 35, № 8, 1127–1128.

3. Gladwell G.M.L. Inverse Problems in Vibration. 2nd ed. Dordrecht, Boston, London: Kluwer Academic Publishers, 2004. (Русский перевод: Гладвелл Г.М.Л. Обратные задачи теории колебаний. — М.–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2008. 608 с.)

УДК 621.81

ЗАВИСИМОСТЬ ПЕРВОЙ ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ КРУГОВОЙ ПЛАСТИНЫ ОТ ДЛИНЫ ЗАКРЕПЛЕНИЯ ПО ВНЕШНЕМУ КОНТУРУ

Нусратуллина Лилия Ринатовна,

Ахтямов Азамат Мухтарович

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нусратуллин Эдуард Марсович

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа, Россия

Круговые пластины находят широкое применение в различных областях техники. Целью данной работы является определение зависимости собственной частоты колебаний от длины закрепления по краям круговой пластины.

Для решения данной задачи использовался пакет трехмерного моделирования SolidWorks. Данный пакет предоставляет широкий спектр интегрированных средств инженерного анализа. В основе анализа лежит метод конечных элементов. Модель условно разбивается сеткой из конечного числа простых форм, называемых элементами. Элементы имеют общие точки, называемые узлами. Математический аппарат решает уравнения перемещения каждого элемента с учетом его связи с другими элементами.

В данном пакете была смоделирована пластина. Пластина была разбита на сектора. Было рассмотрено последовательное закрепление внешнего контура секторов. После чего вычислялась частота колебаний, соответствующая данному закреплению.

В работе приведена зависимость первой частоты колебаний круговой пластины от длины закрепления по внешнему контуру.

Литература

[1] Дударева Н. Ю.. SolidWorks2011 на примерах. – СПб.: БХВ-Петербург, 2014. – 496 с.

ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА В ВОДОНАСЫЩЕННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ ПРИ НАГНЕТАНИИ ГАЗА

Рафикова Г.Р.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,
г. Бирск, Россия

Гидратообразование является медленным процессом. Для интенсификации процесса гидратообразования необходимо создавать условия, реализующие высокие удельные площади контакта газа и жидкости. Такие благоприятные условия создаются в пористых средах, где площади контакта принимают огромные значения.

Исследования процессов образования и разложения газовых гидратов в пористых средах проводились такими авторами, как Цыпкин Г.Г., Шагапов В.Ш., Гималтдинов И.К. и др. [1-2]. В работах получены автомоделные и численные решения, позволяющие изучать процессы образования и разложения гидратов в пористых пластах с движущейся фронтальной границей фазовых переходов при равновесных условиях. Однако остается открытым вопрос об основных механизмах, лимитирующих процессы образования и разложения газогидратов.

В данной работе рассматривается процесс образования гидрата в пористом пласте, насыщенном жидкостью, вследствие диффузионного переноса газа через гидратную корку, при нагнетании метана, в одномерном приближении. При описании задачи, математическая модель которой состоит из уравнений сохранения масс, притока тепла, Менделеева-Клапейрона и закона Дарси, принято, что температура и давление удовлетворяют условию стабильности газогидрата.

Получена система дифференциальных уравнений для давления, температуры, гидратонасыщенности в пористой среде, которая позволяет оценить зависимости времени изменения основных параметров от значений коэффициента диффузии и начальной водонасыщенности среды.

Литература

1. Шагапов В.Ш., Нурисламов О.Р. Нагнетание газа во влажную пористую среду с образованием газогидрата. //Прикладная математика и механика. 2009. Т. 73. Вып. 5. С. 809-823.
2. Шагапов В.Ш., Хасанов М.К., Гималтдинов И.К., Столповский М.В. Численное моделирование образования газогидрата в пористом пласте конечной протяженности при продувке его газом. //Прикладная механика и техническая физика. 2011. Т.52. №4. с. 116-126.

ДИАГНОСТИРОВАНИЕ ЖЕСТКОСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ВАГОНА

Рамазанов Денис Мажитович, Сафина Гульнара Фриловна
Нефтекамский филиал БашГУ, г. Нефтекамск, Россия

В работе поставлена и решена обратная задача диагностирования жесткостных параметров модели вагона (рис. 1) по известным частотам его свободных колебаний.

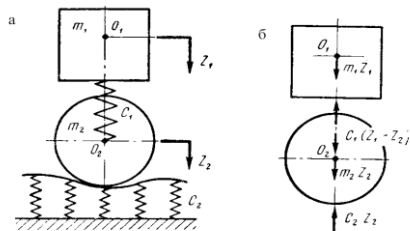


Рисунок 1 – Модель свободных колебаний вагона

Получено частотное уравнение свободных колебаний модели вагона

$$\lambda^4 - \left(\frac{c_1 + c_2}{m_2} + \frac{c_1}{m_1} \right) \lambda^2 + \frac{c_1}{m_1} \left(\frac{c_1 + c_2}{m_2} - \frac{c_1}{m_2} \right) = 0, \quad (1)$$

котором λ – собственная частота колебаний, m_1 и m_2 – массы кузова и колеса, c_1 – жесткость рессоры, c_2 – жесткость рельсового основания.

Если λ_1 и λ_2 – значения двух частот колебаний вагона, то подставляя их в частотное уравнение (2) получим следующую систему уравнений:

$$\begin{cases} \lambda_1^4 m_1 m_2 - (m_1(c_1 + c_2) + m_2 c_1) \lambda_1^2 + c_1 c_2 = 0; \\ \lambda_2^4 m_1 m_2 - (m_1(c_1 + c_2) + m_2 c_1) \lambda_2^2 + c_1 c_2 = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Решая систему (2) найдены аналитические формулы для определения значений жесткости рессоры и жесткости рельсового основания, соответствующие заданным частотам колебаний модели вагона.

Литература

[1] Тимошенко С.П. Колебания в инженерном деле. – М.: Физматгиз, 1959. – 440с.

УДК 517.85

ИДЕНТИФИКАЦИЯ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ МЕТОДОМ ВВЕДЕНИЕ НЕИЗВЕСТНЫХ ВЕЛЕЧИН

Султанова Альфира Альфаридовна

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается задача идентификации массы и момента инерции груза, сосредоточенного на одном из концов стержня, груз упруго закреплен на пружинке с жесткостями, препятствующими вертикальному смещению балки, по пяти собственным частотам свободных колебаний стержня.

Показано, что для однозначной идентификации трех неизвестных – масса, момент инерции груза, жесткость пружины – достаточно использовать пять собственных частот. Для решения задачи предложен метод введение неизвестных величин. С помощью этого метода построено множество корректности задачи и доказана корректность ее по А. Н. Тихонову.

Литература

1. Ахтямов А. М., Ахтямова А. А. Об однозначности идентификации сосредоточенного инерционного элемента на одном из концов стержня // Вестник Башкирского университета. 2013. Т. 18. №1. С. 7-11.

О ПРОЦЕССЕ МИГРАЦИИ МЕТАНОВЫХ ПУЗЫРЬКОВ В УСЛОВИЯХ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ

Русинов А.А.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,
г. Бирск, Россия

Согласно наблюдениям, известно, что в Мировом океане происходят непрерывные выбросы метана, которые составляют порядка несколько сотен тонн [1]. В частности, исследования, проведенные на Сахалинском склоне Охотского моря, показали, что выходы метановых пузырьков со дна моря сопровождаются образованием гидрата на их поверхности [2]. Это связано с тем, что в процессе всплытия пузырьков к поверхности океана, в зависимости от глубины, могут реализоваться термобарические условия для образования или же последующего разложения гидратной оболочки.

В работе предложена теоретическая модель процесса миграции метановых пузырьков в воде при условиях образования гидрата. Горизонтальное дно является равномерно распределенным по плоскости источником газа. Такая схема предполагает, что расстояния между соседними источниками газа значительно меньше линейных размеров всей площади дна, с которого идет поток газа.

Изучена особенность эволюции полей температур, скорости миграции, а также распределения радиуса и объемного содержания систем газогидратных пузырьков. Показано, что при фиксированном массовом расходе газа со дна водоема устанавливается квазистационарная картина в виде волны типа «ступенька» для параметров всплывающей газогидратной дисперсной системы. В зависимости от соотношения между исходной плотностью газа и средней плотностью газа в составе гидрата конечный радиус гидратных частиц может быть больше или наоборот меньше начальных радиусов газовых пузырьков. Установлено, что скорость всплытия газогидратных включений снижается более чем в три раза вследствие увеличения их массы из-за гидратообразования.

Литература

1. *Sautera E.J. et al.* Methane discharge from a deep-sea submarine mud volcano into the upper water column by gas hydrate-coated methane bubbles // *Earth and Planetary Science Letters*. 2006. № 243(3-4). pp. 354-365.
2. *Gumerov N.A., Chahine G.L.* Dynamics of bubbles in conditions of gas hydrate formation // *Fluid Dynamics*. 1992. № 5. pp. 664-669.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА ПРИ ИНЖЕКЦИИ ГАЗА И КАПЕЛЬ
ВОДЫ**

Чиглинцева А.С., Кунсбаева Г.А.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,
г. Бирск, Россия

Гидраты природного газа представляют собой уникальное сырьё не только для получения легких углеводородных источников энергии, но и также являются хранилищем для газа [1, 2]. Поэтому, большой интерес в настоящее время представляет создание различных способов и технологий процесса консервации газа в газогидратное состояние, поскольку оно является выгодным и более безопасным [2, 3].

В работе исследован процесс образования гидрата в реакторе непрерывного действия при инъекции газа и воды, построена соответствующая технологическая схема и теоретическая модель.

Получены конкретные численные величины для параметров, определяющих интенсивность образования гидрата и движение газовой и водной фаз, которые позволят рассчитать производство гидрата при заданной интенсивности загрузки реактора газом и каплями водой. Для функционирования такого реактора необходимо обеспечить во всем его объеме условия образования гидрата. Таким условием является величина температуры воды, контактирующей с гидратом, которая должна быть ниже равновесной температуры образования гидрата для данного значения давления в реакторе.

Для выявления наиболее выгодных режимов эксплуатации реактора и определение его оптимального размера был проведен параметрический анализ по данной теоретической модели.

Литература

1. Макогон Ю.Ф. Гидраты природных газов. М., «Недра», 1974. 280 с.
2. Makogon Y.F. Natural gas hydrates – A promising source of energy // J. of Natural Gas Sci. and Eng. 2010. № 2. P. 49.
3. Thomas D., Charles E., Mark P. Rapid Gas Hydrate Formation Processes: Will They Work? // Energies 2010, 3, pp. 1154-1175.

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 517.95

**КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАВРЕНТЬЕВА – БИЦАДЗЕ
С ИНТЕГРАЛЬНЫМ УСЛОВИЕМ ВТОРОГО РОДА**

Савка Иван^{1,2}, Гой Тарас¹, Власий Олег¹,

¹ Прикарпатский национальный университет имени Василия Стефаника,
г. Ивано-Франковск, Украина

² Институт прикладных проблем механики и математики
им. Я.С. Подстригача НАН Украины, г. Львов, Украина

Рассмотрим в области $Q = (0, T) \times (-1, 1)$, $T > 0$, задачу

$$u_{tt} + \operatorname{sgn} x u_{xx} = 0,$$

$$u(t, -1) = u(t, 1) = 0, \quad u(t, -0) = u(t, +0), \quad u_x(t, -0) = u_x(t, +0), \quad t \in [0, T],$$

$$U_1[u] \equiv -\mu_1 \int_0^T u(t, x) dt + \mu_2 (u(0, x) - \mu_3 u(T, x)) = \varphi(x), \quad x \in [-1, 1],$$

$$U_2[u] \equiv \mu_1 (u(0, x) - u(T, x)) + \mu_2 (u_t(0, x) - \mu_3 u_t(T, x)) = \psi(x), \quad x \in [-1, 1],$$

где $\mu_1, \mu_2, \mu_3 \in \mathbf{R}$, $\varphi, \psi \in H_0$, $u = u(t, x)$ – искомое решение.

Решение задачи ищем в виде ряда

$$u(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \left(u_k^+(t) X_k^+(x) + u_k^-(t) X_k^-(x) \right), \quad (1)$$

где собственные функции $X_k^+(x)$, $X_k^-(x)$, отвечающие собственным значениям $\lambda_k^+ > 0$, $\lambda_k^- < 0$ соответственно, спектральной

задачи $X''(x) + \lambda \operatorname{sgn} x X(x) = 0$, $X(-1) = X(1) = 0$,

$$X(-0) = X(+0), \quad X'(-0) = X'(+0),$$

образуют полную ортогональную систему в пространстве H_0 (см. [1]). Тогда

для каждого $k \in \mathbf{N}$ функции $u_k^+(t)$, $u_k^-(t)$ – решения задач

$$\left(u_k^{\pm}(t) \right)'' - \lambda_k^{\pm} u_k^{\pm}(t) = 0, \quad U_1[u_k^{\pm}] = \varphi_k^{\pm}, \quad U_2[u_k^{\pm}] = \psi_k^{\pm}.$$

С помощью метрического подхода исследовано сходимость ряда (1)

$$\forall t \in [0, T] \text{ по норме пространства } H_s, \quad \|u\|_{H_s}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \left(|\lambda_k^{+s}| |u_k^+(t)|^2 + |\lambda_k^{-s}| |u_k^-(t)|^2 \right).$$

Литература

[1] Егоров И.Е., Пятков С.Г., Попов С.В. Неклассические дифференциально-операторные уравнения. – Новосибирск: Наука, 2000. – 336 с.

УДК 517.956 + 517.984

О РЕЗОЛЬВЕНТЕ МНОГОМЕРНЫХ ОПЕРАТОРОВ С ЧАСТОЙ СМЕНОЙ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ

Шарапов Тимур Фархатович

Башкирский государственный педагогический университет

им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Рассматривается эллиптический оператор второго порядка в произвольной многомерной области с частой сменой краевых условий. Область может быть как ограниченной, так и неограниченной. На границе области выделяется набор подмножеств, на которых задается граничное условие Дирихле, на оставшейся части границы ставится третье краевое условие. Исследуется поведение решений таких краевых задач, когда число частей выделенного подмножества границы неограниченно растет, а мера каждой отдельной части и расстояние между соседними частями стремится к нулю. Возможны также постановки задач, в которых описанная смена краевых условий задается не на всей границе, а лишь на фиксированной ее части, в то время как на остальной части задается третье краевое условие. Рассматривается случай, когда усредненный оператор содержит третье краевое условие. Первый основной результат - равномерная резольвентная сходимости возмущенного оператора к усредненному и оценки скорости сходимости. Второй основной результат - полное асимптотическое разложение для резольвенты в неограниченной области с дополнительным предположением, что чередование граничных условий имеет периодическую структуру и задано на гиперплоскости, а резольвента действует на достаточно гладкие функции.

УДК 550.34

THE WAVE FIELD OF A POINT SOURCE THAT ACTS ON THE PERMEABLE FREE BOUNDARY OF A BIOT HALF-PLANE

G. L. Zavorokhin,

St. Petersburg Department of V. A. Steklov Mathematical Institute, Laboratory
of Mathematical Problems of Geophysics;

St. Petersburg, Russia

The initial boundary value problem of wave propagation in a half-plane filled with a fluid-saturated porous solid is considered. The Biot medium is isotropic, homogeneous, and with open pores on the boundary. Using complex analysis techniques, explicit formulas for the components of displacement vectors in elastic and fluid phases are obtained.

СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

УДК 519.6

ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННЫМ ИНТЕЛЛЕКТОМ

Белослудцев Ильмир Олегович, Гибаева Расиля Анфировна
Нефтекамский филиал Башкирского государственного университета, г.
Нефтекамск, Россия

Искусственный интеллект (ИИ) «мыслит» исключительно за счет программного обеспечения, основанного на математике и численных методах. Применение численных методов ИИ будет довольно разнообразно: например, для ориентирования в пространстве ИИ будет необходимо преобразовать координаты сочленений в декартовы координаты положения и ориентацию схвата в системе координат основания (прямая задача кинематики) и наоборот (обратная задача кинематики). В данной работе рассмотрены примеры решения обратной задачи кинематики с помощью нейронных сетей и недоопределенных моделей, а также показано применение на практике недоопределенных моделей для вычислений местоположения робота по маякам. Метод недоопределенных моделей основан на построении обобщенной вычислительной модели, каждому объекту которой сопоставлены универсум и его начальное значение, функция присваивания и функция проверки корректности. Этот метод достаточно пригоден для применения его на практике, но для решения обратной задачи кинематики не слишком полезен, в частности из-за получения слишком грубых диапазонов решений в некоторых ситуациях. Поэтому на практике лучше применять метод решения с помощью нейронных сетей. Принцип действия нейронных сетей состоит в следующем: в построении математических моделей по принципу организации и функционирования биологических нейронных сетей – сетей нервных клеток живого организма. Решение же задачи заключается в нахождении обратной матрицы Якоби, в рассматриваемом случае – это производная выходов нейронной сети по ее входам и значения ее элементов могут быть вычислены тем же способом, как это делается при методе обратного распространения ошибки. Таким образом, рассмотрев методы применения численных методов можно сказать, что для ИИ они будут важным звеном его существования. И манипулируя различными численными методами, он сможет решать любые задачи, поставленные им самим.

ГЛОБАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ РОЯ ЧАСТИЦ НА GPU

Григорьев И.В., Мустафина С.А.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Проблема поиска глобального минимума функций многих переменных, возникающая в самых различных задачах, достаточно актуальна. С увеличением точности решения поиска экстремума требование к производительности вычислительной машины может возрастать чуть ли не экспоненциально. Поэтому необходимо использовать нестандартные подходы к написанию программ, основанные на использовании технологии параллельного программирования.

В данной работе разработан алгоритм, основанный на методе оптимизации роя частиц [1]. В методе оптимизации роя частиц агентами являются частицы в пространстве параметров задачи оптимизации. Каждая частица имеет определенное местоположение и скорость, которая меняется на каждой итерации в пространстве поиска и характеризует определенное решение. Движение частицы определяется по следующей формуле:

$$\vec{v} \leftarrow \omega \cdot \vec{v} + C_1 \cdot \text{rnd}() \cdot (\vec{p}_{best} - \vec{x}) + C_2 \cdot \text{rnd}() \cdot (\vec{g}_{best} - \vec{x}),$$

где ω – коэффициент инерции; C_1, C_2 – постоянные ускорения; \vec{p}_{best} – лучшая найденная частицей точка; \vec{g}_{best} – лучшая точка из пройденных всеми частицами; \vec{x} – текущее положение частицы; $\text{rnd}()$ – случайное число от 0 до 1 включительно. Подобно птицам, перемещающимся в окружающей среде в поисках пищи или при уклонении от хищников, частицы пролетают через пространство поиска, изыскивая высококачественные решения. На основе разработанного алгоритма реализована программа. Для тестирования метода и проведения экспериментов использовалась функция Сферы и функция Растригина.

В работе было выполнено сравнительное исследование скорости сходимости параллельного и последовательного алгоритмов метода роя частиц для исследуемых функций. Проведенные исследования эффективности распараллеливания показали, что использование кластерных систем позволяет значительно снизить временные затраты (до 12 раз).

Литература

1. J Kennedy, R Eberhart Particle swarm optimization. // Proceedings of IEEE International conference on Neural Networks. — 1995, pp 1942—1948.

© Григорьев И.В., Мустафина С.А., 2014 г.

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»

УДК 519.876.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОЦЕНКИ РИСКА БАНКРОТСТВА ПРЕДПРИЯТИЯ

Амирова Г.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Существует достаточно большое количество различных моделей оценки риска банкротства. Рассмотрим основные из них:

Модель Альтмана имеет вид [1]:

$$Z = 0,717K_1 + 0,847K_2 + 3,107K_3 + 0,42K_4 + 0,995K_5 \quad (1)$$

где K_1 – доля чистого оборотного капитала в активах; K_2 – рентабельность активов, исчисленная по нераспределенной прибыли; K_3 – рентабельность активов, исчисленная по балансовой прибыли; K_4 – коэффициент покрытия по рыночной стоимости собственного капитала; K_5 – отдача всех активов.

Если $z < 1,23$ предприятие признается банкротом, при значении z в диапазоне от 1,23 до 2,89 ситуация неопределенна, значение z более 2,9 присуще стабильным и финансово устойчивым компаниям [2].

Модель Давыдовой-Беликова имеет вид:

$$Z = 8,38K_1 + 1,0K_2 + 0,0054K_3 + 0,63K_4, \quad (2)$$

где K_1 – оборотный капитал/сумма активов; K_2 – чистая прибыль/собственный капитал; K_3 – объем продаж/сумма активов; K_4 – чистая прибыль. При: $z < 0$ – вероятность банкротства максимальная $0 < z < 0,18$, – вероятность банкротства высокая $0,18 < z < 0,32$ – вероятность банкротства средняя $0,32 < z < 0,42$ – вероятность банкротства низкая $z > 0,42$ – вероятность банкротства незначительна (до 0.1). *Модель Таффлера* имеет вид:

$$Z = 0,53X_1 + 0,13X_2 + 0,18X_3 + 0,16X_4, \quad (3)$$

где X_1 – прибыль от реализации/краткосрочные обязательства; X_2 – оборотные активы /сумма обязательств; X_3 – краткосрочные обязательства /сумма активов; X_4 – выручка от реализации/сумма активов. При $z > 0,3$ вероятность банкротства низкая, а при $z < 0,2$ высокая.

Литература

1. Давыдова Г.В., Беликов А.Ю. Методика количественной оценки риска банкротства предприятий // Управление риском, 2011 г., №3, с. 13-20.

АКТУАРНЫЕ РАСЧЕТЫ В СТРАХОВАНИИ ЖИЗНИ И ЗДОРОВЬЯ

Арсланова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Страхование жизни медленно, но верно становится частью нашей жизни. Все большее число россиян понимают, что это действенная и эффективная защита себя и членов своей семьи от неожиданностей, на которые так щедра наша жизнь. А ведь страхование жизни - не только способ материальной поддержки самого себя на случай непредвиденных событий, а еще и прекрасный способ приумножить собственные доходы.

Страхование жизни - это вид личного страхования, в соответствии с которым страховщик за плату в виде страховой премии обязуется при наступлении страхового случая, наступление которого произойдет обязательно и который не обусловлен причинением вреда имущественным интересам страхователя (застрахованного лица), предоставить страхователю (застрахованному лицу) дополнительный доход в виде оговоренной страховой суммы.

Как в любой хозяйственной деятельности, в страховании страховщик нуждается в определении размера расходов, необходимых на страхование того или иного объекта. Расходы, необходимые для страхования определяются в процессе актуарных расчетов.

Основными задачами актуарных расчетов являются:

1. Исследование и группировка рисков в рамках страховой совокупности.
2. Определение вероятности наступления страхового случая, определение частоты и степени тяжести последствий причинения ущерба в отдельных рискованных группах и в целом по страховой совокупности.
3. Математическое обоснование необходимых расходов на ведение дел страховщиком и прогнозирование тенденций их развития.
4. Математическое обоснование необходимых резервных фондов страховщика, предложение конкретных методов и источников формирования этих фондов.

Решение этих задач позволяет определить тарифные ставки и размер участия каждого страхователя в создании страхового фонда.

В практике актуарных расчетов широко используется страховая статистика, которая представляет собой систематизированное изучение и обобщение наиболее массовых и типичных страховых операций, стоимостных показателей, характеризующих страховое дело.

При этом – чем больше число объектов наблюдения, тем точнее оценка вероятности наступления того или иного случая.

Вероятностью события A – $P(A)$ – называется отношение числа благоприятных для него случаев M к общему числу всех равновозможных случаев N :

$$P(A) = \frac{M}{N} \quad (1)$$

Например, возьмем 100 застрахованных объектов. Статистика показывает, что ежегодно 3 из них подвергаются страховому случаю. Вероятность того, что с любым из этих 100 объектов произойдет реализация риска, равна 0,03 или 3 %.

Литература

1. Гвозденко А.А. Основы страхования. М.: Финансы и статистика, 2007;
2. Корчевской Л.И, Турбиной К.Е. Основы страховой деятельности, 2007;
3. Сплетунов Ю.А., Дюжиков Е.Ф. Страхование: Учеб. Пособие. - М.:ИНФРА-М, 2007 - (Высшее образование);
4. Рябикин В.И. Актуарные расчеты М: Финстатинформ, 1996.

© Арсланова Р.Р., 2014 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧЕ КОЛЕБАНИЙ БАЛКИ С УЧЕТОМ ПРОДОЛЬНОЙ СИЛЫ

Файзуллин Алмаз Ренатович, Сафина Гульнара Фриловна
Нефтекамский филиал БашГУ, г. Нефтекамск, Россия

Уравнение свободных колебаний балки под действием постоянной продольной силы имеет вид [1]:

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + \frac{N}{m} \cdot \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + \frac{EJ}{m} \cdot \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} = 0. \quad (1)$$

Здесь: $y = y(x)$ – прогиб балки, m и EJ – масса и жесткость балки, N – продольная сила.

Стандартными преобразованиями уравнение приведено к виду:

$$X^{IV} + \alpha^2 X'' - k^4 X = 0, \quad \text{где} \quad \alpha_1 = \sqrt{\frac{N}{m}}, \quad (2)$$

$$k^4 = \frac{EJ}{m}$$

К уравнению (2) рассмотрены краевые условия

$$\begin{cases} U_1 = X(0) = 0; & U_2 = X''(0) = 0; \\ U_3 = X(l) = 0; & U_4 = X''(l) = 0, \end{cases} \quad (3)$$

означающие свободные опоры обоих концов балки (при $x = 0$ и l – длина балки).

Решение уравнения (2) имеет вид:

$$X = C_1 s_1 \operatorname{sh} s_1 x + C_2 c_1 \operatorname{ch} s_1 x + C_3 \sin s_2 x + C_4 \operatorname{coss}_2 x, \quad (4)$$

в котором s_1 и s_2 содержат частоту колебаний балки. Подставляя решение (4) в краевые условия (3) получим систему уравнений, решив которую относительно ненулевых значений C_1, C_2, C_3, C_4 , найдем частотное уравнение колебаний балки с учетом продольной силы:

$$(s_1^2 + s_2^2) s_1 s_2 l \sin s_2 l = 0.$$

По решению прямой задачи показано, что увеличение массовых характеристик балки ведет к уменьшению частот колебаний ее колебаний, а увеличение жесткостных характеристик – к увеличению частот колебаний. Поставлена и решена обратная задача диагностирования характеристик балки по известным частотам ее свободных колебаний.

Литература

[1] Тимошенко С.П. Колебания в инженерном деле. – М.: Физматгиз, 1959. – 440с.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ОРЕГОНАТОРА КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ БЕЛОУСОВА-ЖАБОТИНСКОГО

Икрамов Рустам Джамолович, Мустафина Светлана Анатольевна
Стерлитамакский филиал Башкирского Государственного Университета, г.
Стерлитамак, Россия

Среди многочисленных колебательных химических и биохимических реакций наиболее известным является класс реакций, впервые открытых российским ученым Б.П. Белоусовым (1958) и А.М. Жаботинским.

В 1972 г. Филд, Кереш, Нойес представили абстрактную и простую модель, которая сохраняла наиболее важные черты реакции Белоусова-Жаботинского. Их упрощенная модель, называемая Орегонатор[1], выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{dX}{dt} &= k_1AY - k_2XY + k_3BX - 2k_4X^2 \\ \frac{dY}{dt} &= -k_1AY - k_2XY + fk_5Z \\ \frac{dZ}{dt} &= k_3BX - k_5Z.\end{aligned}$$

Здесь A и B – исходные реагенты, а X , Y , Z – промежуточные соединения: $HBrO_2$, Br^- и $Ce(IV)$.

Для численного исследования моделей был выбран неявный метод Розенброка третьего порядка точности: Результаты интегрирования системы представлены на рис. 1:

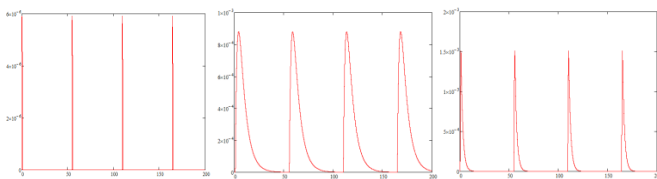


Рис. 1. Колебания значений концентраций реагентов X , Y , Z

Литература

[1] Жаботинский А.М., Отмер Х., Филд Р. и др. Колебания и бегущие волны в химических системах : Пер. с англ. / Под ред. Р. Филда, М. Бургер. – М.: Мир, 1988. 720 с.

**АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ
В ЗАДАЧЕ АНАЛИЗА СВЯЗНОСТИ СКВАЖИН**

Хашпер Б.Л., Надеждин О.В., Ефимов Д.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При разработке нефтяных месторождений для увеличения добычи нефти необходимо поддерживать пластовое давление закачкой воды в продуктивный пласт. Воздействие на пласт осуществляется через систему нагнетательных скважин. Однако при применении таких систем вода в пласте распределяется неравномерно, что может снизить эффективность заводнения. Актуальной задачей является анализ связности скважин, заключающийся в определении воздействия нагнетательных скважин на добывающие по известным дебитам скважин. Математически данная задача сводится к задаче идентификации – построения математической модели системы и восстановления ее параметров по данным наблюдений за ее поведением [1]. Для решения поставленной задачи предлагается использовать метод обобщенного настраиваемого объекта измерения (ОНОИ), заключающийся в том, что входные и выходные сигналы пропускают через фильтры и получают обобщенную модель объекта, в которой неизвестные параметры линейно входят в обобщенную ошибку [2,3]. Оптимум полученного функционала обобщенной ошибки лежит в окрестности оптимума функционала явной ошибки, но не всегда совпадает с ним. Поэтому проводится bootstrap-анализ, позволяющий получить для системы множество моделей, из которых выбирается модель, обеспечивающая лучшее качество идентификации. Предложенный метод реализован в среде программирования Matlab и протестирован на примере многомерной динамической системы. Также проведен сравнительный анализ метода ОНОИ с методами идентификации Pet и N4sid, показавший эффективность предложенного метода.

Литература

1. Льюнг Л. Идентификация систем. Теория для пользователя. – М.: Наука, 1991. – 432 с.
2. Надеждин О.В., Заминова А.Р. Анализ связности динамики нагнетательных и добывающих скважин // Управление большими системами.–М.: ИПУ РАН, 2009. – №25.– С. 35-47.
3. Катков М.С., Азаров М.М. Система параметрической идентификации математической модели движения самолета // Конгресс-2000 "Фундаментальные проблемы естествознания и техники", Сб.трудов.–СПб., 2001.–№23. – С.511-518.

ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОМОБИЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ НА УЧАСТКЕ АВТОДОРОГИ

Лысенко Д.В.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

В работе предложена имитационная модель, позволяющая изучать движение автотранспортных средств на прямых участках многополосных автодорог согласно правилам дорожного движения. Каждая полоса автодороги разбивается на условные ячейки фиксированных размеров, которые могут быть заняты сегментом дорожного полотна и автомобилями. При этом рядом с ячейками, содержащими полотно автодороги, могут присутствовать ячейки, содержащие дорожные знаки. Рассматриваемая модель представляет собой мультиагентную систему, в которой каждый автомобиль является сущностью, обладающей основными свойствами агента: активностью, реактивностью, автономностью, социальными чертами, целенаправленностью. Основными элементами моделируемой системы являются автомобили, поэтому под их взаимодействием понимается некоторое событие [1]. Построенная в работе система для моделирования дорожных ситуаций на прямолинейных многополосных участках автомобильных дорог может служить хорошим инструментом для прогнозирования развития ситуаций, связанных с образованием и развитием автомобильных пробок. Результаты моделирования показали, что даже если автомобилей на автодороге в избытке, то они способны передвигаться с приемлемыми скоростями.

Литература

1. Дмитриев В.Л., Ахмадеева Р.З. Некоторые подходы к моделированию динамики транспортных потоков // Сборник статей II Международной заочной научно-технической конференции «Информационные технологии. Радиоэлектроника. Телекоммуникации (ITRT-2012)» Ч.1. Тольятти: Изд-во Поволжского гос. ун-та сервиса, 2012. – С. 135-141.

© Лысенко Д.В., 2014 г.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО В МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА СВОБодно-РАДИКАЛЬНОЙ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ БУТАДИЕНА СО СТИРОЛОМ

Т.А. Михайлова, С.А. Мустафина

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, г. Стерлитамак, Россия

В настоящее время среди синтетических каучуков, которые производятся на отечественных предприятиях, бутадиен-стирольные каучуки являются наиболее распространенными. Но их производство представляет собой сложный процесс, изучение которого упрощается при построении математической модели. Для исследования структуры сополимера большой интерес представляет статистический подход, основанный на методе Монте-Карло. Данный подход [1] был использован при моделировании процесса сополимеризации бутадиена со стиролом в реакторе до конверсии 75% с рецептурой: реакционная смесь – 3 т, бутадиен – 70 мас.ч., стирол – 30 мас.ч., инициатор – 0.048 мас.ч., регулятор – 0.028 мас.ч., объем полимеризатора – 10.8 м³. Полученные значения характеристической вязкости сополимера показали удовлетворительное согласование с результатами кинетической модели процесса (рис. 1) [2].

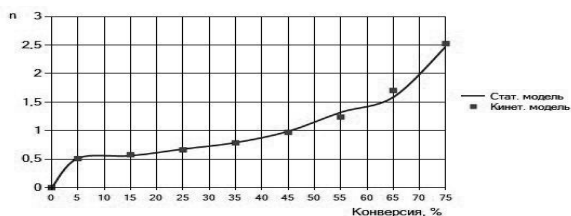


Рис. 1. Зависимость значений характеристической вязкости от конверсии

Литература

1. Михайлова Т.А., Мустафина С.А. Статистический подход к моделированию процесса сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии // Журнал СВМО, 2014, Т. 16, №2, 80-84 с.
2. Мифтахов Э.Н., Насыров И.Ш., Мустафина С.А. Решение прямой и обратной кинетических задач для процесса эмульсионной сополимеризации бутадиена со стиролом // Вестник Башкирского университета, 2011, №1, 21-24 с.

© Михайлова Т. А., Мустафина С. А., 2014 г.

РАСПОЗНАВАНИЕ ОБРАЗА СТВОЛА ПЕРА НА ЦИФРОВОМ ИЗОБРАЖЕНИИ

Мицуков Д.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Математическое моделирование объектов окружающей среды порой очень полезно для получения каких-либо статистических данных. Особенно интересно рассмотреть использование математического аппарата в естественных науках. Взяв за основу такую науку, как орнитология открываются большие возможности по изучению птиц.

Целью работы является изучение перьев птиц, получение пропорций перьев, заключение определённых закономерностей в их размерах, взяв за основу получение информации с цифровых изображений. Работа включает в себе переплетение математического моделирования и распознавания образов с цифрового изображения. Идея заключается в написании программы, которая позволяет получить координаты основных элементов строения пера: нужно найти координаты ствола пера на изображении и выдать результат в виде последовательности (массива) точек, описывающих траекторию ствола.

Отдельного метода распознавания образа в каждом прикладном случае не существует, и способ решения поставленной задачи определяется лишь фантазией.

С чего начать распознавание? Таким вопросом задаётся любой человек, решающий подобные задачи. Как правило, распознавание образа начинается с понимания отличительных черт, которыми наделен искомый образ. Эти отличительные черты должны присутствовать на каждом изображении. Именно они будут отправной точкой в нахождении желаемого результата. Отличительные черты имеют реальный характер и создают естественные ограничения. Например, перья птиц существенно отличаются друг от друга, и ствол пера имеет свойство изгибаться, однако в определённых пределах.

В работе рассматриваются возможные пределы изогнутости ствола пера, рассматриваемые в интерпретации кривизны кривой.

Поиск ствола пера весьма трудоёмкий процесс ввиду нетривиальности входных изображений. Существует много методов распознавания образов. Известная библиотека OpenCV не рассматривалась как основной инструмент распознавания по причине неоднородности входных данных, т.к. для этого пришлось бы создавать определённые условия для самой библиотеки. Поэтому для поиска ствола пера используются только индивидуально созданные методы.

Суть метода заключается в нахождении отправных точек на изображении и использование интерполяционного многочлена Лагранжа — многочлен минимальной степени, принимающий данные значения в данном

наборе точек. Многочлен строит искомую кривую, которая описывает ствол пера. В работе указаны небольшие корректировки, вводятся свои отдельные определения, например, потенциальные точки и другое.

Задача распознавание образа ствола пера несёт нетривиальный характер. Описанный алгоритм не всегда выдаёт желаемый результат ввиду существенных различий исходных данных. В целом алгоритм довольно простой.

Положительной стороной алгоритма является то, что не требуется находить всего контура пера, а нужно всего лишь определённое (заданное) количество точек, лежащих на контуре. Т.е. мы можем не тратить время на трудоёмкий поиск всех точек контура(их в разы больше). Это даёт дополнительное время на то, чтобы точнее определить граничные точки при том, что программа и с учётом этого будет работать быстрее, чем, если бы мы определяли весь контур пера.

Другой положительной стороной является то, что шанс получить неверный результат ниже, чем у программы, анализирующей всю внутреннюю область пера, которая так же была написана, но, увы, не показала желаемых результатов ввиду частых ложных решений.

Литература

1. Энциклопедия Кольера Collier's Encyclopedia 1997, 24. — New York City: Holiday House, 1997. — 1664 с.
2. Аптерилии Энциклопедический словарь Брокгауза и Ефрона: В 86 томах (82 т. и 4 доп.). — СПб., 1890—1907.
3. В.Д. Ильичев, Н.Н. Карташев, И.А. Шилов Общая орнитология. — Москва: Высшая школа, 1982. — 464 с.
4. Эволюционное происхождение перьев (Ричард Прам, Алан Баш, «Динозавры или птицы: кто оперился первым?» «В мире науки» № 7 за 2003г)

© Мицуков Д.С., 2014 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОМОБИЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ С ПЕШЕХОДНЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Могильникова А.П.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Неотъемлемой частью автомобильных дорог выступают пешеходные переходы. Поэтому при моделировании автомобильного движения необходимо организовать взаимодействие между пешеходным переходом и другими участниками движения. В качестве основной характеристики пешеходного перехода в работе принята интенсивность появления пешеходов. Предполагается, что интенсивность может быть любой, а в качестве распределений могут выступать распределения: равномерное, нормальное, показательное, Пуассона, Стюдента. Во время движения каждый автомобиль просчитывает расстояние до возможного пешеходного перехода и строит свое поведение в зависимости от наличия пешехода на пешеходном переходе. Так, на регулируемом пешеходном переходе водитель транспортного средства и пешеходы руководствуются только сигналами светофора. На нерегулируемом пешеходном переходе пешеход старается как можно быстрее совершить маневр, практически не обращая внимания на автомобили. Стоит отметить, что моделирование нерегулируемого пешеходного перехода является несколько более сложной задачей. В случае появления пешехода на переходе, автомобиль в случае необходимости начинает снижать скорость с некоторым комфортным для себя замедлением, если, конечно, это позволяет расстояние до пешехода; если же расстояние слишком мало, водитель предпринимает экстренное торможение с максимально возможным замедлением.

Движение автомобилей вдали от пешеходного перехода описывается в основном так же, как это принято в работе [1].

Литература

1. Евдокимова Н.Л., Дмитриев В.Л. Имитационное моделирование движения автомобилей на участке автострады // Сборник статей III Международной заочной научно-технической конференции «Информационные технологии. Радиоэлектроника. Телекоммуникации (ITRT-2013)». Тольятти: Изд-во Поволжского гос. ун-та сервиса, 2013. – С. 136-140.

© Могильникова А.П., 2014 г.

СИНГУЛЯРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ОПЕРАТОРА НОРМАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РАДОНА, ДЕЙСТВУЮЩЕГО НА ТРЕХМЕРНОЕ СИММЕТРИЧНОЕ 2-ТЕНЗОРНОЕ ПОЛЕ

Полякова Анна Петровна

Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия

В данной работе рассматривается задача восстановления потенциальной части трехмерного симметричного 2-тензорного поля, заданного в единичном шаре, по его известному нормальному преобразованию Радона. Нормальное преобразование Радона симметричного 2-тензорного поля $\mathbf{w} = (w_{ij})$ определяется формулой

$$[\mathcal{R}^\perp \mathbf{w}](\xi, s) = \iint_{P_{\xi, s}} (w_{ij} \xi^i \xi^j) du dv,$$

здесь $P_{\xi, s}$ - плоскость, перпендикулярная направлению \mathbf{o} и отстоящая на расстоянии $|s|$ от начала координат, \mathbf{u}, \mathbf{v} – координаты локальной системы координат, заданной на плоскости $P_{\xi, s}$, по повторяющимся индексам ведется суммирование от 1 до 3. Поскольку соленоидальная часть симметричного 2-тензорного поля лежит в ядре оператора нормального преобразования Радона, мы можем восстановить лишь его потенциальную часть.

Построено сингулярное разложение оператора нормального преобразования Радона, получена формула обращения и аппроксимации для обратного оператора. В исходном пространстве ортонормированные базисы строятся с помощью полиномов Якоби и сферических гармоник. Используя [1] удалось показать, что соответствующие ортонормированные базисы в пространстве образов строятся на основе полиномов Гегенбауэра и сферических гармоник.

Полученное сингулярное разложение может послужить основой для численного решения задачи по восстановлению потенциальной части трехмерного симметричного 2-тензорного поля по его известному нормальному преобразованию Радона.

Работа проводилась при поддержке РФФИ (проект 14-01-31491 мол_а).

Литература

[1] Louis A.K. Orthogonal function series expansions and the null space of the Radon Transform. – Society for industrial and applied mathematics. – Vol.15, № 3 (1984), p. 621-633.

КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ

Ротков Дмитрий Сергеевич, Гибаява Расиля Анфировна
Нефтекамский филиал Башкирский государственный университет,
г. Нефтекамск, Россия

Конечный автомат – это частный случай абстрактного автомата, позволяющий описывать пути изменения состояния объекта в зависимости от его текущего состояния и входных данных, при условии, что общее возможное количество состояний конечно. Конечные автоматы широко используются на практике, например в синтаксических, лексических анализаторах, и тестировании программного обеспечения на основе моделей. На практике наибольшее распространение получили автоматы Мили и Мура. Автомат Мили – это конечный автомат первого рода, выходная последовательность которого зависит от состояния и выходных сигналов. Для каждого автомата первого рода существует эквивалентный ему абстрактный автомат второго рода. Автомат Мура – это абстрактный автомат второго рода, выходное значение сигнала в котором зависит лишь от текущего состояния данного автомата и не зависит напрямую от выходных сигналов. При выполнении различных задач возникает потребность построения автомата Мили по заданному автомату Муру и наоборот. Так как этот процесс вручную занимает много времени, возникла идея создания программы.

Создание такой программы требует знания, как программирования, так и алгоритма построения автоматов.

В программе реализованы два действия: построения автомата Мили по заданному автомату Муру, и наоборот. Автоматы задаются при помощи таблицы переходов. В такой таблице каждой строке соответствует одно состояние, а столбцу – один допустимый входной символ. В ячейке на пересечении строки и столбца записывается действие, которое должен выполнить автомат, если в ситуации, когда он находился в данном состоянии, на входе он получил данный символ. В качестве среды разработки выступила среда программирования Borland Delphi 7.0.

Результатом программы является построенный конечный автомат по заданному автомату, описанный при помощи таблицы переходов.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ОЦЕНКЕ ФИНАНСОВОЙ УСТОЙЧИВОСТИ БАНКА

Сафина Илина Ильдаровна
МГИМО (У) МИД России, г. Москва, Россия

Рассмотрена математическая модель формирования остатков денежных средств на счетах клиентов банка:

$$Y_{k,t} = \beta_{k,1} + \beta_{k,2} \cdot t + \beta_{k,3} \cdot t^2 + Z_{k,t}, \quad (1)$$

где $Y_{k,t}$ – величина остатка по k -му счёту на t -й день, $k = 1, 2, \dots, K$ число клиентов, $\beta_{k,1}, \beta_{k,2}, \beta_{k,3}$ – неизвестные параметры, $Z_{k,t}$ – случайная составляющая, имеющая нулевое математическое ожидание и постоянную дисперсию.

Суммарная величина остатков по всем счетам на $(n+m)$ -й день определяется выражением:

$$S_{n+m} = \sum_{k=1}^K Y_{k,n+m} = Y_{1,n+m} + Y_{2,n+m} + Y_{3,n+m} + \dots + Y_{K,n+m}, \quad (2)$$

Поскольку количество счетов K в банке достаточно велико, то на основании центральной предельной теоремы можем утверждать, что сумма S_{n+m} имеет нормальное распределение, среднее значение и дисперсия которой определяются по формулам:

$$E(S_{n+m}) = \sum_{k=1}^K E(Y_{k,n+m}), \quad (3)$$

$$D(S_{n+m}) = \sum_{k=1}^K D(Y_{k,n+m}) + 2 \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{q=k+1}^K \rho_{k,q} \sqrt{D(Y_{k,n+m}) \cdot D(Y_{q,n+m})}, \quad (4)$$

С помощью модели (1) можно проведена оценка величины R_{n+m} свободных ресурсов банка на $(n+m)$ -й день.

Рассчитана величина свободных ресурсов банка на будущее. Проведены оценки математического ожидания и дисперсии суммарной величины вкладов, а также величина свободных ресурсов банка на заданный период времени.

Предложенный в работе подход к нахождению необходимого остатка денежных средств дает количественные представления о самых общих закономерностях, присущих управлению ликвидностью.

ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛБУТЕНОВ В ИЗОПРЕН С УЧЕТОМ ПАРАМЕТРА ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА

Д.В. Шаймухаметова, С.А. Мустафина

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, г.
Стерлитамак, Россия

Процесс дегидрирования углеводородов проходит в присутствии оксидных железокалиевых катализаторов. В ходе эксплуатации после нескольких тысяч часов железокалиевый катализатор постепенно теряет свою активность, начинает частично разрушаться, повышая перепад давления в слое. Для реакций, протекающих по линейным механизмам, скорость реакции, сопровождающуюся дезактивацией, можно представить системой уравнений [1]:

$$r = r^0 \cdot a(t), \quad \frac{da}{dt} = \frac{r^0}{w_j} w_p a + w_R (1-a),$$

где w_j – вес выбранной стадии, a – относительная активность, w_p – вес стадии дезактивации, w_R – вес стадии саморегенерации, r^0 – скорость реакции на свежем катализаторе.

Построенная кинетическая модель процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен с учетом дезактивации катализатора, полученная на основании четырехстадийной схемы превращений [2,3] будет иметь следующий вид:

$$r^1 = \frac{k_{+1}C_1 - k_{-1}C_2C_4}{(1 + b_{11}C_1 + b_{12}C_2 + b_{13}C_3)^2} a, \quad r^2 = \frac{k_{+2}C_2 - k_{-2}C_3C_4}{(1 + b_{21}C_2 + b_{22}C_3 + b_{23}C_4)^2} a,$$

$$r^3 = \frac{k_3C_3}{1 + b_3C_4} a, \quad r^4 = \frac{k_4}{1 + b_4C_4} a,$$

$$-\frac{da}{dt} = \frac{k_3C_3}{1 + b_3C_4} a - k_4(1-a)$$

Литература

1. Ostrovskij N.M. Kinetika dezaktivacii katalizatorov. Matematicheskie modeli i ih primenenie. – Moskva: Nauka, 2001. – 334s.
2. Jablonskij G.S., Bykov V.I., Gorban' A.N. Kineticheskie modeli kataliticheskikh reakcij. – Novosibirsk: Nauka, 1983.
3. Careva Z.M., Orlova E.I. Teoreticheskie osnovy himicheskoj tehnologii. – K.: Vishha shk. Golovnoe izd-vo, 1986. – 271 s.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ПОТОКОВ В МИЛЛИОННОМ ГОРОДЕ

А.Ф. Шайхнурова¹, Г.Р. Карамутдинова¹, И.М. Губайдуллин^{1,2}
Башкирский государственный университет¹, Институт нефтехимии и
катализа, г. Уфа, Россия

Транспортные потоки городов являются одним из важных факторов, которые влияют на социально-экономическое развитие страны. Совершенствование транспортной сети повышает качество жизни горожан, увеличивает рост занятости, укрепляет бюджет города, развивает бизнес и привлекает инвестиции. Для определения потоков и загрузки элементов сети пользуются математическими моделями. Основной проблемой в большинстве данных моделей является необходимость информации о передвигающихся по городу индивидуумах. Это информация представляется в виде матрицы корреспонденций.

Матрица корреспонденций является важнейшей информацией, характеризующей распределение транспортных потоков по улично-дорожной сети. Элементы матрицы определяют объем потока между каждой парой «точек»³.

Целью работы является моделирование транспортных потоков с использованием матрицы корреспонденций для транспортной сети миллионного города.

Для достижения поставленной цели выдвигаются следующие задачи:

1. Составление наиболее точного расписания движения общественного транспорта.
2. Определение загрузки элементов улично-дорожной сети.
3. Увеличение средней скорости транспортного потока через регион.

Литература

1. Алиев А.С., Стрельников А.И., Швецов В.И., Шершевский Ю.З. Моделирование транспортных потоков в крупном городе с применением к Московской агломерации // Автоматика и Телемеханика. – 2005. – №11. – С. 113 - 125.
2. Васильева Е.В., Игудин Р.В., Лившиц В.Н. Оптимизация планирования и управления транспортными системами. – М: Транспорт, 1987.

³ Точки - это условные зоны, которые получают путем деления города на сегменты.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ БЕРЕГОВОЙ ЛИНИИ

Соснина У.Ю.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Вопросы изучения морских берегов имеют большое экологическое и геолого-инженерное значение. Побережья являются особой природной средой, формирование которых происходит при тесном контакте твердой и жидкой оболочек Земли, атмосферы и биосферы. Без знания тенденций и механизмов развития берегов не обойтись при строительстве портов, рыболовных баз, организации курортных зон, установке маяков, разведке и добыче полезных ископаемых. Любая береговая линия формируется длительное время под воздействием множества факторов, учесть которые в математической модели не представляется возможным. Поэтому принятая в работе модель основывается на использовании статистики – структура острова и факторы, влияющие на формирование береговой линии, определяются некоторым набором случайных величин. Так, например, в качестве случайных входных воздействий и воздействий окружающей среды используются прочность (случайным образом задается для всех точек островного участка до запуска процесса формирования береговой линии) и величина разрушения (на которую происходит уменьшение прочности каждой прибрежной точки на каждом шаге итерации).

Таким образом, значение прочности точки, лежащей на границе острова, будет определяться простейшей итерацией: $p_{i+1} = p_i - Dp_{i+1}$

где p_i – предыдущее значение прочности, Dp_{i+1} – величина разрушения.

Итерации прочности точки являются ограниченными, они будут продолжаться до ее полного разрушения, то есть превращения в участок, имитирующий воду. Моделирование процесса формирования береговой линии выполнено в разработанной компьютерной программе в среде программирования Delphi [1,2]. Программа позволяет проследить динамику изменения береговой линии и прогнозировать эволюцию реальных островных территорий.

Литература

1. Бобровский С.И. Delphi 7. Учебный курс. – СПб.: Питер, 2004. – 562 с.
 2. Фленов М.Е. Библия Delphi 7. – СПб.: БХВ-Петербург, 2014. – 688 с.
- © Соснина У.Ю., 2014 г.

СРАВНЕНИЕ ДВУХ АЛГОРИТМОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУМЕРНОЙ 2-ТЕНЗОРНОЙ ТОМОГРАФИИ

Светов Иван Евгеньевич

Институт математики им. С.Л.Соболева СО РАН, г. Новосибирск, Россия
Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия

Задача 2-тензорной томографии. Пусть некоторое симметричное 2-тензорное поле $u = u_{ij} = (u_{11}, u_{12}, u_{22})$ задано в единичном круге, заполненном средой с прямолинейным характером распространения лучей. По известным значениям продольного, и (или) смешанного, и (или) поперечного лучевых преобразований требуется восстановить 2-тензорное поле u .

Любое симметричное 2-тензорное поле может быть представлено в виде $u = d^2\phi + dd^\perp\phi + (d^\perp)^2\chi$. Известно, что по продольному лучевому преобразованию можно восстановить лишь соленоидальную часть $(d^\perp)^2\chi$, в то время как, по смешанному и поперечному лучевым преобразованиям можно восстановить лишь потенциальные части $dd^\perp\phi$ и $d^2\phi$, соответственно.

В данном докладе для построения аппроксимации соленоидальной и (или) потенциальной части искомого симметричного 2-тензорного поля использовались два алгоритма: 1) алгоритм, основанный на методе наименьших квадратов, а в качестве аппроксимирующей последовательности выступают соленоидальные и потенциальные симметричные 2-тензорные поля, построенные на основе двумерных В-сплайнов [1]; 2) алгоритм, основанный на методе сингулярного разложения операторов лучевых преобразований симметричных 2-тензорных полей [2].

Работа проводилась при поддержке РФФИ (проект 14-01-31491-мол_а).

Литература

[1] Светов И.Е., Полякова А.П. Восстановление 2-тензорных полей, заданных в единичном круге, по их лучевым преобразованиям на основе МНК с использованием В-сплайнов. // Сибирский Журнал Вычислительной математики. - 2010. - Т. 13, №2. - С. 183-199.

[2] Деревцов Е.Ю., Полякова А.П. Решение задачи интегральной геометрии 2-тензорных полей методом сингулярного разложения. // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: математика, механика, информатика. - 2012. - Т.12, No. 3. - С. 73-94.

УДК 519.217.2

МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ САХАРНЫМ ДИАБЕТОМ

Валитов Д.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Многие операции, которые приходилось анализировать под углом зрения выбора оптимального решения, развиваются как случайные процессы, ход и исход которых зависит от ряда случайных факторов, сопровождающих эти операции. Для того чтобы вычислить числовые параметры, характеризующие эффективность таких операций, нужно построить некоторую вероятностную модель явления, учитывающую сопровождающие его случайные факторы. В марковском случайном процессе будущее развитие его зависит только от настоящего состояния и не зависит от «предыстории» процесса. При математическом моделировании на основе марковских процессов возникают две взаимно противоположные задачи. Прямая, задача состоит в расчете вероятностей соответствующих состояний и другие характеристики процесса. Параметры модели при этом предполагаются известными. Обратная задача состоит в определении параметров модели на основе известных из эксперимента результирующих характеристик процессов. При рассмотрении процесса заболевания сахарным диабетом имеем размеченный граф с 4 состояниями – 1)здоров 2)болен, инсулинонезависим 3) болен, инсулинзависим 4) мертв.

В марковской модели исходные параметры - это интенсивности, или силы, перехода из состояния в состояние.

Поставленные в работе задачи решены с использованием теории марковских процессов, теории графов, метода Рунге-Кутта для решения системы дифференциальных уравнений.

При анализе использовались реальных данных по заболеваемости сахарным диабетом, предоставленные Медицинским информационно – аналитическим центром (МИАЦ) при Министерстве Здравоохранения Республики Башкортостан.

Литература

1. Кошкин Г.М. Основы актуарной математики. – Томск: Томский Государственный университет, 2002. – 116 с.
2. Свешников А.А. Прикладные методы теории марковских процессов. Уч.пособие. – М.: Лань, 2007. – 192
3. В.Н. Костин, Н.А. Тишина. Статистические методы и модели. - Оренбург: ГОУ ОГУ, 2004. -138 с.

ВЫЧИСЛЕНИЕ МАКСИМАЛЬНОЙ ТОЧКИ ПОВОРОТА С ПОМОЩЬЮ ВАРИАЦИОННОГО ПОДХОДА

Иванов А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается новая парадигма нахождения бифуркаций решений нелинейных задач, которая основана на обнаружении экстремальных значений вариационных функционалов нового типа, связанных с рассматриваемыми задачами. Вариационные функционалы получают конструктивно методом продолженного функционала, который может быть применен к широкому классу параметрических задач, включая нелинейные дифференциальные уравнения с частными производными. Главной особенностью данного подхода является то, что он позволяет рассматривать задачу нахождения бифуркаций с новой геометрической точки зрения, а именно с помощью метода продолженного функционала. С помощью этого подхода доказаны необходимые и достаточные условия, которые обеспечивают существование бифуркаций типа максимальной точки поворота. На их основе вводится алгоритм квазинаправления наискорейшего подъема. Для иллюстрации поведения метода и обсуждения его преимуществ и недостатков по сравнению с альтернативными методами проведены численные эксперименты.

Литература

1. Иванов А.А., Ильясов Я.Ш., Нахождение бифуркаций для решений нелинейных уравнений методами квадратичного программирования // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2013. Т. 53, №3, с. 350–364.

© Иванов А.А., 2014 г.

СЕКЦИЯ «ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ»

УДК 517.925.4

СИММЕТРИИ СКАЛЯРНОГО ОДУ ВТОРОГО ПОРЯДКА И ДВУМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ГЕОДЕЗИЧЕСКИХ

Багдерина Ю.Ю.

Институт математики с вычислительным центром УНЦ РАН, Уфа, Россия

Геодезические двумерной поверхности с римановой метрикой

$$ds^2 = g_{11}(x,y)dx^2 + 2g_{12}(x,y)dxdy + g_{22}(x,y)dy^2$$

описываются уравнениями

$$\frac{d^2x^i}{ds^2} + \Gamma_{jk}^i \frac{dx^j}{ds} \frac{dx^k}{ds} = 0, \quad i = 1, 2, \quad (x^1, x^2) = (x, y) \quad (1)$$

Любой системе (1) может быть поставлено в соответствие скалярное ОДУ второго порядка

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \Gamma_{22}^1 \left(\frac{dy}{dx}\right)^3 + (2\Gamma_{12}^1 - \Gamma_{22}^2) \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + (\Gamma_{11}^1 - 2\Gamma_{12}^2) \frac{dy}{dx} - \Gamma_{11}^2 \quad (2)$$

относительно $y(x)$. Обратное неверно, т.е. не всякое уравнение

$$\frac{d^2y}{dx^2} = S(x, y) \left(\frac{dy}{dx}\right)^3 + 3R(x, y) \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 + 3Q(x, y) \frac{dy}{dx} + P(x, y) \quad (3)$$

представимо в виде (2), где Γ_{jk}^i – символы Кристоффеля некоторой невырожденной метрики. Например, уравнения Пенлеве, за исключением специальных случаев, такого представления не имеют. В данной работе получено необходимое условие представимости уравнения (3) в форме (2). Сопоставляются свойства симметрии уравнения (2) и системы (1). Показано, что уравнения (3), не имеющие представления (2), могут иметь симметрии.

ЭВАРИСТ ГАЛУА И ГРУППА ПОДСТАНОВОК

Макаримова Э.М.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа,
Россия

До Галуа почти триста лет никому не удавалось решить общее уравнение пятой степени или выше. Он первым нашёл те критерии, которые позволяли определить, существует ли решение данного уравнения в радикалах. Изложим результаты Галуа в современных терминах теории групп [1].

Каждое уравнение степени n можно связать с группой подстановок $S(n)$ или какой-либо её подгруппой. Такая группа отражает свойства симметрии уравнения и называется группой Галуа. Уравнение разрешимо в радикалах, только если его группа Галуа разрешима, то есть порождает последовательность вложенных нормальных подгрупп, для которых индексы (отношение порядка основной группы к порядку её подгруппы) будут являться простыми числами. Индексы, порожденные группой $S(3)$ и двумя максимальными нормальными подгруппами, есть простые числа 2 и 3. Значит, и все уравнения третьей степени разрешимы. Можно доказать, что максимальная нормальная подгруппа группы $A(n)$ есть единичная группа (I) , состоящая только из нейтрального элемента. Поскольку $A(n)$ — максимальная нормальная подгруппа группы $S(n)$, не все индексы при $n \geq 5$ являются простыми числами. В частности, при $n=5$ индексы равны 2 и 60 [2]. Так что соответствующие уравнения неразрешимы в радикалах.

Вдохновленный идеями Галуа, норвежец Мариус Софус Ли вскоре обратился к решениям дифференциальных уравнений. Его исследования положили начало групповому анализу. Нахождение группы преобразований является способом проверки интегрируемости и получения семейства решений уравнения. Группу Галуа также можно трактовать как группу преобразований.[3]

Литература

1. Александров П.С. Введение в теорию групп. – М.:Наука, 1980. – 145 с.
2. Ротман, Тони. Короткая жизнь Эвариста Галуа // В мире науки., 1983, № 1, с. 84–93.
3. Ибрагимов Н.Х. Алгебра группового анализа. – М.:Знание, 1989. – 48 с.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСНОЗНАЧНЫМИ МОДЕЛЯМИ**

Бекмурзина Г.Р., Смирнова Е.А.

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н., Беляева М.Б.

СФ Башкирского государственного университета, г. Серлитамак, Россия

Модели комплекснозначной экономики позволяют описать процессы, моделирование которых с помощью действительных переменных затруднено. [1] Важным преимуществом комплекснозначной является то, что моделируется зависимость сразу двух экономических показателей от других переменных. Наибольшую популярность описания таких зависимостей получили производственные функции, моделирующие зависимость производственного результата от производственных ресурсов при целом ряде исходных допущений. Для того чтобы произвести экономический анализ промышленности России, была построена степенная производственная функция комплексных переменных с действительными коэффициентами. Построенная модель имеет вид $G + iC = 1.993(K + iL)^{5.069}$, где G – месячная прибыль, C – затраты, K – стоимость ОПФ, L – средняя месячная заработная плата. Оценки составляющих коэффициентов найдены с помощью МНК по основе статистики за 2007-2013гг. Также были найдены переломные точки данной модели, и рассчитан уровень эффективности производственного процесса России. Расчёт коэффициентов показал, что эффективность работы предприятий с каждым годом увеличивается, производство промышленности близко к оптимальному. При данной технологии производства предприятия могли бы получать большую прибыль и нести меньшие затраты. Полученная модель может быть использована руководителями предприятий для многовариантных расчётов с целью оптимизации производства. Таким образом, модель степенной производственной функции комплексных переменных показывает практическую применимость её на макроуровне.

Литература

1. Светульников И.С. Степенные производственные функции комплексных переменных//Экономика и математические методы. –2012г. – Т. 48. - №1. – С. 67-79.

МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ПОРТФЕЛЯ ЦЕННЫХ БУМАГ

Буцык О.А.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Развитие рыночной экономики и закрепление частной собственности в различных ее формах привело к тому, что наряду с денежными средствами широкое распространение в качестве средства платежа и инвестирования получили ценные бумаги. Необходимо учитывать, что вложения в ценные бумаги всегда сопряжены с определенным риском [1]. Рассмотрим несколько моделей формирования оптимального портфеля ценных бумаг.

Модель эффективного портфеля Г. Марковица (1952 г.)

Суть метода состоит в том, что инвестор в настоящий момент времени имеет конкретную сумму денег для инвестирования. В конце периода владения инвестор продает ценные бумаги, которые были куплены в начале периода, после чего либо использует полученный доход на потребление, либо реинвестирует доход в различные ценные бумаги) [1].

Модель Дж. Тобина (1950-1960 гг.)

Дж. Тобин преобразовал модель Г. Марковица за счет введения в портфель безрискового актива и возможности заимствования. Инвестор имеет возможность привлекать дополнительные заемные средства для увеличения своих вложений в портфель, составленный из рискованных, имеющих более высокую доходность, активов.

Модель оценки капитальных активов (У. Шарп (США) 1964 г., Дж. Линтер (США) 1965г.)

Модель оценки капитальных активов (capital asset pricing model, CAPM) была разработана с целью нахождения ответа на вопрос о том, какими должны были бы быть премии за риск, на которые согласны инвесторы в ситуации рыночного равновесия. [3].

Модель теории арбитражного ценообразования (С. Росс)

Главным предположением теории является то, что каждый инвестор стремится использовать возможность увеличения доходности своего портфеля без увеличения риска. Механизмом, способствующим реализации данной возможности, является арбитражный портфель.

Литература

1. Батяева Т.А., Столяров И.И. Рынок ценных бумаг: Учеб. пособие. – М.: ИНФРА-М, 2007. – 304 с.
2. Шарп У., Александер Г., Бэйли Дж. — ИНВЕСТИЦИИ: Пер. с англ. — М.: ИНФРА-М, 2001. – 45 с.

ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНЫХ ФОНДОВ

Хамитов Ильдар Шамилович

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Измерение запасов и динамики основных фондов представляет собой серьезную проблему. В странах с переходной экономикой эти проблемы усугубляются изменением соотношением цен на инвестиционные товары и загрузки основных фондов, изменением спроса и конъюнктуры и другими трансформационными процессами [1]. Кроме того стоит отметить, что в России существует еще проблема перехода ведения статистики с номенклатуры ОКОНХ (Общесоюзного классификатора отраслей народного хозяйства) в 2005 г. к системе ОКВЭД (Общероссийского классификатора видов экономической деятельности). В результате была потеряна преемственность данных, что добавляет проблем в межотраслевой оценке основных фондов [2]. Изношенность основных фондов требует концентрация внимания государственных органов управления на проблемах воспроизводства основных фондов и на разработке комплекса мер [3]. Для решения данных задач, в которых необходим учет основных фондов можно выделить четыре подхода: 1. Определение восстановительной стоимости основных фондов по результатам переоценок. Данный способ реализован в официальной статистике. 2. Оценка основных фондов на данных о загрузке мощностей промышленных предприятий 3. Определение динамики основных фондов через валовые инвестиции. 4. Подход основан на предположении о постоянстве срока службы основных фондов [1].

Последний подход позволяет учитывать искажения от переоценок и выявить динамику эффективных основных фондов. Реализовать данный подход можно на основе производственной функции Кобба-Дугласа, где в свою очередь основные фонды определяются как функция дожития.

Литература

- [1] Воскобойников И.Б. О корректировке динамики основных фондов// Экономический журнал ВШЭ. 2004. Т. 8. № 1.– С.3-20.
- [2] Ким И.А. Построение систем таблиц «Затраты – Выпуск» России для 1995–2003 гг. в «смешанной» номенклатуре ОКОНХ–ОКВЭД // Экономический журнал ВШЭ. 2011. Т. 15. № 3.– С.336–352
- [3] Ахунов Р.Р., Юсупов К.Н., Янгиров А.В. О проблемах воспроизводства основных фондов в Республике Башкортостан// Экономика и управление: научно-практический журнал. 2013. № 6.– С.32-36.

АНАЛИЗ ВРЕМЕННЫХ СВЯЗЕЙ И КОРРЕЛЯЦИЙ БИРЖЕВЫХ ИНДЕКСОВ МЕЖДУНАРОДНЫХ КОМПАНИЙ

Мухамадиева Алина Ильгизаровна

Стерлитамакский филиал Башкирского Государственного Университета,
г.Стерлитамак, Россия

Функционирование и успешное развитие рынка ценных бумаг невозможно без наличия информации о биржевых процессах. В странах с развитой экономикой придается первостепенное значение анализу биржевой конъюнктуры, тенденций и деловой активности фондового рынка. Необходима постоянная оперативная информация о рыночной ситуации, о состоянии и изменении курсов акций и т.д. Эти экономические процессы разворачиваются во времени и их можно представить системой количественных и качественных показателей, зависящих от времени. В этой связи, при прогнозировании экономических явлений особое внимание уделяется изучению временных рядов. Пусть имеются биржевые индексы компаний «Лукойл», «Nikkei», «American Express Company», «DAX», «FTSE», «CAC-40» и «ТОPIX» за последние 12 месяцев, согласно данным сайта moex.com. Проведем анализ данных индексов и построим регрессионную модель. Обозначим за y биржевые индексы компании «Лукойл», x_1 – компании «Nikkei», x_2 – «American Express Company», x_3 – «DAX», x_4 – «FTSE», x_5 – «CAC-40», x_6 – «ТОPIX». Используя инструмент анализа данных Excel «Регрессия» найдем уравнение регрессии и коэффициент корреляции. Получим уравнение регрессии:

$$\hat{y} = -8547,06 + 78,7833x_1 + 10,3523x_2 + 4,23162x_3 - 26,9319x_4 - 1515,4x_5 + 459,203x_6$$

Коэффициент корреляции равен $r_{xy} = 0,885542$, что свидетельствует о тесной связи между компаниями «Лукойл», «Nikkei», «American Express Company», «DAX», «FTSE», «CAC-40» и «ТОPIX». Коэффициент детерминации $R_{xy}^2 = 0,78396$ говорит о хорошей взаимосвязи между результативным признаком и исследуемыми факторами, то есть уравнением регрессии объясняется 78,39% дисперсии результативного признака, а на долю прочих факторов около 22% ее дисперсии, и значит, модель регрессии хорошо аппроксимирует исходные данные.

Литература

1. Федосеев В.В и др. Экономико-математические методы и прикладные модели: Учеб.пособие для вузов/Под ред.В.В.Федосеева.- М.:ЮНИТИ, 1999.- 391 с.

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА
FUZZY LOGIC TOOLBOX MATLAB**

Малышева К.А., Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н., Беляева М.Б
СФ Башкирского государственного университета, г.Стерлитамак, Россия

В последнее время одной из наиболее активных и перспективных направлений прикладных исследований в области управления и принятия решений является нечеткое моделирование. Нечеткая логика более естественно описывает характер человеческого мышления и ход его рассуждений. Именно поэтому изучение и использование математических средств, представляющих нечеткую исходную информацию, позволяет строить модели, наиболее адекватно отражающие неопределенность окружающей нас реальности. [1]. В качестве иллюстрации практического применения Fuzzy Logic системы MATLAB была рассмотрена задача оценки финансовой состоятельности клиентов банка при выдаче долгосрочных кредитов на строительство зданий под залог. При этом в качестве нечеткой модели использована схема нечеткого вывода с входными и выходными переменными. Используя метод экспертных оценок, для оценки финансовой состоятельности клиентов были выбраны следующие характеристики: месторасположение строящегося здания, качество предполагаемого выполнения отделочных работ, оценка активов потенциального клиента, оценка дохода потенциального клиента за вычетом фиксированных расходов, величина подлежащих уплате процентов по кредиту. При этом финансовая состоятельность клиента оценивается его кредитоспособностью. Все рассматриваемые переменные измеряются в баллах в интервале действительных чисел от 0 до 10. В качестве схемы нечеткого вывода использован метод Мамдани.

После выполнения анализа построенной системы нечеткого вывода и разработки нечеткой модели, были введены данные экспертных оценок для входных переменных и получено значение выходной переменной.

Таким образом, разработка нечетких моделей позволяет адекватно оценивать и решать задачи в условиях неопределенности реального мира и мышления человека, дает возможность получения приемлемого решения.

Литература

1. Леоленков А.В. Нечеткое моделирование в среде MATLAB и fuzzyTECH. – СПб., 2003. – С.736.
2. Fuzzy Logic Toolbox. User's Guide, The MathWorks, Inc., 2014.

© Малышева К.А., 2014 г.

КОЛЕБАНИЕ РЫНОЧНЫХ ЦЕН

Суфьянова И. М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа,
Россия

В настоящей работе описывается дифференциальное уравнение, которое применимо не только к колебаниям пружинного маятника, но и к любой другой системе. Оно может быть интерпретировано и как уравнение колебаний отклонения рыночной цены товара от его естественной цены. Более точно эта интерпретация выглядит следующим образом:

$$\frac{d^2s}{dt^2} = -r \frac{ds}{dt} - bs$$

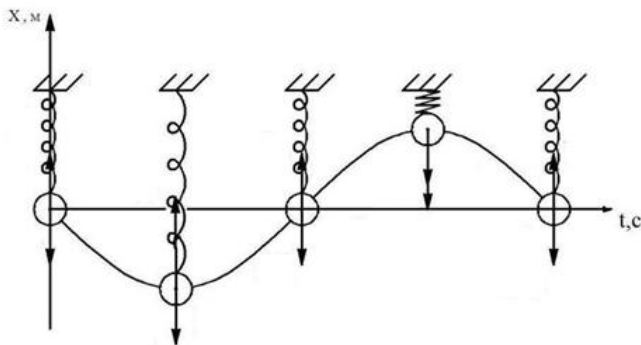


Рис. 1. График колебания рыночной цены в интерпретации с пружинным маятником

Литература

1. Ахтямов А.М. Математика для социологов и экономистов. М.: Физматлит, 2006. с. 382 – 384.

Суфьянова И. М., 2014 г.

О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИКИ КУРСОВ ВАЛЮТ

Тимофеева К.А.

Башкирский государственный университет, г. Стерлитамак, Россия

Данная работа посвящена моделированию динамики курсов доллара и евро по отношению к рублю. Тесные экономические и культурные связи, существующие между Россией, Америкой и Европой, дают основание предположить, что «укрепление» курса европейской валюты и резкое падение курса доллара могут иметь достаточно ощутимые последствия для нашей страны. Целью работы является проведение анализа временных рядов, составленных по данным о курсах доллара и евро по отношению к рублю за рассматриваемый период. По этим данным требуется построить модели, адекватно описывающие динамику рядов, рассчитать точечные и интервальные прогнозы на несколько рабочих дней, оценить точность построенных моделей, сравнивая прогнозные и фактические значения. Для анализа используют модель АРПСС (p, d, q) (авторегрессии проинтегрированного скользящего среднего) [2]. Она включает как параметры авторегрессии, так и параметры скользящего среднего. Имеется три типа параметров модели: параметр авторегрессии (p), порядок разности (d), параметр скользящего среднего (q):

$$X_t = \alpha_0 + \alpha_1 X_{t-1} + \dots + \alpha_p X_{t-p} + \varepsilon_t - \beta_1 \varepsilon_{t-1} - \dots - \beta_q \varepsilon_{t-q}, \quad (1)$$

где $X_t = \nabla^d Y_t$, $\nabla^d Y_t = (1 - B)^d Y_t$ – разностный оператор со сдвигом назад ∇ , B – оператор сдвига назад, определяемый как $BY_t = Y_{t-1}$, соответственно $BY_t = Y_{t-m}$ – случайный импульс или «белый шум», α_p и β_q – коэффициенты модели. Также используют модель АР(p) – модель авторегрессии порядка p [1]. Моделью АР(p) называют случайный процесс X_t , определяемый соотношением:

$$X_t = \alpha_0 + \alpha_1 X_{t-1} + \dots + \alpha_p X_{t-p} + \varepsilon_t, \quad (2)$$

где α_p – коэффициенты модели, ε_t – процесс «белого шума».

Литература

1. Бокс, Дж. Анализ временных рядов: Прогноз и управление / Дж. Бокс, Г. Дженкинс. – М.: Мир, 1974. – 406 с.
2. Елисеева, И.И. Эконометрика / И.И. Елисеева. – М.: Финансы и статистика, 2007. – 576 с.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ»

ТРЕБОВАНИЯ К ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЕ УПРАВЛЕНИЯ САЙТОМ ДЛЯ ONLINE ОБРАЗОВАНИЯ МАТЕМАТИКЕ СТУДЕНТОВ, ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ОБЩЕ ПРИМЕНЯЕМЫХ МЕТОДОВ ПРЕПОДАВАНИЯ

Асадуллина Динара Ильмировна,
Башкирский государственный университет, факультет Математики и
Информационных технологий

Мир меняется - все больше людей имеют доступ к Интернет ресурсам. В большинстве случаев интернет контент используется для развлечения. Но целью данной работой является разработка требований к системе управления сайтом (Интернет-порталом), который используется для online обучения студентов.

Исследования существующего интернет контента выявило существование огромного количества online курсов, которые используют уже снятые видео уроки, ученик часто не имеет возможности задать вопросы, возникают проблемы с контрольными- сильно распространено списывание...

Но Web программирование не стоит на месте, на сегодняшний день можно устраивать даже online трансляции пар или организовывать конференции где ученик может сам лично задавать вопросы.

Единственным популярным вопросом остается как же организовать экзамены, практические уроки, чтобы преподаватель мог сам отследить усвоен ли материал.

Всем нам известны многочисленные социальные сети в которых “живет” молодёжь. А теперь представьте сайт где вы как преподаватель можете пройти в свой профиль просмотреть учеников online провести лекцию в режиме конференции, разослать методички, проверить задания и написать к ним комментарии. Но как же обеспечить возможность отслеживания, не списывает ли ученик на контрольной? Сейчас есть открытый которые транслируют экран пользователя. Так же существуют веб камеры, которые могут транслировать ученика..

Решение, которое предлагает данная работа, стало бы колоссальным шагом в IT технологиях и большинство нуждающихся студентов (инвалидов или студентов по обмену) получили бы возможность учиться на равных с остальными студентами.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ДИСТАНЦИОННОГО ОБРАЗОВАНИЯ В РАБОТЕ СО СТУДЕНТАМИ-ОЧНИКАМИ

Атнагулов Арсен Ильгизович, Павленко Виктор Александрович
Башкирский государственный аграрный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время все большее распространение получают различные технологии, немалое количество которых упрощает многие процессы. А потому неудивительно, что некоторые из них все активнее начинают использоваться и в образовании, постепенно переходя от дублирования обычных методов и статуса альтернативных вариантов ко все более серьезной роли. В частности, если обычно большую часть информации студенты заочной формы обучения получали на занятиях в предельно сжатые сроки или вынуждены были искать самостоятельно, теперь стала появляться возможность изменить данный подход. Для этого используются, например, системы дистанционного образования. С одной из них столкнулись и преподаватели Башкирского ГАУ, которые начали применить систему Moodle, позволяющую размещать множество различных материалов по отдельным предметам для каждой специальности, имеющейся в вузе, а также поддерживать связь со студентами, в том числе и достаточно интерактивно. Разумеется, данная система предназначена, в первую очередь, для студентов заочной формы обучения, так как студенты-очники более-менее регулярно находятся в вузе, имея возможность пользоваться библиотекой, узнавать необходимую информацию от однокурсников и преподавателей. Но, разумеется, при наличии таких технологий обучения было бы странно не попытаться применить их для упрощения некоторых процессов в обучении студентов-очников. В частности, преподавателями кафедры математики была опробована возможность проводить тестирования в системе Moodle при помощи создаваемых там тестовых заданий. Были созданы: база вопросов, учетные записи для студентов очной формы обучения- и вместо множества бумаг с решениями и ответами, которые надо проверять вручную, получена возможность оценивать знания моментально и на компьютере. В ряде случаев опробованный вариант показал себя достаточно жизнеспособным.

Литература

- [1] Анисимов А.М. Работа в системе дистанционного обучения Moodle. Учебное пособие. 2-е изд. испр. и дополн.– Харьков, ХНАГХ, 2009. - 292 стр.
- [2] Мясникова Т.С., Мясников С.А. Система дистанционного обучения MOODLE.- Харьков, 2008.-232 с.

УДК 004

АВТОМАТИЗАЦИЯ РАБОТЫ ПСИХОЛОГА СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ

Иванова Елена Ринатовна, Картак Вадим Михайлович
Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумлы,
г. Уфа, Россия

В докладе рассматривается проблема автоматизации работы школьного психолога для учета данных об учениках и их психологических способностей, которые помогут психологу в своей работе, а также направить ученика в правильное русло в учебе.

Автоматизация работы данной специальности актуальна, потому что в век компьютерных технологий и систем всю бумажную работу заменяют компьютерные базы данных в виде информационных систем и автоматизированных рабочих мест. [1]

В работе школьного психолога используется очень большая бумажная картотека:

- данные об учениках (личные карточки);
- результаты пройденных методик;
- тесты, методики и иные формы тестирования учеников.

Также обработка этих бумаг занимает немалое количество времени.[2]

Для решения этих проблем нами предлагается разработать «Автоматизированное рабочее место школьного психолога», которое позволит:

- затрачивать меньше времени на обработку всех данных;
- вести базу учеников со всеми необходимыми данными о них;
- загружать все данные о пройденных методик в АРМ;
- выводить необходимые отчеты.

Опытная эксплуатация «Автоматизированного рабочего места» проходит в МБОУ СОШ № 45 с углубленным изучением отдельных предметов г.Уфы.

Литература

1. Орлов С.А., Цилькер Б.Я. Технологии разработки программного обеспечения. – СПб.: Питер, 2012
2. Истратова О.Н., Эксакусто Т.В., Справочник психолога средней школы Феникс, 2010 г., 512 стр.

ИЗУЧЕНИЕ ТЕМЫ СИСТЕМЫ СЧИСЛЕНИЯ

Рамазанова Рузана Разифовна, Жилко Елена Павловна,
Титова Людмила Николаевна
Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Данная тема изучается в школьном и вузовском курсе математики и информатики. Существует множество методик изучения этой темы, например А.П. Ершова, Л.Л. Босовой [2], Н.В. Макаровой [1], Н.Д. Угриновича и другие.

Мы придерживаемся подхода, когда теоретические положения темы, такие как историческая справка, виды систем счисления готовятся обучающимся в виде устных докладов. Как показывает опыт, материал по этим темам имеется обширный, особенно если учесть наличие медиаматериалов в сети Интернет.

Практическая часть рассматривается на примерах реализации правил перевода чисел из десятичной, в десятичную системы счисления, между двоичной, восьмеричной и шестнадцатеричной системами счисления и выполнения арифметических операций с числами представленными в разных системах счисления. При этом хочется отметить что задания подбираются дифференцированно: самые простые для освоения темы; средней сложности – соответствующие минимальному уровню знаний и задания повышенной сложности, направленные на развитие умственных способностей (например, считать в уме в разных системах счисления). Для закрепления навыков работы с числами представленными в разных системах счисления предлагается выполнение повариантной домашней работы. Контроль домашней работы осуществляется с помощью взаимопроверки. Обучающиеся обмениваются тетрадами, садятся за компьютеры и знакомятся с работой стандартного приложения Калькулятор в режиме Инженерный (Программист). При этом они проверяют правильность выполнения заданий своих одногруппников.

Завершающий этап проверки остается за преподавателем. При этом может быть оценены и домашняя работа и проверочная деятельность обучающихся.

Литература

- [1] Макарова Н.В., Волков В.Б. Информатика. СПб.: 2013. –576 с.
- [2] Босова Л.Л. Преподавание информатики в 5-9 классах. 2010

МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ САХАРНЫМ ДИАБЕТОМ

Валитов Д.И., Райманова Г.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Многие операции, которые приходилось анализировать под углом зрения выбора оптимального решения, развиваются как случайные процессы, ход и исход которых зависит от ряда случайных факторов, сопровождающих эти операции. Для того чтобы вычислить числовые параметры, характеризующие эффективность таких операций, нужно построить некоторую вероятностную модель явления, учитывающую сопровождающие его случайные факторы. В марковском случайном процессе будущее развитие его зависит только от настоящего состояния и не зависит от «предыстории» процесса. При математическом моделировании на основе марковских процессов возникают две взаимно противоположные задачи. Прямая, задача состоит в расчете вероятностей соответствующих состояний и другие характеристики процесса. Параметры модели при этом предполагаются известными. Обратная задача состоит в определении параметров модели на основе известных из эксперимента результирующих характеристик процессов. При рассмотрении процесса заболевания сахарным диабетом имеем размеченный граф с 4 состояниями – 1)здоров 2)болен, инсулинонезависим 3) болен, инсулинзависим 4) мертв.

В марковской модели исходные параметры - это интенсивности, или силы, перехода из состояния в состояние. Поставленные в работе задачи решены с использованием теории марковских процессов, теории графов, метода Рунге-Кутта для решения системы дифференциальных уравнений.

Литература

1. Кошкин Г.М. Основы актуарной математики. – Томск: Томский Государственный университет, 2002. – 116 с.
2. Свешников А.А. Прикладные методы теории марковских процессов. Уч.пособие. – М.: Лань, 2007. – 192
3. В.Н. Костин, Н.А. Тишина. Статистические методы и модели. - Оренбург: ГОУ ОГУ, 2004. -138 с.

АКТУАЛЬНОСТЬ РАЗЪЯСНЕНИЯ УЧАЩИМСЯ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИКИ

Субботина В. В., Овчаров Е. П.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Огромное значение имеет разъяснение ученикам и студентам, что математика является лишь очень ограниченным инструментом, который позволяет исследовать весьма малую часть реальности ввиду того, что существует намного больше ситуаций, в которых математика не может быть эффективна (успешно приближена к действительности для оптимального решения задачи, ведь идеальные математические формы в мире не встречаются и любая модель есть приближение), нежели эффективна. Также нужно заметить, что математика тем более не годится для исследования всего мира и его закономерностей, потому что мозг человека не воспринимает всей полноты окружающей действительности, и нет доказательств, что оставшаяся часть реальности обладает логикой как общим свойством видимой мозгом весьма небольшой части реальности; и математике не под силу исследование в этом русле, если она не обладает средствами, необходимыми для этого. Не станем отрицать, что математика владеет набором средств, основанных на абстракции. Но абстрагирование – уход от полной совокупности свойств и параметров окружающей нас действительности – приводит к утере всеобъемливости в данном случае исследования взятой за цель системы объектов. Так же важно отметить субъективно-человеческий характер всей математики, поскольку она есть не более, чем инструмент человека для решения некоторого небольшого количества прикладных задач: применение математики изменчиво в зависимости от масштаба задачи, человек *выбирает* задачу, которую «может осилить» при помощи математики, существует «подгонка» условий и параметров под человеческие характеристики (например, на «человеческое» понимание времени) и прочее.

Литература

1. Храмов Ю. А. Вигнер Юджин Поль // Физики: Биографический справочник / Под ред. А. И. Ахиезера. — Изд. 2-е, испр. и дополн. — М.: Наука, 1983
2. Вигнер Юджин. Необъяснимая эффективность математики в естественных науках
3. <http://www.ega-math.narod.ru/Reid/Wigner.htm>.

КАЛЬКУЛЯТОР СЛОЖНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Расулов А.З., Луценко В. И., Тухватшин В.С., Вакулин И. В.
 Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Тотальный органический синтез предполагает получение практически ценных соединений на основе доступных реагентов. Обычно цель может быть достигнута путем реализации нескольких конкурентных схем, выбор между которыми обычно осуществляется на уровне экспертной оценки. Однако это вносит элемент субъективизма и затрудняет количественную оценку схем синтеза. Нами предлагается метод количественной оценки сложности химических превращений, который может быть использован при выборе оптимальных схем синтеза органических соединений.

Одной из основных проблем количественной оценки сложности химических превращений является оценка сложности отдельных соединений. Нами за основу взят метод, предложенный Берцом [1]. Для расчета коэффициента сложности химических превращений нами предложена следующая формула.

$$E = STR * Y * OP * T * P * t_p$$

где *STR* – изменение структурной сложности от субстрата к продукту по Берцу; *Y* – суммарный выход конечного продукта в долях; *OP* – энантиомерная чистота в долях; *T* – приведенный интервал температур, в котором осуществляется схема, в долях; *P* – приведенный интервал давлений, в котором осуществляется схема, в долях; *t_p* – «нормированное» время стадии в долях.

Формула реализована как программный продукт: «Калькулятор сложности химических реакций». Для решения задачи привлечен аппарат молекулярной топологии, теории графов и теории информации. В качестве инструментов реализации приложения выбраны java, JavaScript, HTML5, для более гибкого использования на различных устройствах, благодаря «клиент-серверной» архитектуре приложения. Программный продукт протестирован на химическом факультете БашГУ при выборе схем синтеза органических соединений.

Литература

1. Берц С. Математическая модель молекулярной сложности // Сборник статей: Химические приложения топологии в теории графов. Под ред. Р. Кинга. М.: Мир. 1987.

ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА О ПРОДОЛЬНОМ УДАРЕ ПО СТЕРЖНЮ

Утяшев Ильнур Мирзович

Институт механики им. Р.Р. Мавлютова УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

В работе рассматривается прямая и обратная задача о продольном колебании цилиндрического стержня длины l . В прямой задаче в начальный момент времени t_0 правый конец стержня ($x=l$) подвергается удару груза массы M , движущегося вдоль оси стержня со скоростью v . Левый конец стержня ($x=0$) жестко закреплен.

Начально-краевая задача выглядит следующим образом[1]:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad \left(a = \sqrt{\frac{E}{\rho}} \right).$$

Граничные условия $u(0,t) = 0$, $ml \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \Big|_{x=l} = -a^2 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=l}$, где через $m = \frac{M}{\rho Sl}$

обозначено отношение массы движущегося груза к массе стержня.

Начальные условия:

$$u \Big|_{t=t_0} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{t=t_0} = 0 \quad \text{при} \quad 0 \leq x \leq l, \quad \frac{\partial u}{\partial t} = -v \quad \text{при} \quad t=t_0 \quad \text{и} \quad x=l.$$

Решение прямой задачи известно [1]. На основе решения построен график перемещений и деформаций в точке x_1 в различные моменты времени.

Обратная задача формулируется следующим образом: известна скорость распространения волны в стержне a , положение точки наблюдения x_1 , значение деформаций в точке при изменении временного параметра t . Требуется определить время удара по стержню t_0 , длину стержня l , массу ударяющего груза m и его скорость v . Решение обратной задачи получено[2]. Написана программа для вычисления неизвестных параметров обратной задачи. С помощью программы показана точность решения обратной задачи, произведено сравнение с прямой задачей.

Литература

1. Кошляков Н.С., Глинер Э.Б., Смирнов М.М. Уравнения в частных производных математической физики. М., «Высшая школа», 1970. С. 70-74.
2. Утяшев И.М., Ахтямов А.М. Определение места повреждения участка трубопровода с помощью его продольных колебаний // Автоматизация, телемеханизация и связь в нефтяной промышленности. 2012. №6. С.36-39.

УДК 534.113

**ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЖЕСТКОСТИ ПРУЖИНЫ,
УПРУГОГО ЗАКРЕПЛЕННОЙ НА ОДНОМ ИЗ КОНЦОВ БАЛКИ
ЭЙЛЕРА – БЕРНУЛЛИ, А ТАКЖЕ МАССЫ И МОМЕНТА ИНЕРЦИИ
ГРУЗА, СОСРЕДОТОЧЕННОГО НА ЭТОМ КОНЦЕ**

Айтбаева А.А.

Институт механики им. Р.Р.Мавлютова УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Колебания и вибрации в различных механизмах могут вызвать погрешности в работе машин или устройствах, увеличить износ и заметно понизить их надежность. Поэтому, на сегодняшний день, интенсивно развивается акустическое диагностирование, решающее задачи оперативного контроля технических конструкций, по собственным частотам ее колебаний.

В приведенной статье рассматриваются изгибные колебания однородной балки Эйлера-Бернулли, левый конец которой заделан, а на правом конце сосредоточен груз массой m_0 и моментом инерции I_0 , упруго закрепленный на пружинке с жесткостью c_0 . В [1] было показано, что для однозначной идентификации двух неизвестных – массы и момента инерции груза – достаточно использования трех собственных частот. В отличие от этой работы, здесь берется упругое закрепление и требуется найти m_0 , I_0 , c_0 . Для этого случая - однозначной идентификации трех неизвестных - достаточно использовать пять собственных частот. Для решения задачи предложен метод дополнительных неизвестных величин. С помощью этого метода построено множество корректности задачи и доказана корректность ее по А.Н. Тихонову. Приведены формулы идентификации и соответствующие примеры.

Литература

1. Ахтямов А.М., Ахтямова А.А. Об однозначности идентификации сосредоточенного инерционного элемента на одном из концов стержня // Вестник Башкирского университета. 2013. № 1, с. 7-11.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Султанбеков А.А., Вахитов Р.М.3	3
ТОПОЛОГИЯ И СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ С НЕБЛОХОВСКОЙ СТРУКТУРОЙ В КРИСТАЛЛАХ–ПЛАСТИНАХ ТИПА [011]	
Хайбуллина А.Р., Янбеков А.А.4	4
СТАБИЛЬНОСТЬ ТОНКОЙ ОБОЛОЧКИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ КРОВОЙ НОРЫ	
Синицын В.Е.5	5
ВЫСОКОПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА СВОЙСТВ МАГНИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ	
Синицын В.Е., Овчинников А.С., Бострем И.Г., Кишине Дж.6	6
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ КИРАЛЬНЫХ ГЕЛИМАГНЕТИКОВ ВО ВНЕШНИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	
Дервянко С.А.8	8
РЕЛАКСАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ СПЛАВА $Ni_{2-x}Pt_xMnGa$	
Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н.9	9
РЕЗОНАНСНЫЕ КИНК-ПРИМЕСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ СИНОС-ГОРДОНА	
Екомасов А.Е., Степанов С.В.10	10
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОЛЯРНОСТИ ЦЕНТРОВ СВЯЗАННЫХ МАГНИТНЫХ ВИХРЕВЫХ СОСТОЯНИЙ В НАНОСТОЛБЧАТОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ТРЕХСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ	
Шафеев Р.Р., Назаров В.Н.11	11
ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЙ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ КОНСТАНТЫ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ И ПАРАМЕТРА ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ХАРАКТЕР ДИНАМИКИ СОЛИТОНА	

Хайбуллина А.Р., Измаилов Р.Н.	12
РЕШЕНИЯ КРОТОВОЙ НОРЫ В ВАКУУМНОЙ ТЕОРИИ БРАНСА-ДИККЕ И В ВАКУУМНОЙ ТЕОРИИ ЭЙНШТЕЙНА	
Гущарина Н.В.	14
ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ В СПЛАВЕ ГЕЙСЛЕРА Ni-Mn-In В РАМКАХ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОГО ПОДХОДА	
Хуснутдинов И.А., Вахитов Р.М., Юмагузин А.Р.	15
ВЛИЯНИЕ КУБИЧЕСКОЙ АНИЗОТРОПИИ НА СВОЙСТВА МАГНИТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА ДЕФЕКТАХ (111)-ОРИЕНТИРОВАННОЙ ПЛАСТИНЫ ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ	
Бурангулова Н.Г., Вахитов Р.М.	16
ОСОБЕННОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ МАГНИТНЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ НА ДЕФЕКТАХ С ГЛАДКИМ ПРОФИЛЕМ В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ	
Бойко С.И., Вахитов Р.М.	17
ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ НА СТРУКТУРУ 180-ГРАДУСНОЙ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ	
Даукаев Т.Р., Закирьянов Ф.К.	18
УПРАВЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЕМ КИНКА УРАВНЕНИЯ sin-ГОРДОНА В ПОЛЕ ЧАСТОТНО-МОДУЛИРОВАННОЙ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ	
Абакумова Н.Н., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Кудрявцев Р.В.	19
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ ДИНАМИКИ ДОМЕННЫХ СТЕНОК В МНОГОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ	
Таскаев С.В.	20
БЕЗРЕДКОЗЕМЕЛЬНЫЕ ПОСТОЯННЫЕ МАГНИТЫ	
Халилова Я.А.	22
ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В МУЛЬТИФЕРРОИКАХ ТИПА ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ	

Нугуманов А.Г., Шарафуллин И.Ф......23
МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В
ПЕРОВСКИТОВЫХ СТРУКТУРАХ В ОБЛАСТИ
МАГНИТОАКУСТИЧЕСКОГО РЕЗОНАНСА

Ахметова А.А., Харисов А.Т......24
РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОХОЖДЕНИЯ СПИНОВОЙ ВОЛНЫ В
МУЛЬТИСЛОЙНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОФИЗИКА»

Ганеев Д.Б......25
ИССЛЕДОВАНИЕ ОСНОВНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ПУЛЬСОВОЙ ВОЛНЫ

Захаров Ю.А......26
РАСЧЁТ ВРЕМЕНИ РЕЛАКСАЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ОБЪЁМНЫХ
ЗАРЯДОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ В ПРИБЛИЖЕНИИ
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

СЕКЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ РАДИОТЕХНИКИ И СВЯЗИ»

Гайсина Д.Ф., Лопатюк А.В......27
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ

Гайфуллина А.С., Лопатюк А.В......28
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК Х-
ОБРАЗНОГО ОПТИЧЕСКОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ С ОБЛАСТЬЮ СУЖЕНИЯ

Лопатюк А.В......29
ИССЛЕДОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОКАНАЛЬНОГО РАЗВЕТВИТЕЛЯ С
РАЗЛИЧНЫМИ ТИПАМИ ИСТОЧНИКОВ ИЗЛУЧЕНИЯ

Тажетдинов З.Ф., Вальшин А.М......30
ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИОДНЫХ ЛАЗЕРОВ ПРИ
ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Абулкарамов В.В., Вальшин А.М......31
ОПТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СВЕТОДИОДОВ ПРИ
ИМПУЛЬСНО-ПЕРИОДИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Кудабаева З.Ю., Лопатюк А.В.	32
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ПЕРЕДАЧИ С УСИЛИТЕЛЕМ EDFA	

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Исанбердина Л.Р., Ситдиков О.Ш., Маркушев М.В.	33
ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОГО РАВНОКАНАЛЬНОГО УГЛОВОГО ПРЕССОВАНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С	

Протасова Е.О., Абрамова М.М., Каравасева М.В.	34
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА СТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СРЕДНЕУГЛЕРОДИСТОЙ СТАЛИ	

Беленкова Т.Е., Чернов В.М.	36
КЛАССИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ ГРАФИНОВЫХ СЛОЕВ	

Грешняков В.А., Беленков Е.А.	37
ПОЛУЧЕНИЕ АЛМАЗОПОДОБНЫХ ФАЗ ИЗ 3D-ГРАФИТОВ	

Коченгин А. Е., Беленков Е.А.	38
РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПОЛИМОРФНЫХ РАЗНОВИДНОСТЕЙ ГРАФЕНА	

Миннибаев И.Н., Беленков Е.А.	39
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ 3D-ГРАФИТОВЫХ ФАЗ	

Габдрахманова Л.А.	40
ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОТВЕРДОСТИ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОБАЛЬТА	

Тиньяев М. И., Беленков Е.А.	41
СТРУКТУРА НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ ФАЗ, СОСТОЯЩИХ ИЗ sp^2 И sp^3 ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ АТОМОВ	

Басырова Е.Р., Тимиров Ю. И., Скалдин О.А.	42
ЭФФЕКТ ВРАЩЕНИЯ КАПЕЛЬ НЕМАТОХОЛЕСТЕРИКА В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ	

Басырова Р.М, Бабаева Л.Е., Балапанов М.Х., Боева М.К.....	43
ТЕРМО-ЭДС И ПРОВОДИМОСТЬ КИСЛОРОД - ИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ $\text{Ba}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{Co}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$	
Ильясов Р.Р., Автократова Е.В., Маркушев М.В.....	45
СТРУКТУРА И ТВЕРДОСТЬ СВАРНОГО СОЕДИНЕНИЯ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 01570 ПРИ РАЗЛИЧНЫХ РЕЖИМАХ СВАРКИ ТРЕНИЕМ С ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ	
Швец К.С., Халикова Г.Р., Трифонов В.Г.....	46
ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА СИСТЕМЫ Al-Si, ПОДВЕРГНУТОГО ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ	
Неустроев А.С. Нечехина Л.В.....	47
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ СРАА/ NaH_2PO_4	
Халилова Г.Г., Ишембетов Р.Х., Кутербеков К.А.....	48
ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И ТЕРМО-ЭДС $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.99}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{1.98}\text{Se}$	
Янбарисова Ф., Ишембетов Р.Х., Нуриахметов Т.Н.....	49
ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ТЕРМО-ЭДС $\text{Ag}_{0.03}\text{Cu}_{1.97}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.04}\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$	
Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Скоков К.П., Карпенков Д.Ю., Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.....	50
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ $\text{Gd}_{100-x}\text{Y}_x$ ($x = 0..15$)	
Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Скоков К.П., Карпенков Д.Ю., Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.....	51
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ $\text{Gd}_{100-x}\text{Zr}_x$ ($x = 0..3$)	
Ишкаев А.А., Ишембетов Р.Х., Ниязгулов, Кутербеков К.А.....	52
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ХАЛЬКОГЕНИДОВ $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$, $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$, Cu_2Se	

Самарбаева Г.И......53
ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ В ДВУМЕРНЫХ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКАХ CuCrS_2 - AgCrS_2

Гундеров Д.В., Чуракова А.А., Заманова Г.И., МаксUTOва Г.Ю., Фазлыева З.Ч., Шайхутдинова Л.Н., Лукьянов А.В......54
ИССЛЕДОВАНИЕ СКОРОСТНОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ДЕФОРМАЦИИ КРУПНОЗЕРНИСТЫХ И НАНОСТРУКТУРНЫХ СПЛАВОВ TiNi

СЕКЦИЯ «НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОЭЛЕКТРОНИКА»

Абдрахманов Э.К., Беленков Е.А......55
РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ ГРАФАНОВЫХ СЛОЕВ И КЛАСТЕРОВ

Миниахметов А.А., Пономарев А.Ф......56
ИЗМЕНЕНИЕ ВЕЛИЧИНЫ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА ВБЛИЗИ ТЕМПЕРАТУР ФАЗОВОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ ПЕРВОГО РОДА НА ГРАНИЦЕ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕР В СТРУКТУРЕ «СЭНДВИЧ»

Султанов И.Ф......57
ИНДИКАЦИЯ ОГРОМНОГО МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРЕ НИКЕЛЬ-ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИД ПРИ ПОМОЩИ КОНТАКТНОГО НАПРЯЖЕНИЯ

Якупова А.Р., Воробьева Н.В., Лачинов А.Н......58
ИНДИКАЦИЯ МАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ МОНОКРИСТАЛЛА $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ С МАЛОЙ ПРИМЕСЬЮ ИОНОВ ИРИДИЯ ПРИ ПОМОЩИ ПЛЕНКИ ПОЛИМЕРА С ШИРОКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ

Бухалов А.В., Беленков Е.А......59
МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ИЗ sp И sp^3 ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ АТОМОВ

Абдуллина А.Р., Назарова Д.Ф., Ильясова Р.Р......60
НАНОСОРБЕНТ НА ОСНОВЕ ГЕТИТА ДЛЯ СОРЕБЦИИ КАДМИЯ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Арсланбаева Г.А., Абдуллина А.Р., Ильясова Р.Р......61
ПРИМЕНЕНИЕ ОТХОДОВ СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНОЙ СЕРЫ ИЗ ПОЛИСУЛЬФИДА КАЛЬЦИЯ В СЕЛЬСКОМ ХОЗЯЙСТВЕ

Музыка А.С., Файрузова Д.Р., Ильясова Р.Р.	62
СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА	
Богатырев Б.Д., Шеповалов И.И., Беленков Е.А.	63
МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОАТОМНЫХ СЛОЕВ ИЗ УГЛЕРОДНЫХ АТОМОВ В СОСТОЯНИЯХ ИЗ SP И SP ² ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫХ АТОМОВ	
Ямалеев А.А., Воробьева Н.В., Галиев А.Ф.	64
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ СТРУКТУР СТЕКЛО/ЖЕЛЕЗО/ПДФ/ ЖЕЛЕЗО С КОНТРОЛИРУЕМОЙ ТОЛЩИНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО И ПОЛИМЕРНОГО СЛОЕВ	
Фазылов А.И., Юсупов А.Р.	65
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА ПОДВИЖНОСТЬ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА	
Гадиев Р.М., Лачинов А.Н., Галиев А.Ф., Набиуллин И.Р.	66
ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНТЕРФЕЙСА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР	
Мухаметгалина А.А., Самигуллина А.А.	67
ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ОБРАБОТКИ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ АМПЛИТУД НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОГО НИКЕЛЯ	
Киан Мохаммадамин, Поленов С.А.	68
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОДНООСНОГО МЕХАНИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА ДОПИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦАМИ PbS	
Рыжов А.М.	69
ИНФРАКРАСНО-АКТИВНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ МОДЫ ДЕФЕКТОВ И ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	
Любцов В.С., Лачинов А.Н.	70
ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ВДОЛЬ ИНТЕРФЕЙСА ПОЛИМЕР/ПОЛИМЕР ОТ ТОЛЩИНЫ ВЕРХНЕЙ ПОЛИМЕРНОЙ ПЛЕНКИ	

Рысаева Л.Х., Баимова Ю.А......71
ВЛИЯНИЕ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СВОЙСТВА ОБЪЕМНЫХ
УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Султангужина А.Б., Баимова Ю.А......72
КЛАСТЕРЫ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В ГРАФЕНЕ

Салихов Т.Р......73
ПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИАНИЛИНА

Лачинов А.А......74
РОЛЬ МАТЕРИАЛА ЭЛЕКТРОДОВ В ЭФФЕКТЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПОД
ДЕЙСТВИЕМ МАГНИТНОГО ПОЛЯ СТРУКТУРЫ
МЕТАЛЛ/ПОЛИМЕР/МЕТАЛЛ

Акбулатов А.Ф., Басырова Р.И., Биглова Ю.Н......75
МЕТАНОФУЛЛЕРЕНЫ В КАЧЕСТВЕ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО
СЛОЯ В СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЯХ

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

Хашпер А.Л., Линд Ю.Б......76
ПРОГРАММНОЕ РАСПОЗНАВАНИЕ КАРОТАЖНЫХ ДИАГРАММ

Рахматуллин И.И., Егоров Д.В., Романов В.В......77
ГЕОФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПРИ РЕКОНСТРУКЦИИ ГАЗОПРОВОДА

Камалиев А.Р......78
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ АНАЛОГОВЫХ ДИАГРАММ ГИС В ЦИФРОВЫЕ
МАССИВЫ

Рахимова З.Х......79
ПРЯМАЯ ЗАДАЧА О ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ИСТОЧНИКА ВНУТРИ
ПЕРЕСЕКАЮЩЕЙ ПЛАСТ ВЕРТИКАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ

Чернякова Е.В. Хайбуллин Т.Ф......80
ЦИФРОВАЯ ОБРАБОТКА ИСХОДНОГО СИГНАЛА МЕТОДА АШ В
СКВАЖИННОЙ ГЕОФИЗИКЕ

Гаврилов А.К.	81
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОКАРОТАЖА СКВАЖИНЫ В СЛОИСТОЙ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ	
Хайбуллин А.Р.	82
МЕДНО-КОЛЧЕДААННЫЕ МЕСТОРОЖДЕНИЯ	
Исламов Д.Ф.	83
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОПРОСЛУШИВАНИЯ СКВАЖИН	
Гафуров А. И.	84
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ИНТЕРВАЛЬНОГО ВРЕМЕНИ ПРОБЕГА ЗВУКА НА ОСНОВЕ НЕЙТРОННОЙ ПОРИСТОСТИ	
Nafikova R.A.	86
DEFINITION OF CRITERIA FOR IDENTIFICATION OF PRODUCTIVE INTERVALS IN THE VAZHENOV FORMATION ACCORDING TO THE WELL LOGGING DATA PROCESSING	
Акчурин Р.З.	87
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕРМОМЕТРИИ ПРИ ДИАГНОСТИКЕ РЕЖИМОВ ТЕЧЕНИЯ В ПЛАСТЕ С ГРП	
Абдрахимова В.И.	88
РАСЧЕТ УСЛОВИЙ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ	
Акчурин Р.З.	89
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ДАВЛЕНИЯ ПРИ ОСВОЕНИИ СКВАЖИНЫ СВАБИРОВАНИЕМ	
Морозкин Н.Н.	91
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ НЕФТИ ОТ ГРАДИЕНТА ДАВЛЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ФИЛЬТРАЦИИ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ НЕФТИ	
Зарипов А.Р. Сушко Б.К.	92
УСТРОЙСТВО ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ КОЛИЧЕСТВА СВЯЗАННОЙ ВОДЫ В КЕРНЕ МЕТОДОМ ВЫСОКОЧАСТОТНОЙ КОНДУКТОМЕТРИИ	

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

Каримова Ю.З.	93
МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТЕЧЕНИЯ ЖИДКОСТИ ИЗ ЩЕЛИ НА БОКОВОЙ ПОВЕРХНОСТИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО РЕЗЕРВУАРА	
Пушкин М.С., Танкеев А.П., Иноземцев А.В.	94
САМОПОДОБНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ПОВЕРХНОСТИ РАЗДЕЛА ПРИ СВАРКЕ ВЗРЫВОМ; ИХ ФРАКТАЛЬНАЯ РАЗМЕРНОСТЬ	
Янышев А.Г.	95
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДсорбЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ ПРИ ЗАКАЧКЕ ПОВЕРХНОСТНО АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ	
Ряхина Е.Г.	97
КИНЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ СТРУИ В СПУТНОМ ПОТОКЕ	
Гильманов С.А.	98
ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ О РАЗЛИВЕ ЖИДКОСТИ НАД ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ	
Муллашев А.Ф.	99
АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ЗАДАЧИ О НЕУСТАНОВИВШЕЙСЯ ФИЛЬТРАЦИИ	
Арасланова А.М.	100
АВТОМОДЕЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ПРЯМОЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О НЕУСТАНОВИВШЕЙСЯ ФИЛЬТРАЦИИ	
Бобровников А.В.	101
УДАРНЫЕ ВОЛНЫ В ПУЗЫРЬКОВОЙ ЖИДКОСТИ В ТРУБЕ С ЭЛАСТИЧНЫМИ СТЕНКАМИ	
Хисматуллина Н.Г.	102
ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ ЗАДАЧИ СТЕФАНА ДЛЯ ОПИСАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, ИНИЦИИРУЕМЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ	

Магадеева Г.Р.	103
РАСПРОСТРАНЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ОБСАЖЕННОЙ СКВАЖИНЕ, ОКРУЖЕННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДОЙ	
Шангареев И.И., Назарова А.Ю.	105
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОПАНТОВ ПРИМЕНЯЕМЫХ НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ	
Гараев Р.Р.	106
РАСТЕКАНИЕ ЖИДКОСТИ ПО ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ	
Мансурова Р.А.	107
ПЛОСКО-ОДНОМЕРНЫЙ РАЗЛИВ С УЧЕТОМ ВПИТЫВАНИЯ В ГРУНТ	
Скаридова Т.Ю.	108
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АВТОМОДЕЛЬНОСТИ ПРИ ИЗУЧЕНИИ РАЗЛИВОВ ЖИДКОСТИ	
Могильникова А.П.	109
МОДЕЛЬ МАССООБМЕНА МНОГОФАЗНОЙ СМЕСИ В ТРУБЕ С УЧЕТОМ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ	
Кабанова П.К., Каргавцева И.А.	110
ИМПЕДАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАСТВОРА ПАВ В НЕПОЛЯРНОЙ ЖИДКОСТИ	
Кильдибаева С.Р.	111
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВСПЛЫТИИ МЕТАНОВЫХ ПУЗЫРЬКОВ	
Ибагуллина А.Ф.	112
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПЕРЕХОДНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ В ПЛАСТЕ И СКВАЖИНЕ ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ ТЕРМОГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ	
Зиннатуллин Р.Р., Амекачев Р.М.	114
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭМУЛЬСИЮ	

Сагадеева А.Д., Алдошина Н.Д., Яковлева И.Б.	115
МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ	
Рабцевич Ю.А., Давлетбаев А.Я., Ивашенко Д.С.	116
ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ДАННЫХ ЗАБОЙНОГО ДАВЛЕНИЯ В ВЕРТИКАЛЬНЫХ ДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИНАХ С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В НИЗКОПРОНИЦАЕМЫХ КОЛЛЕКТОРАХ	
Лысова Ю.С.	117
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СХОДА СНЕЖНОЙ ЛАВИНЫ С УЧЕТОМ ПРОФИЛЯ СКЛОНА	
Зайнетдинов Р.Р.	118
ДИНАМИКА АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ТРУБАХ, ЗАПОЛНЕННЫХ ЖИДКОСТЬЮ, С ПОДАТЛИВЫМИ СТЕНКАМИ	
Садыкова Л.А.	119
МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ДВИЖУЩИХСЯ СЛОИСТО-ОДНОРОДНЫХ СРЕД ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ	
Адамова М.Е., Жуков Е.А., Каминский А.В., Комина О.Ю., Щербаков Ю.И.	120
ВЛИЯНИЕ ПОСТОЯННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ДИНАМИКУ ДОМЕННЫХ ГРАНИЦ В $FeVO_3$ И $YFeO_3$	
Назмутдинов А.Ф., Назмутдинов Ас.Ф.	121
ОСОБЕННОСТИ УСТАНОВЛЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ	
Замула Ю.С., Мавлетов М.В.	122
ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ	
Замула Ю.С., Камалтдинов И.М., Мавлетов М.В.	123
ИССЛЕДОВАНИЕ АСФАЛЬТЕНОВЫХ ПЛЕНОК И КАПЕЛЬ С ПОМОЩЬЮ АТОМНО-СИЛОВОГО МИКРОСКОПА	

Юлмухаметова Р.Р......124
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ
ФИЛЬТРАЦИИ ВОДЫ С ОСАДКООБРАЗУЮЩИМ РЕАГЕНТОМ В
ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Валеева Э.З......125
ВЛИЯНИЕ ОГРАНИЧЕНИЯ ЗАКАЧКИ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ
ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН НА ДОБЫЧУ
ДОБЫВАЮЩИХ СКВАЖИН В НИЗКОПРОНИЦАЕМЫХ
КОЛЛЕКТОРАХ

Мирошниченко В.Ю. Бухмастова С.В......126
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В ЖИДКОСТИ,
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ КОТОРОЙ ЗАВИСИТ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ

Альмухаметова А.Р., Саметов С.П......127
ИССЛЕДОВАНИЕ И АНАЛИЗ ФОРМЫ ВОЗМУЩЕНИЙ ВОЗДУШНОГО
ПУЗЫРЯ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ПОЛЯ ВБЛИЗИ
СТЕНКИ

Сельтикова Е.В......128
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕФТИ НА ДИНАМИКУ ТЕМПЕРАТУРЫ В
ПРОЦЕССЕ ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ

Гильманова Г.И......129
МОДЕЛИРОВАНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ ДЛЯ ЧИСТОЙ
ЖИДКОСТИ: СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ»

Нигаматуллина А.Ф......131
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНИМАЦИИ ПРИ ДЕМОНСТРАЦИИ ФИЗИЧЕСКИХ
МОДЕЛЕЙ

Чугунов В.К......132
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАСШИРЕНИЙ CMS JOOMLA ПРИ ПОДГОТОВКЕ К
УРОКУ ИНФОРМАТИКИ

Гафуров И.Г., Сарваров Р.Т......133
УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ СТЕНД ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ЗАКОНОВ
ЭЛЕКТРОТЕХНИКИ

СЕКЦИЯ «МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА»

Муратшина Д.В.	134
ПРИЧИНЫ НАРУШЕНИЯ ЦЕЛОСТНОСТИ ЗУБОВ	
Гаймалова Р.Р.	135
ПОЗИТРОННО-ЭМИССИОННАЯ ТОМОГРАФИЯ	
Бураншина А.Ф.	136
СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ЭХОГРАФИИ	
Ильясова К.К.	137
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕПЛОВИЗОРОВ В МЕДИЦИНЕ	
Маркелов Ф.З.	138
КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ В СТОМАТОЛОГИИ	
Ахметгалиев Б.М.	139
МЕТОД УЛЬТРАВЫСОКОЧАСТОТНОЙ ТЕРАПИИ	

ХИМИЯ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р., Игнатъева К.А.,	140
Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А. ВОЗМОЖНОСТЬ ПРИМЕНЕНИЯ ОРБИТАЛЬНОЙ ЗАСЕЛЕННОСТИ В КАЧЕСТВЕ ИНДЕКСА РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АЛКЕНОВ В РЕАКЦИИ С КАРБКАТИОНАМИ СТАБИЛИЗИРОВАННЫМИ АТОМОМ АЗОТА	
Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,	142
Игнатъева К.А., Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ НА КРАТНОЙ СВЯЗИ АЛКЕНОВ КАК ПОКАЗАТЕЛЬ ИХ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В РЕАКЦИИ С АМИНОМЕТИЛЬНЫМ КАРБКАТИОНОМ	
Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р., Талипова Г.Р.	144
ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ПОТЕНЦИАЛОВ ИОНИЗАЦИИ АЛКЕНОВ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИХ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ В РЕАКЦИИ АМИНОМЕТИЛИРОВАНИЯ	

- Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,145**
Биктимерова Р.Г., Саяхов Р.Р., Матвеев Е.А
 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ NBO АНАЛИЗА ДЛЯ ОЦЕНКИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ АЛКЕНОВ В РЕАКЦИИ АМИНОМЕТИЛИРОВАНИЯ
- Талипов Р.Ф., Вакулин И.В., Латыпова Э.Р.,147**
Биктимерова Р.Г., Матвеев Е.А., Саяхов Р.Р.
 НЕКОТОРЫЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ РЕАКЦИИ ПРИСОЕДИНЕНИЯ ОСНОВАНИЙ МАННИХА ПО КРАТНОЙ СВЯЗИ АЛКЕНОВ
- Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С., Купова О.Ю.,148**
Пасько П.А.
 ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА
- Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Тухватшин В.С., Купова О.Ю.,149**
Пасько П.А.
 ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА СНИЖЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА
- Вакулин И.В., Талипова Г.Р., Латыпова Э.Р., Купова О.Ю.,150**
Пасько П.А.
 ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ПОР ЦЕОЛИТОВ ТИПА $CA_x[AL_{2x}SI_yO_z] \cdot NH_2O$ НА СНИЖЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА
- Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., Латыпова Э.Р., Купова О.Ю.,152**
Пасько П.А.
 О ВОЗМОЖНОСТИ ПОВЫШЕНИЯ СЕЛЕКТИВНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,3-ДИОКСАНОВ ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА В ПРИСУТСТВИИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК
- Ильина М.Г., Овчинников М.Ю., Хурсан С.Л.153**
 МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРИПЛЕТНО – ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ПОСРЕДСТВОМ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
- Калимуллина Л.Р., Асфандиаров Н.Л., Нафикова Е.П.,154**
Лачинов А.Н., Чижов Ю.В.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
ДЛЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ОЦЕНКИ ЭНЕРГИИ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ
ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОНА

Э.И. Мурсалимова, Э.М. Хамитов. 155
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ
ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА С ЯНТАРНОЙ И ФУМАРОВОЙ
КИСЛОТАМИ

Шамсиева Г.Р., Хамитов Э.М. 156
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИМЕРОВ УРАЦИЛА

Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М., Хурсан С.Л. 157
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ САМОСБОРКИ 5-
ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА В РАЗЛИЧНЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И. 158
МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ В КВАНТОВО-
ХИМИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ

Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И. 159
ПРИМЕНИМОСТЬ КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА ПРИ
ИЗУЧЕНИИ МЕХАНИЗМОВ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И. 161
СПОСОБЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭМПИРИЧЕСКИХ ИНКРЕМЕНТОВ
ПОВЫШАЮЩИХ ТОЧНОСТЬ УСКОРЕННЫХ КОМПОЗИТНЫХ
МЕТОДОВ РАСЧЕТА

Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Вакулина А.И. 163
ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА ТЕСТОВОГО НАБОРА НА ЭМПИРИЧЕСКИЕ
ИНКРЕМЕНТЫ В КОМПОЗИТНЫХ МЕТОДАХ РАСЧЕТА

СЕКЦИЯ «ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»

Чернышева Ю.С., Бабаев М. С. 164
ПОЛИКОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ СОПОЛИМЕРА N,N-ДИАЛЛИЛ-N,N-
ДИМЕТИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА С МАЛЕИНОВОЙ КИСЛОТОЙ,
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ИЗОНИАЗИДОМ

Буракова А.О., Шиян Д.А., Терещенко К.А., 165 Колесов С.В., Янборисов В.М., Улитин Н.В. УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ГЕЛЬ-ЭФФЕКТА НА КИНЕТИКУ ПРОЦЕССА РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА	165
Хайруллина А.И., Жукова А.Н., Шарипова Э.А. 166 АМФИФИЛЬНЫЕ СОПОЛИМЕРЫ НА ОСНОВЕ МЕТИЛАКРИЛАТА И ХИТОЗАНА	166
Нигметзянов А.Р. 167 ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА КОМПОЗИЦИИ ПЕНООБРАЗОВАТЕЛЯ НА ОСНОВЕ ФТОР-ПАВ И КСАНТАНОВОЙ КАМЕДИ	167
Рихтер Н.А., Кулиш Е.И. 168 ВЛИЯНИЕ ТЕРМОДИФИКАЦИИ ХИТОЗАНА НА СКОРОСТЬ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА	168
Набиев Р.Р., Улитин Н.В. 169 КИНЕТИКА ПРОЦЕССА РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА ПО МЕХАНИЗМУ ОБРАТИМОЙ ПЕРЕДАЧИ ЦЕПИ	169
Рязанов К.С., Нафикова Р.Ф., Ахметханов Р.М. 170 ПЛАСТИФИКАЦИЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА ДИОКТИЛТЕРЕФТАЛАТОМ	170
Бабаев М.С. 171 ПОЛИКОМПЛЕКСЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-N,N-ДИАЛЛИЛ-N,N- ДИМЕТИЛАММОНИЙ ХЛОРИДА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ	171
Шакиров Р.А., Зиганшина А.С., Набиев Р.Р., Терещенко К.А. 172 Захаров В.П.2, Улитин Н.В.2 CFD-МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА ПОЛИБУТАДИЕНА НА ТИТАНОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ	172
Широких Е.Б., Захаров В.П., Терещенко К.А., Улитин Н.В. 173 КИНЕТИКА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ИЗОПРЕНА НА НЕОДИМОВОМ КАТАЛИЗАТОРЕ В РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ	173
Шуршина А.С., Лаздин Р.Ю. 174 ВЛИЯНИЕ АНТИБИОТИКОВ АМИНОГЛИКОЗИДНОГО РЯДА НА ПРОЦЕСС СОРБЦИИ ВОДЫ ХИТОЗАНОВЫМИ ПЛЕНКАМИ	174

Алексеев С.В., Усманова Л.Р., Матвиенко Е.О., Ахметшин Б.С., Прочухан К.Ю., Прочухан Ю.А.	175
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ АНИОННЫХ ПАВ	
Зиганшина А.С., Набиев Р.Р., Захаров В.П., Шакиров Р.А., Терещенко К.А., Улитин Н.В.	176
КИНЕТИКА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ БУТАДИЕНА (КАТАЛИЗАТОР – $TiCl_4-Al(i-C_4H_9)_3$)	
Шуршина А.С., Кулиш Е.И.	177
ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК	
Туктарова И.Ф., Лаздин Р.Ю.	178
БИОДЕСТРУКЦИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА НЕСПЕЦИФИЧЕСКИМ ФЕРМЕНТОМ ГИАЛУРОНИДАЗОЙ	
Улитин Н.В., Набиев Р.Р.	180
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОНТРОЛИРУЕМОЙ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА (МЕХАНИЗМ – ОБРАТИМАЯ ПЕРЕДАЧА ЦЕПИ), ПРОВОДИМОЙ В РЕАКТОРЕ СМЕШЕНИЯ	
Тимербаева Д.А., Туктарова И.Ф.	181
ВЛИЯНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА НА СКОРОСТЬ ДЕСТРУКЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК	
Валиев Д.Р., Аскарова А.З.	182
ИЗУЧЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ СУКЦИНАТА ХИТОЗАНА И КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ЛИОФОБНЫХ ЗОЛЕЙ	
Валиуллина И.И.	183
ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ ГИДРОЛИЗ ПЛЕНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ ХИТОЗАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ГИАЛУРОНИДАЗЫ	
Вильданова Р.Р., Сигаева Н.Н., Куковинец О.С., Колесов С.В.	184
СОЗДАНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ДИАЛЬДЕГИДА ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ И СУКЦИНАТА ХИТОЗАНА	

Зиганшина А.С., Шакиров Р.А., Набиев Р.Р., Терещенко К.А., Захаров В.П., Улитин Н.В.	185
МОДЕЛИРОВАНИЕ СИНТЕЗА ПОЛИБУТАДИЕНА В ПРИСУТСТВИИ ТИТАНОВОГО КАТАЛИЗАТОРА В ОБЪЕМНОМ ПОЛИМЕРИЗАТОРЕ	
Каримова Р.Д., Хуснутдинова А.Н.	186
ИЗУЧЕНИЕ РАСТВОРОВ ХИТОЗАНА С ВКЛЮЧЕННЫМ АНТИБИОТИКОМ АМИКАЦИН СУЛЬФАТОМ	
Каримова Р. Д., Фасхутдинова А.А.	187
ИЗУЧЕНИЕ ВЫХОДА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА ИЗ ХИТОЗАНОВЫХ ПЛЕНОК	
Каримова Р.Д., Галина А.Р.	188
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА	
Тухватуллин Р.Ф., Валиев Д.Р.	189
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧКИ КРОССОВЕРА РАСТВОРОВ НЕКОТОРЫХ ПОЛИСАХАРИДОВ	
Диниахметова Д.Р., Фризен А.К.	190
DFT ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФУЛЛЕРЕНА C ₆₀ С ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТНЫМИ РАДИКАЛАМИ	
Ващенко А.В., Идогова Я.В., Мукминова И.Р., Прочухан К.Ю., Прочухан Ю.А.	191
РАСТИТЕЛЬНЫЕ ЖИРЫ КАК СЫРЬЕ ДЛЯ СИНТЕЗА ПАВ В НЕФТЯНОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ	
И.Р. Мукминова, Г.И. Акьюлова, А.В. Ващенко, К.Ю. Прочухан, Ю.А. Прочухан	192
ВЛИЯНИЕ МИНЕРАЛИЗАЦИИ НА НЕФТЕОТМЫВАЮЩУЮ СПОСОБНОСТЬ ВОДНОГО РАСТВОРА АНИОННОГО ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА Р-30.	
Чернова В.В., Галина А.Р.	194
ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ИЗГОТОВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОЧНОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА	

Лаздин Р.Ю., Чернова В.В.195
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ РАСТВОРИТЕЛЯ НА СТРУКТУРУ
ПОВЕРХНОСТИ ПЛЕНОЧНОГО ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА,
СФОРМИРОВАННОГО ИЗ РАСТВОРА

Гурина М.С.196
ФЕРМЕНТАТИВНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ ПЛЕНОК ХИТОЗАНА

СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Ахунова Р.Р., Биглова Р.З.197
ОСОБЕННОСТИ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК ОТХОДА ПРОИЗВОДСТВА
ПОЛИЭТИЛЕНПОЛИАМИНА НА ТЕХНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ДОРОЖНЫХ БИТУМОВ

Альмухаметов А.З., Гимазетдинов А.М., Лоза В.В.198
СИНТЕЗ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА(+)-ИДЕЗМЕТИЛЕНОМИЦИНА А

Амантаева Г.Ю., Берестова Т.В. 199
ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗНОЛИГАНДНЫХ ХЕЛАТОВ $Cu(II)$ МЕТОДОМ
ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Абдуллин М.И. 201
ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ПЛОДОВЫХ ОБОЛОЧЕК ГРЕЧИХИ

**Ямансарова Э.Т., Громыко Н.В., Куковинец О.С., Зворыгина О.Б.,
Абдуллин М.И.**203
СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СОРБЕНТОВ ИЗ
РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

И.Р. Хамзин, П.С. Сайтмуратов, Ю.А.Хакимова, 205
А.А. Исламугдинова
ОЦЕНКА ТОКСИЧНОСТИ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ

Ибрагимова Г.Б., Латыпова Д. Р.206
СИНТЕЗ ШЕСТИЧЛЕННЫХ *N*-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ РЯДА *L*-АНАБАЗИНА И
1,3-ГЕКСАГИДРОПИРИМИДИНА

Клецкова Д.И., Ахметова В.Р, Файзрахманов И.С.,207
Камалтдинов И.М.
АНТИКОРРОЗИЙНАЯ АКТИВНОСТЬ БИЯДЕРНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Клецкова Д.И., Ахметова В.Р, Файзрахманов И.С.....209
ДОМИНО СИНТЕЗ БИЯДЕРНЫХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Матвеев Е.А., Тухватшин В.С., Талипова Г.Р.211
КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СХЕМ СИНТЕЗА
2,3-БИС(БУТОКСИМЕТИЛ)-ГЕМ-ДИХЛОРОЦИКЛОПРОПАНА

Михеев В.В., Торосян С. А., Загитов В.В., Биглова Ю. Н. 212
СИНТЕЗ ФЕНИЛТЕТРАЗОЛСУЛЬФАНИЛ- И
МЕТАНОФУЛЛЕРЕНИЛМОДИФИЦИРОВАННЫХ МОНОМЕРОВ
НОРБОРНЕНОВОГО РЯДА И СОПОЛИМЕРА НА ИХ ОСНОВЕ

Саяхов Р.Р., Тухватшин В.С.,Вакулин И.В.213
КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ СИНТЕЗОВ
КАПАРРАТРИЕНА

**Тухватшин В.С., Ишмуратов Г.Ю., Яковлева М.П., Муслухов Р.Р.,
Талипов Р.Ф. 214**
ОКИСЬ (R)-4-МЕНТЕН-3-ОНА В РЕАКЦИИ РИТТЕРА

Г.Ю. Ишмуратов, В.С. Тухватшин, Р.Ф. Талипов 215
(R)-n-МЕНТ-4-ЕН-3-ОН В СИНТЕЗЕ (S)-(+)-ГИДРОПРЕНА

СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

**Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Барановская В.А.,
Майстренко В.Н. 217**
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ КИСЛОТНО-ОСНОВНОГО
ТИТРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА PLS

**Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Баймуратова Г.Р.,
Кудашева Ф.Х. 218**
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ИССЛЕДОВАНИЯ СОРБЦИИ
АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ МЕТОДОМ PLS

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Барановская В.А., Кудашева Ф.Х.	219
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА PLS	
Фазылова Г.Ф., Валинурова Э.Р.	220
АДСОРБЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА АКТИВИРОВАННОЙ УГЛЕРОДНОЙ ТКАНЬЮ	
Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Мухамедьяров Т.Н., Майстренко В.Н.	221
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» ДЛЯ ЭКСПРЕСС-ИДЕНТИФИКАЦИИ ТЕХНИЧЕСКИХ И ПИЩЕВЫХ МАСЕЛ	
Бадикова А.Д., Файзрахманов И.С., Алехина И.Е., Клецкова Д.И. ...	223
ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫМ МЕТОДОМ АНАЛИЗА	
Нигметзянов А.Р.	225
СТАБИЛЬНОСТЬ ДЕЗИНФИЦИРУЮЩЕГО СРЕДСТВА НА ОСНОВЕ ОКИСЛЕННЫХ ФОРМ ЙОДА	
Сухарева Д. А.	226
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ И ПОЛЯРНОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ СОРБЕНТА МСМ-41	
Зайнуллина Ф., Ширяева Р.Н.	227
ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАТОРОВ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕФТИ АСКАРОВСКОГО МЕСТОРОЖДЕНИЯ.	
Зильберг Р.А., Храмилова А.В., Яркая Ю.А., Сидельников А.В. ...	228
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ НА ЭЛЕКТРОДАХ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ	
Зильберг Р.А., Сидельников А.В., Аничкова Ю.Г., Яркая Ю.А., Сахипова И.И., Батыров Т.И.	230
ИДЕНТИФИКАЦИЯ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ ЭЛЕКТРОДАХ	

Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В., 231
Храилова А.В., Сахипова И.И.
МОДИФИЦИРОВАННЫЕ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ ЭЛЕКТРОДЫ
ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Бирюкова А.А. 233
СИНЕРГИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В РЕАКЦИИ ИНГИБИРОВАННОГО
ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА ДОБАВКАМИ НИТРОКСИЛЬНЫХ
РАДИКАЛОВ И АРОМАТИЧЕСКОГО АМИНА

Абдуллина Л. Я., Гайнуллина Ю.Ю., Гуськов В.Ю.,234
Кудашева Ф.Х.
АДСОРБЦИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТИ
СОРБЕНТОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ МЕЛАМИНОМ ПО ДАННЫМ
ОБРАЩЁННОЙ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Борисова Н.С., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г.235
КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛА
С 5-АМИНОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ: ПОЛУЧЕНИЕ И
БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Гайнуллина Ю.Ю., Кудашева Ф.Х. 236
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ КОНДИЦИОНИРОВАНИЯ НА
СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ

Гайнуллина Ю.Ю., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.237
РАЗДЕЛЕНИЕ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕНТОЛА, КАМФЕНА И КАМФОРЫ
МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ НА НОВОЙ НЕПОДВИЖНОЙ
ФАЗЕ НА 5-ГИДРОКСИ-6-МЕТИЛУРАЦИЛЕ

Кузьмина Е.В., Колосницын В.С., Ибатуллина Ю.Р.,238
Зимин Ю.С
ВЫЩЕЛАЧИВАНИЕ ВАНАДИЯ ИЗ ТЕХНОГЕННОГО СЫРЬЯ

Кутлугильдина Г.Г., Зиннатуллина Д.К., Зимин Ю.С.239
КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ОЗОНА С ПОЛИВИНИЛОВЫМ СПИРТОМ В
ВОДНОЙ СРЕДЕ

Мифтахова Г.В.	240
ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ИЗОМЕРОВ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ, ЦИНКА, КАЛЬЦИЯ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ	
Хайруллина Л.Р., Насретдинова Р.Н., Зимин Ю.С.	242
ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПРИ ОКИСЛЕНИИ УРАЦИЛОВ ОЗОН-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСЬЮ	
Носова А.Н.	243
КОЛИЧЕСТВЕННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СИНЕРГИЗМА В ИНГИБИРУЮЩЕЙ КОМПОЗИЦИИ «НИТРОКСИЛЬНЫЙ РАДИКАЛ + АРОМАТИЧЕСКИЙ АМИН»	
Рыженко М.А., Биглова Ю.Н.	244
РАСТВОРЕНИЕ МОНОЗАМЕЩЕННЫХ МЕТАНОФУЛЛЕРЕНОВ В СЕРНОЙ КИСЛОТЕ	
Сабитова Ф.С., Шарипов Т.В., Кинзябулатова Г.С.	245
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОМПОНЕНТОВ В ПРОЦЕССЕ ПОЛУЧЕНИЯ ЖИДКИХ КОМПЛЕКСНЫХ УДОБРЕНИЙ.	
Сайфутдиярова Р.Р.	246
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ РАЗНОЛИГАНДНЫХ ХЕЛАТОВ Mn(II) И Mg(II)	
Шарипова Г., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я.,	247
Сахибгареева М.В., Спивак С.И.	
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ИНГИБИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1, 4- ДИОКСАНА	
Ганиева А.Г., Валиева Э.М., Кудашева Ф.Х., Гуськов В.Ю.	249
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ	
Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С.,	250
Ф.С. Зарудий	
QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ ЦИКЛООКСИГЕНАЗЫ-2 В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ, ТИАЗОЛОНА И ОКСАЗОЛОНА	

Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С.,251

Ф.С. Зарудий

**МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ
ДИХЛОРФЕНИЛАМИНОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ В АКТИВНЫЕ
ЦЕНТРЫ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ**

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ХИМИИ»

Салахутдинов Р.Р., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.253

**ИЗУЧЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА CHEMCALCULATOR**

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия.

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. 254

**АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЕДИНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА
ПО ХИМИИ В РБ ЗА 2014 ГОД**

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.255

**МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ РАСЧЕТНЫХ ЗАДАЧ ПО ХИМИИ НА
АЛГОРИТМ «ИЗБЫТОК-НЕДОСТАТОК»**

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.256

ТРЕБОВАНИЯ К СОСТАВЛЕНИЮ ТЕСТОВЫХ ЗАДАНИЙ

Мустакимов Р.А.257

**УСИЛЕНИЕ РОЛИ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ В ПРЕПОДАВАНИИ
ДИСЦИПЛИН ПРОФИЛЯ «ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»**

Загитов В.В., Базунов А.А.258

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ
ПРИ ВЫПОЛНЕНИИ ВКР В ОБЛАСТИ ФИЗИЧЕСКОЙ КУЛЬТУРЫ И
СПОРТА**

МАТЕМАТИКА

СЕКЦИЯ «КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И ТЕОРИЯ ФУНКЦИЙ»

Гайсин Р.259

**ТОЧНЫЕ ОЦЕНКИ ВЕРХНИХ ГРАНЕЙ ПРОИЗВОДНЫХ НА КУСОЧНО-
КВАЗИГЛАДКИХ ДУГАХ**

Гой Т. П.	260
О НОВЫХ ФУНКЦИЯХ ТИПА ИНТЕГРАЛОВ ФРЕНЕЛЯ	
Губайдуллина Э.Ф.	261
О РАЗЛОЖЕНИИ ФИШЕРА ДЛЯ ОПЕРАТОРОВ С ОДНОРОДНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИМИ ФУНКЦИЯМИ	
Коса В.В.	262
INVARIANT SUBSPACES OF THE HARDY SPACE OVER THE POLYDISC	
Рахимова А.И.	263
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЫПУКЛЫХ ФУНКЦИЙ	
Зименс К.Р., Напалков В.В.	264
ОБ ОДНОЙ ЗАДАЧЕ ОПЕРАТОРА СВЕРТКИ НА ВЫПУКЛЫХ ОБЛАСТЯХ	

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ»

Ершов А.А., Гадыльшин Р.Р.	265
АСИМПТОТИКА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ	
Гадыльшин Т. Р.	266
ЗАДАЧА ДИРИХЛЕ ДЛЯ ОПЕРАТОРА ШРЕДИНГЕРА С БЫСТРООСЦИЛЛИРУЮЩИМ И ДЕЛЬТООБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛАМИ	
Гайсина Р.Н.	267
ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ НУЛЕВОГО И ПЕРВОГО ПОРЯДКОВ ДЛЯ ОДНОЙ ЭВОЛЮЦИОННОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ.	
Камалетдинов А.Ш.	268
ЗАДАЧА ДИРИХЛЕ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ПЕРЕМЕННЫМ ПОКАЗАТЕЛЕМ НЕЛИНЕЙНОСТИ	
Хакимова А.Р.	269
ЧАСТНЫЕ РЕШЕНИЯ ОДНОГО УРАВНЕНИЯ В КОНЕЧНЫХ РАЗНОСТЯХ.	
Щелконогов А.А.	270
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЮСОВ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЯ ПЕНЛЕВЕ-4	

Niyaz Tokmagambetov.....272
θ - PSEUDO-DIFFERENTIAL OPERATORS

Воронова Ю.Г.273
ЛИНЕЙНЫЕ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ С
ПОСТОЯННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

СЕКЦИЯ «СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

Давлетов Д.Б., Файзулина К.И......274
АСИМПТОТИКИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭЛЛИПТИЧЕСКОЙ
КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ В ОБЛАСТИ С МАЛЫМ ОТВЕРСТИЕМ

Кожевников Д.В., Хуснуллин И.Х.276
ЗАДАЧА СТЕКЛОВА В ПОЛУЦИЛИНДРЕ С МАЛЫМ ОТВЕРСТИЕМ

Павленко В.А.277
ФОРМУЛА ЛЕФШЕЦА ДЛЯ ПОТОКА НА РАССЛОЕННОМ
МНОГООБРАЗИИ.

Репьевский С.В., Гадыльшин Р.Р.278
О ПОВЕДЕНИИ СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ ПРИ СИНГУЛЯРНОМ
ВОЗМУЩЕНИИ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА ДЛЯ ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ

Шишкина Е.А., Репьевский С.В., Гадыльшин Р.Р.279
АСИМПТОТИКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ
ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ СО СМЕНОЙ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ

СЕКЦИЯ «МЕХАНИКА»

Белова С.В.280
ФИЛЬТРАЦИЯ ЖИДКОСТИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Дударева О.В. 281
МЕТОД СМЕНЫ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ ДЛЯ ЗАДАЧ
ФИЛЬТРАЦИИ С ПРЕДЕЛЬНЫМ ГРАДИЕНТОМ

Галеева Д.Р. 28.....282
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИНЫ И ПЛОТНОСТИ КОРРОЗИОННОГО УЧАСТКА
ТРУБЫ ПО СОБСТВЕННЫМ ЧАСТОТАМ ПРОДОЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ.

Ахтямов А.М., Кумушбаев Р.Р., Кумушбаева Э.Э.	283
ОБОБЩЕНИЕ ТЕОРЕМЫ РАММА.	
Нусратуллина Л. Р., Ахтямов А.М.	284
ЗАВИСИМОСТЬ ПЕРВОЙ ЧАСТОТЫ КОЛЕБАНИЙ КРУГОВОЙ ПЛАСТИНЫ ОТ ДЛИНЫ ЗАКРЕПЛЕНИЯ ПО ВНЕШНЕМУ КОНТУРУ	
Рафикова Г.Р.	285
ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА В ВОДОНАСЫЩЕННОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ ПРИ НАГНЕТАНИИ ГАЗА	
Рамазанов Д.М., Сафина Г.Ф.	286
ДИАГНОСТИРОВАНИЕ ЖЕСТКОСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ВАГОНА	
Султанова А.А.	287
ИДЕНТИФИКАЦИЯ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ МЕТОДОВ ВВЕДЕНИЕ НЕИЗВЕСТНЫХ ВЕЛЕЧИН	
Русинов А.А.	288
О ПРОЦЕССЕ МИГРАЦИИ МЕТАНОВЫХ ПУЗЫРЬКОВ В УСЛОВИЯХ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ	
Чиглинцева А.С., Кунсбаева Г.А.	289
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА ПРИ ИНЖЕКЦИИ ГАЗА И КАПЕЛЬ ВОДЫ	

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Савка Иван , Гой Тарас, Власий Олег	290
КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ЛАВРЕНТЬЕВА – БИЦАДЗЕ ИНТЕГРАЛЬНЫМ УСЛОВИЕМ ВТОРОГО РОДА	
Шарапов Т. Ф.	291
О РЕЗОЛВЕНТЕ МНОГОМЕРНЫХ ОПЕРАТОРОВ С ЧАСТОЙ СМЕНОЙ КРАЕВЫХ УСЛОВИЙ	
G. L. Zavorokhin	291
THE WAVE FIELD OF A POINT SOURCE THAT ACTS ON THE PERMEABLE FREE BOUNDARY OF A BIOT HALF-PLANE	

СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Белослудцев И.О., Гибяева Р.А.292
ПРИМЕНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННЫМ
ИНТЕЛЛЕКТОМ

Григорьев И.В., Мустафина С.А.293
ГЛОБАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОМ РОЯ ЧАСТИЦ НА GPU

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»

Амирова Г.Ф.294
МОДЕЛИРОВАНИЕ ОЦЕНКИ РИСКА БАНКРОТСТВА ПРЕДПРИЯТИЯ

Арсланова Р.Р.295
АКТУАРНЫЕ РАСЧЕТЫ В СТРАХОВАНИИ ЖИЗНИ И ЗДОРОВЬЯ

Файзуллин А.Р., Сафина Г.Ф.297
МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЗАДАЧЕ КОЛЕБАНИЙ БАЛКИ С УЧЕТОМ
ПРОДОЛЬНОЙ СИЛЫ

Икрамов Р.Д., Мустафина С.А.298
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛИ ОРЕГОНАТОРА
КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ БЕЛОУСОВА-ЖАБОТИНСКОГО

Хашпер Б.Л., Надеждин О.В., Ефимов Д.В.299
АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ В ЗАДАЧЕ
АНАЛИЗА СВЯЗНОСТИ СКВАЖИН

Лысенко Д.В.300
ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОМОБИЛЬНОГО
ДВИЖЕНИЯ НА УЧАСТКЕ АВТОДОРОГИ

Михайлова Т.А., Мустафина С.А.301
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО В МОДЕЛИРОВАНИИ
ПРОЦЕССА СВОБОДНО-РАДИКАЛЬНОЙ СОПОЛИМЕРИЗАЦИИ
БУТАДИЕНА СО СТИРОЛОМ

Мицуков Д.С.	302
РАСПОЗНАВАНИЕ ОБРАЗА СТВОЛА ПЕРА НА ЦИФРОВОМ ИЗОБРАЖЕНИИ	
Могильникова А.П.	304
МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОМОБИЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ С ПЕШЕХОДНЫМИ ПЕРЕХОДАМИ	
Полякова А.П.	305
СИНГУЛЯРНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ ОПЕРАТОРА НОРМАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ РАДОНА, ДЕЙСТВУЮЩЕГО НА ТРЕХМЕРНОЕ СИММЕТРИЧНОЕ 2-ТЕНЗОРНОЕ ПОЛЕ	
Ротков Д.С., Гибасва Р.А.	306
КОМПЬЮТЕРНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ КОНЕЧНЫХ АВТОМАТОВ	
Сафина И.И.	307
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ОЦЕНКЕ ФИНАНСОВОЙ УСТОЙЧИВОСТИ БАНКА	
Шаймухаметова Д.В., Мустафина С.А.	308
ВЫВОД КИНЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛБУТЕНОВ В ИЗОПРЕН С УЧЕТОМ ПАРАМЕТРА ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА	
Шайхнурова А.Ф., Карамутдинова Г.Р., Губайдуллин И.М.	309
МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ПОТОКОВ В МИЛЛИОННОМ ГОРОДЕ	
Соснина У.Ю.	310
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ БЕРЕГОВОЙ ЛИНИИ	
Светов И.Е.	311
СРАВНЕНИЕ ДВУХ АЛГОРИТМОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУМЕРНОЙ 2-ТЕНЗОРНОЙ ТОМОГРАФИИ	
Валитов Д.И.	312
МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ САХАРНЫМ ДИАБЕТОМ	

Иванов А.А.	313
ВЫЧИСЛЕНИЕ МАКСИМАЛЬНОЙ ТОЧКИ ПОВОРОТА С ПОМОЩЬЮ ВАРИАЦИОННОГО ПОДХОДА	

СЕКЦИЯ «ГРУППОВОЙ АНАЛИЗ»

Багдерина Ю.Ю.	314
СИММЕТРИИ СКАЛЯРНОГО ОДУ ВТОРОГО ПОРЯДКА И ДВУМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ ГЕОДЕЗИЧЕСКИХ	

Макаримова Э.М.	315
ЭВАРИСТ ГАЛУА И ГРУППА ПОДСТАНОВОК	

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЭКОНОМИКЕ»

Бекмурзина Г.Р., Смирнова Е.А.	316
МОДЕЛИРОВАНИЕ СОЦИАЛЬНО-ЭКОНОМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСНОЗНАЧНЫМИ МОДЕЛЯМИ	

Буцык О.А.	317
МОДЕЛИ ФОРМИРОВАНИЯ ОПТИМАЛЬНОГО ПОРТФЕЛЯ ЦЕННЫХ БУМАГ	

Хамитов И.Ш.	318
ПРОБЛЕМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИНАМИКИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНЫХ ФОНДОВ	

Мухамадиева А.И.	319
АНАЛИЗ ВРЕМЕННЫХ СВЯЗЕЙ И КОРРЕЛЯЦИЙ БИРЖЕВЫХ ИНДЕКСОВ МЕЖДУНАРОДНЫХ КОМПАНИЙ	

Мальшева К.А.	320
РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ НЕЧЕТКОЙ ЛОГИКИ С ПОМОЩЬЮ ПАКЕТА FUZZY LOGIC TOOLBOX МАТЛАВ	

Суфьянова И. М.	321
КОЛЕБАНИЕ РЫНОЧНЫХ ЦЕН	

Тимофеева К.А.	322
О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДИНАМИКИ КУРСОВ ВАЛЮТ	

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ»

Асадуллина Д. И.	323
ТРЕБОВАНИЯ К ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЕ УПРАВЛЕНИЯ САЙТОМ ДЛЯ ONLINE ОБРАЗОВАНИЯ МАТЕМАТИКЕ СТУДЕНТОВ, ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ ОБЩЕПРИМЕНЯЕМЫХ МЕТОДОВ ПРЕПОДАВАНИЯ	
Атнагулов А. И., Павленко В.А.	324
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ДИСТАНЦИОННОГО ОБРАЗОВАНИЯ В РАБОТЕ СО СТУДЕНТАМИ-ОЧНИКАМИ	
Иванова Е.Р., Картак В.М.	325
АВТОМАТИЗАЦИЯ РАБОТЫ ПСИХОЛОГА СРЕДНЕЙ ШКОЛЫ	
Рамазанова Р. Р., Жилко Е. П., Титова Л.Н.	326
ИЗУЧЕНИЕ ТЕМЫ СИСТЕМЫ СЧИСЛЕНИЯ	
Валитов Д.И., Райманова Г.К.	327
МАРКОВСКАЯ МОДЕЛЬ ЗАБОЛЕВАЕМОСТИ САХАРНЫМ ДИАБЕТОМ	
Субботина В. В., Овчаров Е. П.	328
АКТУАЛЬНОСТЬ РАЗЪЯСНЕНИЯ УЧАЩИМСЯ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИКИ	
Расулов А.З., Луценко В. И., Тухватшин В.С., Вакулин И. В.	329
КАЛЬКУЛЯТОР СЛОЖНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ	
Утяшев Ильнур Мирзович	330
ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА О ПРОДОЛЬНОМ УДАРЕ ПО СТЕРЖНЮ	
Аитбаева А.А.	331
ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ЖЕСТКОСТИ ПРУЖИНЫ, УПРУГОГО ЗАКРЕПЛЕННОЙ НА ОДНОМ ИЗ КОНЦОВ БАЛКИ ЭЙЛЕРА – БЕРНУЛЛИ, А ТАКЖЕ МАССЫ И МОМЕНТА ИНЕРЦИИ ГРУЗА, СОСРЕДОТОЧЕННОГО НА ЭТОМ КОНЦЕ	

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ**

**Тезисы докладов
VII Международной школы-конференции
для студентов, аспирантов и молодых ученых**

**12-16 октября 2014 г.
г. Уфа**

*Редактор А.Ф. Файзуллина
Корректор А.И. Николаева*

*Лицензия на издательскую деятельность
ЛР № 021319 от 05.01.99 г.*

Подписано в печать 2.10.2014 г. Формат 60x84/16.
Усл. печ. л. 20,93. Уч.-изд. л. 21,84.
Тираж 300 экз. Изд. № 215. Заказ 11а.

*Редакционно-издательский центр
Башкирского государственного университета
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*

*Отпечатано на множительном участке
Башкирского государственного университета
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.*