

**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
VIII Международной школы-конференции
для студентов, аспирантов и молодых ученых**

**27 сентября - 1 октября 2015 г.
г. Уфа**

**У ф а
РИЦ БашГУ
2015**

УДК 51+53
ББК 22.1+22.3
Ф94

*Сборник издан при финансовой поддержке РФФИ
(проект № 15-31-10359 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, доцент **В.В. Чернова**;
ассистент **Л.А. Габдрахманова**;
аспирант **А.М. Юрьева**

Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании:
тезисы докладов VIII Международной школы-конференции для студентов,
аспирантов и молодых ученых /отв. ред. Б.Н. Хабибуллин, Е.Г. Екомасов. -
Уфа: РИЦ БашГУ, 2015. - 316 с.

ISBN 978-5-7477-3913-0

В сборнике помещены тезисы докладов участников VIII
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 978-5-7477-3913-0

© БашГУ, 2015

ФИЗИКА

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 519.6

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В СОВРЕМЕННОЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ: ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ

Синицын В.Е.

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

Многие задачи современной теоретической физики сводятся к численному эксперименту или компьютерному моделированию. Характерными примерами являются метод Монте-Карло, различные численные методы решения нелинейных дифференциальных уравнений или нахождения собственных значений разреженных матриц, к которым могут быть сведены задачи теории твердого тела, магнетизма и др. областей науки.

Для практической реализации численного эксперимента доступны различные инструменты. На одном конце спектра находятся специализированные программные комплексы, направленные на решение одной конкретной задачи или узкого класса задач — к примеру, выполнение зонных расчетов методом LDA+U. Альтернативой является использование универсального языка программирования (C/C++, Java или Fortran) и разработка программного комплекса с нуля. Оба варианта не лишены недостатков: специализированные комплексы неуниверсальны и обычно дороги, а разработка с нуля отнимает много времени, причем достичь результатов, сравнимых со «state of the art»-решениями, как правило, не удается.

В связи с вышеперечисленным, представляет интерес «промежуточный» подход — сборка высокоуровневых и вместе с тем достаточно универсальных «блоков» в единый комплекс для постановки численного эксперимента. Такими «блоками», к примеру, могут быть сольверы для больших разреженных матриц или построители гамильтонианов спиновых систем с заданной пространственной структурой. Подобные «блоки» обычно создаются при участии большого числа экспертов из научного сообщества, хорошо отлажены и производительны, но притом бесплатны и доступны в исходных текстах, что позволяет адаптировать их в случае необходимости.

В настоящем докладе будет представлен обзор «промежуточных блоков», доступных для решения широкого класса задач из области теории магнетизма.

РЕЗОНАНСНОЕ УВЕЛИЧЕНИЕ СДС В СОЛИТОННОЙ РЕШЕТКЕ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА ПРИ НЕ ЖЕСТКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Синицын Вл.Е.¹, Овчинников А.С.¹, Бострем И.Г.¹, Кишине Дж.²

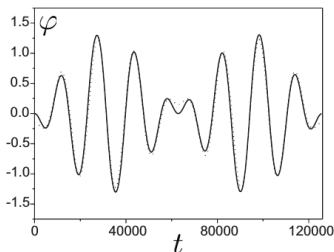
¹Институт естественных наук, УрФУ, Екатеринбург, Россия

²Graduate School of Arts and Sciences, The Open University of Japan, Japan

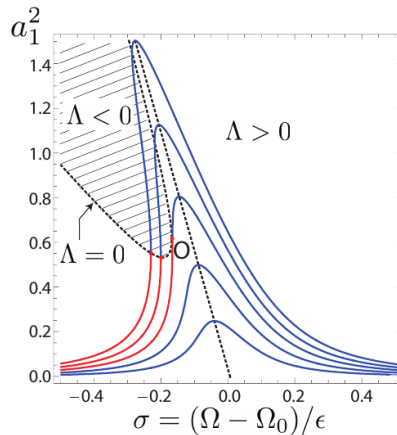
В последние годы наблюдается устойчивый интерес к киральным магнитным системам, в которых антисимметричный обмен Дзялошинского-Мория приводит к появлению геликоидального магнитного порядка с фиксированным направлением вращения моментов (киральностью). Этот интерес вызван, в основном, возможностью наблюдения 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 наномagnetизме и приложениях спинтроники. Преобразование энергии подсистемы локальных моментов в энергию свободных носителей связано с генерацией спин-движущей силы. Генерация спин-движущей силы (СДС) в киральном гелимагнетике с помощью внешнего магнитного поля рассматривалась в работах [5,6].

В качестве последовательного развития проблематики генерации СДС в солитонной решетке, в данной работе мы рассмотрели возможность резонансного увеличения амплитуды колебаний солитонной решетки, под действием приложенного осциллирующего магнитного поля, при не жестких граничных условиях. Такие граничные условия реализуются введение дополнительного магнитного поля, которое удерживает краевые спины и тем самым влияет на систему.



Численный расчет [5.6] для временной зависимости для углов φ и θ демонстрирует появление биений при приближении частоты внешнего поля к резонансной (Рис. 1). Также для различных значений параметров были построены амплитудно-частотные характеристики, как видно из графика они имеют несимметричную форму, характерную для нелинейного резонанса (Рис. 2).



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. J. Kishine, I. G. Bostrem, A. S. Ovchinnikov, and VI. E.Sinitsyn, Phys. Rev. B 86, 214426 (2012).
6. А.С. Овчинников, Вл.Е. Синицын, И.Г. Бострем, Дж. Кишине // ЖЭТФ.— 2013.—Т.143, No5.— С.912-917.

**THIN-SHELL SCHWARZSCHILD-PHANTOM WORMHOLE:
STABILITY ANALYSIS OF SOLUTION**

Lukmanova R.F., Lukmanov A.R., Izmailov R.N. and Yanbekov A.A.
Zel'dovich International Center for Astrophysics,
M. Akmullah Bashkir State Pedagogical University, Ufa, Russia

Wormholes are topological tunnels that connect two universes or two distant regions of spacetime. The subject has received a new impetus after the seminal work by Morris and Thorne [1]. Recently, it has been shown by Lobo, Parsaei and Riazi (LPR) [2] that phantom energy with $\omega = p/\rho < -1$ driving late-time cosmic acceleration could support phantom wormholes. The phantom wormholes are also built of the null energy condition violating exotic matter, and are most likely to be unstable though an exact formulation is still unavailable. Since phantom wormholes are physically very realistic and not born out of cut-paste surgery, the spacetime has repulsive gravity and are most likely to be unstable to perturbations. Hence, we consider a situation, where a phantom wormhole is trapped inside a Schwarzschild sphere across a thin shell. Applying the method developed by Garcia, Lobo and Visser [3], we shall exemplify that the shell can possess zones of stability depending on the several constraints. It turns out that zones corresponding to "force" constraint are more restrictive than those from the "mass" constraint. The formalism was primarily used in Ref [4] for the stability of the thin-shell Schwarzschild-Ellis wormhole. We shall consider a particular class of asymptotically flat LPR phantom wormholes, viz., that of bounded mass gluing it to a vacuum Schwarzschild exterior. The configuration would resemble a gravastar of certain radius having in its interior repulsive phantom matter and a Schwarzschild vacuum in the exterior. For an outside observer, there would therefore be no distinction between a true Schwarzschild mass and a gravastar of this kind.

This work was supported in part by an internal grant of M. Akmullah Bashkir State Pedagogical University in the field of natural sciences.

References

1. M. S. Morris and K. S. Thorne, Am. J. Phys. 56, 395 (1988)
2. F.S.N. Lobo, F.Parsaei, N.Riazi, Rev.D 87, 084030 (2013)
3. N.M. Garcia, F.S.N. Lobo and M. Visser, Phys. Rev. D 86, 044026 (2012)
4. Khaibullina, G.Akhtaryanova, R.Mingazova, D.Saha, R.Izmailov, Int. JTP 53, 1590 (2014).

РЕЗОНАНСНЫЕ КИНК-ПРИМЕСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА С УЧЁТОМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ И ЗАТУХАНИЯ

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

Уравнение синус-Гордона (УСГ) является одним из уравнений, имеющих солитонные решения. Солитон — уединённая волна, сохраняющая свою форму и скорость при движении и столкновениях с другими уединёнными волнами [1]. 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-

УДК 539.391+514.764.2

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ ДЛЯ
КОНЕЧНОГО ЧИСЛА ЗАМКНУТЫХ НУЛЬ-СТРУН
ПОСТОЯННОГО РАДИУСА НАХОДЯЩИХСЯ В ОДНОЙ
ПЛОСКОСТИ И ДВИЖУЩИХСЯ В ОДНОМ НАПРАВЛЕНИИ**

Викулин Д.В., Работягова И.С.

Крымский федеральный университет, г. Симферополь, Россия

Целью работы является построение общего выражения функции распределения потенциала вещественного безмассового скалярного поля для системы из конечного числа замкнутых «размазанных» нуль-струн постоянного радиуса, которые движутся в одном направлении и в каждый момент времени полностью лежат в одной плоскости, ортогональной направлению движения, а также поиск условий на потенциал скалярного поля, при которых, в пределе сжатия компоненты тензора энергии-импульса скалярного поля асимптотически совпадают с компонентами тензора энергии-импульса рассматриваемой системы из конечного числа нуль-струн.

В работе предложен общий вид распределения скалярного поля для системы из конечного числа замкнутых «размазанных» нуль-струн постоянного радиуса движущихся в одном направлении. Найдены условия, при которых, в пределе сжатия, компоненты тензора энергии-импульса скалярного поля асимптотически совпадают с компонентами тензора энергии импульса рассмотренной системы из конечного числа замкнутых нуль-струн.

Следующим этапом станет интегрирование системы уравнений Эйнштейна для найденного распределения скалярного поля и анализ гравитационного поля, порождаемого системой из конечного числа замкнутых нуль-струн, рассмотренной в работе.

Литература

1. [1] Vilenkin A., Shellar E.P.S. Cosmic strings and other topological defects / Cambridge Univers. Press, 1994. 534 p.
2. [2] Peebles P.J.E. Principles of physical cosmology / Princeton University Press, 1994. 850 p.

**ДИНАМИКА И ТРАНСФОРМАЦИЯ ВИХРЕЙ В ПРОВОДЯЩИХ
НАНОСТОЛБЧАТЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ**

Степанов С.В., Екомасов А.Е., Альмухаметов А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Актуальной физической проблемой является разработка нового поколения высокоскоростных и эргономичных электронных устройств. Магнитные наностолбчатые структуры, содержащие в себе вихрь, с недавних пор привлекают к себе большое внимание благодаря возможности их практического применения, в частности, в магнитной памяти или наноразмерных спин-токовых генераторах, излучающих в ГГц-диапазоне, которые планируется использовать в телекоммуникационных приложениях. В настоящее время большой интерес привлекает спин-трансферный наногенератор (СТНГ) СВЧ, который отличается значительной выходной мощностью, небольшой шириной и относительно большим спектром частот, даже без приложения внешнего магнитного поля. Например, исследуется влияние поляризованного электрического тока и магнитного поля на динамику магнитных вихрей, находящихся в двух магнитных слоях, входящих в состав наностолбчатой спин-вентильной структуры [1].

В работе исследуется СТНГ, состоящий из трёх слоёв (пермалловый (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 тока) для различных значений токов и внешнего магнитного поля. Рассмотрены так же случаи одиночных толстого и тонкого слоев пермаллоя. Проведено сравнение известных экспериментальных и численных результатов [1]. Моделирование показало, что динамический, и статический сценарии переключения наблюдаются при различных значениях поля/тока. Показана возможность связанного движения пары вихрей (в тонком и толстых пермалловых слоях) с постоянной угловой скоростью. Найдены частоты таких стационарных колебаний вихрей.

Литература

1. N. Locatelli et al, Appl. Phys. Lett. 98, 062501 (2013).

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ ПЛЕНКЕ¹Мажитова Ф.А., ²Гареева З.В.¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия²Институт физики молекул и кристаллов УНЦ РАН, г. Уфа, Россия

Поверхность раздела двух сред обладает уникальными свойствами, которые могут использоваться для создания новых устройств и элементов [1]. В связи с этим задачи такого рода являются весьма актуальными [2]. В данной работе рассмотрена двухслойная ферромагнитная структура с ферромагнитным и антиферромагнитным взаимодействием спинов в окрестности границы раздела сред. В двухслойной структуре пленки имеют различную толщину и характеризуются естественной кубической и наведенной ростовой магнитной анизотропией. Первый слой имеет наведенную анизотропию типа «легкая плоскость», второй – «легкая ось».

Проведенные исследования показывают что, в области границы раздела сред, возникает электрическая поляризация, обусловленная магнитной неоднородностью. Магнитное поле, приложенное вдоль оси «трудного намагничивания» [010] приводит к вращению поляризации **P** от направления [011] к направлению [010] ([100] - нормаль к поверхности пленки). Поворот поляризации обусловлен конкуренцией между кубической и наведенной анизотропиями пленки. Уменьшение величины кубической анизотропии, приводит к понижению величины порогового магнитного поля, подавляющего электрическую поляризацию.

Вид магнитной неоднородности и связанная с ней электрическая поляризация, а также характер полевых зависимостей электрической поляризации различны для случаев ферро – и антиферромагнитного упорядочения в окрестности границы раздела сред. Пороговые магнитные поля, подавляющие электрическую поляризацию на порядок различаются для пленок с антиферромагнитным (60 кЭ) и ферромагнитным (2.5 кЭ) упорядочением спинов на границе раздела сред.

Литература

[1] Г. Крёмер. «Квазиэлектрическое поле и разрывы зон. Обучение электронов новым фокусам». Нобелевская лекция. УФН, том 172, выпуск 9, 2002.

[2] Nan, C. W., Bichurin, M. I., Dong, S., Viehland, D., Srinivasan, G. J. Appl. Phys. 103(3) (2008) 031101.

ФЛЕКСОМАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ

Халилова Я.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Исследования свойств материалов, в которых имеет место магнитное и электрическое упорядочение, является одним из активно развиваемых в настоящее время направлений в магнетизме. В этих материалах, проявляющих магнитоэлектрические свойства, наблюдается ряд необычных явлений, которые могут быть использованы в микро- и наноэлектронике. К таким материалам относятся и пленки ферритов-гранатов, в которых при комнатных температурах был обнаружен эффект смещения доменных границ (ДГ) под действием неоднородного электрического поля, создаваемого заостренным электродом, поднесенным к поверхности пленки [1]. Для их интерпретации были выдвинуты два альтернативных механизма, объясняющих наблюдаемый эффект: флексомагнитоэлектрический [2], обусловленный наличием в исследуемых пленках неоднородного магнитоэлектрического взаимодействия (НМЭВ), и механизм, предложенный в [3] и не связанный с электрически заряженными ДГ.

В работе рассматривается структура и свойства магнитных неоднородностей в магнетиках с флексомагнитоэлектрическим взаимодействием. Показано, что наличие (НМЭВ) в магнетике приводит к тому, что под действием электрического поля меняется топология 180-градусной ДГ, она из блоховской трансформируется в квазиблоховскую ДГ с выходом намагниченности из плоскости стенки. В результате в ДГ появляются «магнитные заряды», которые способствуют появлению электрической поляризации. Кроме того установлено, что ориентации ДГ относительно кристаллографических осей не меняется, а экспериментально наблюдаемое в [1] утолщение стенки можно объяснить прямым вкладом НМЭВ в структуру доменной границы.

Литература

1. А.С.Логгинов, Г.А.Мешков, А.В. Николаев, А.П.Пятаков // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86.№ 2. С. 124-127.
2. Р.М.Вахитов, А.Т.Харисов, Ю.Е.Николаев //ДАН.2014. Т.455.№2. С.150-152.
3. А.Ф. Кабыченков, Ф.В. Лисовский, Е.Г. Мансветова. // // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. № 5. С. 304-308.

© Халилова Я.А., 2015 г.

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ ДНК ПЕЙРАРА-БИШОПА

Фахретдинов М.И., Закирьянов Ф.К.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Молекула ДНК состоит из двух линейных полимерных цепочек, свёрнутых в двойную спираль и связанных водородными связями. В отличие от сильных ковалентных связей сахарофосфатного остова цепочек ДНК, водородные связи, соединяющие две цепочки, являются слабыми и часто разрываются, образуя так называемые области открытых состояний ДНК [1]. Важность изучения открытых состояний обусловлена тем, что они возникают в самых различных процессах функционирования ДНК, таких как денатурация, транскрипция, конформационные переходы и т.д. Наиболее привлекательной теорией образования таких открытых состояний на сегодняшний день является нелинейная локализация колебательной энергии оснований в виде дискретных бризеров – локализованных в пространстве и периодических во времени возмущений.

Одной из наиболее простых и эффективных теоретических моделей, описывающих процессы локализации энергии в ДНК, является модель Пейрара-Бишопа [2]. Модель Пейрара-Бишопа описывает растяжение водородных связей оснований в ДНК. Решения уравнений движения модели Пейрара-Бишопа в виде дискретных бризеров [3] способны описывать локализацию энергии в молекуле ДНК. В нашей работе получены решения уравнений динамики модели Пейрара-Бишопа в виде односайтовых, двухсайтовых и трёхсайтовых дискретных бризеров [4]. Исследованы их свойства и изучена устойчивость по отношению к малым внешним возмущениям.

Литература

1. Шигаев А. С., Пономарёв О. А., Лахно В. Д. Теоретические и экспериментальные исследования открытых состояний ДНК // Матем. биология и биоинформ. – 2013. – Т. 8 № 2. – Р. 553-664.
2. Peyrard M., Bishop A. R. Statistical mechanics of a nonlinear model for DNA denaturation // Physical review letters. – 1989. – V. 62. – №. 23. – Р. 2755-2758.
3. Фахретдинов М.И., Закирьянов Ф.К. Дискретные бризеры в модели ДНК Пейрара-Бишопа // Журнал технической физики. – 2013. – т. 83, № 7. – с. 1-5.
4. Фахретдинов М. И., Закирьянов Ф.К., Екомасов Е.Г. Дискретные бризеры и мультибризеры в модели ДНК Пейрара-Бишопа // Нелинейная динамика. – 2015. – т. 11. – №. 1. – с. 77-87.

ОСОБЕННОСТИ ГРАВИТАЦИОННОГО МИКРОЛИНЗИРОВАНИЯ КРОТОВЫМИ НОРАМИ ЭЛЛИСА

Кулбакова А.К., Валитова А.Ф., Янбеков А.А., Измаилов Р.Н.

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

Гравитационное линзирование - явление отклонения света в поле тяжести. Одним из режимов гравитационного линзирования является микролинзирование, когда масса линзы порядка массы звезды, позволяющий строить кривые блеска для различных астрофизических объектов. В работе рассматривается гравитационное микролинзирование кротовой норой Эллиса в пределе слабого поля. В этом пределе линзирование кротовой норой производит одно изображение вне кольца Эйнштейна $\hat{\theta}_1$ и другое – внутри $\hat{\theta}_2$ [1].

В работе [2] угол отклонения для кротовой норы Эллиса в пределе слабого поля ($r \rightarrow \infty$) методом Бозза [3] имеет след вид:

$$\alpha(r) = \frac{\pi a^2}{4 r^2} - \frac{7\pi a^4}{64 r^4} + o\left(\frac{a}{r}\right)^6, \quad (1)$$

где a - это радиус горловины кротовой норы. Используя уравнение линзы и радиус Эйнштейна, получим значения внешнего и внутреннего углов $\hat{\theta}_1$ и $\hat{\theta}_2$, соответственно. Параметр зависимости изменения яркости от времени в работе [1] имеет следующий вид

$$A(t) = \left| \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{\hat{\theta}_1^2}\right)\left(1 - \frac{2}{\hat{\theta}_1^2}\right)} + \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{\hat{\theta}_2^2}\right)\left(1 - \frac{2}{\hat{\theta}_2^2}\right)} \right|. \quad (2)$$

В работе проведен сравнительный анализ кривых блеска для черной дыры Шварцшильда и кротовой норы Эллиса, который позволит выявить особенности параметров линзирования данными астрофизическими объектами и поможет отличить их друг от друга.

Литература

1. Abe F. Gravitational microlensing by the Ellis wormhole // The Astrophysical Journal, 2010, v. 725, pp. 787-793.
2. Bhattacharya A. Potapov A. A. Bending of light in Ellis wormhole geometry // Modern Physics Letters A, 2010, v. 25, No. 28. pp. 2399-2409.
3. Bozza V. Gravitational lensing in the strong field limit // Phys. Rev. D, 2002, v. 66, pp. 103001.

РЕЗОНАНСНАЯ ДИНАМИКА ДОМЕННЫХ СТЕНОК В МНОГОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

Абакумова Н.Н., Кудрявцев Р.В., Гумеров А.М., Муртазин Р.Р.,
Васильева Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время часто изучается динамика спиновых волн и магнитных неоднородностей, распространяющихся в системах перпендикулярно границам раздела слоев [3-5]. Отметим, что часто именно изучение одномерных моделей позволяет понять влияние тех или иных магнитных параметров на рассматриваемый процесс. Показано, что наличие тонкого слоя с параметрами магнитной анизотропии меньшей, чем в соседних слоях может приводить, например, к появлению зародыша новой магнитной фазы. В настоящей работе проведено исследование влияния пространственной модуляции параметров магнитной анизотропии и обмена на резонансную нелинейную динамику ДГ в трех- и пятислойном ферромагнетике с учетом возможности возбуждения локализованных магнитных неоднородностей, внутренних мод колебаний ДГ и излучения объемных волн.

Найдены возможные частоты колебаний генерируемых в тонких слоях локализованных магнитных неоднородностей. 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*, **105**(4), 313 (2008)
4. Екомасов Е.Г., Азаматов Ш.А., Муртазин Р.Р., *Физика металлов и металловедение*, **108**(6), 532 (2009)
5. E.G. Ekomasov, R.R. Murtazin, O.B. Bogomazova, A.M. Gumerov, *J. Magn. Magn. Mater.*, **339** (2013) 133.

© Абакумова Н.Н., Кудрявцев Р.В.,
Гумеров А.М., Муртазин Р.Р., Васильева Ю.С., 2015 г.

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ, МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ NI-CO-MN-CR-SN

Смолякова Е.Е., Загребин М.А., Соколовский В.В., Бучельников В.Д.
Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Сплавы Гейслера интересны возникающим в них магнитокалорическим эффектом (МКЭ), а также потенциальной возможностью применять их в качестве интеллектуальных функциональных материалов [1, 2]. Сплавы Гейслера – это интерметаллические соединения с формулой X_2YZ . Дополнительный элемент Z может влиять на характер магнитного и структурного фазового перехода и приводить к последовательности трансформаций из мартенсита с низкой намагниченностью в ферромагнитный аустенит с высокой намагниченностью и лучшими магнитокалорическими свойствами. Исследования влияния Co и Cr на магнитокалорические свойства сплавов $Ni-Mn-X$, проведенные недавно, побудили авторов провести теоретическое исследование, представленное в данной работе [4].

Исходя из первых принципов, рассмотрены Co - и Cr -легированные $Ni_{50}Mn_{39}Sn_{11}$ пятикомпонентные сплавы с замещением по 5% Co для Ni и 5% Cr для Ni , Mn , или Sn . Проведена релаксация энергии по параметру решетки для различных возможных комбинаций направлений магнитных моментов отдельных элементов на элементарной ячейке. Показано, что наименьшей энергией обладает ферромагнитное состояние, а значит оно является основным. Получены равновесные параметры решетки, модули упругости, магнитные моменты, параметры обменного взаимодействия и плотности состояний для различных примесных концентраций Co и Cr . Для вычислений использовался первопринципный пакет $SPR-KKR$ [3].

Литература

1. Buchelnikov V.D., Vasiliev A.N., Koledov V.V., Taskaev S.V., Khovaylo V.V. and Shavrov V.G. Phys.-Usp. **49** (2006) 871-877.
2. Planes A. and Mañosa Ll. Mater. Sci. Forum 512 (2006) 145-152.
3. $SPR-KKR$ package Version 6.3 on <http://ebert.cup.uni-muenchen.de/> M.Khan, J. Jung, S.S. Stoyko, A. Mar, A. Quetz, T. Samanta, I. Dubenko, N. Ali, S. Stadler, and K.H. Chow. Appl, Phys. Lett., 102, 112402 (2013).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОСМОЛОГИЧЕСКОЙ КОНСТАНТЫ НА УГОЛ ОТКЛОНЕНИЯ СВЕТА

Валитова А.Ф., Кулбакова А.К., Янбеков А.А., Измаилов Р.Н.

Башкирский государственный педагогический университет

им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Одной из проблем космологии является то, что значение космологической постоянной Λ бесконечно мало ($\Lambda \leq 10^{-56} \text{ см}^{-2}$) и ее влияние на угол отклонения света не рассматривается. Однако, значение космологической постоянной должно определяться исходя из возраста Вселенной [1].

Целью работы является расчет угла отклонения света при различных значениях космологической константы с учетом зависимости массы линзы от расстояния. Расчет проводился методом, основанном на инвариантной формуле определения косинуса угла ψ между двумя направлениями координат [2] и учитывающем влияние Λ на искривление света. В работе рассматривается сферически-симметричное пространство-время Эйнштейна – Максвелла [1]:

$$ds^2 = e^{v(r)} dt^2 - e^{\lambda(r)} dr^2 - r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta d\phi^2) \quad (1)$$

где $e^{v(r)} = e^{-\lambda(r)} = 1 - \frac{2M(r)}{r}$ – компоненты метрики, $M(r)$ –

гравитационная масса заряженного сферического тела, зависящая от космологической константы $\Lambda = \Lambda(r)$ и радиальной координаты r . В ходе выполнения работы были получены геодезические уравнения в экваториальной плоскости $\theta = \frac{\pi}{2}$ при различных значениях Λ и $M(r)$,

методом возмущений рассчитаны компоненты скорости и определены углы отклонения света при различных значениях Λ и влияние космологической константы на величину угла отклонения света.

Литература

1. Tiwari, R.N. Relativistic electromagnetic mass models with cosmological variable Λ in spherically symmetric anisotropic source // Indian J. Pure Appl. Math, 2000, v. 31, pp.1017-1024.
2. Rindler, W. The contribution of the cosmological constant to the relativistic bending of light revisited // Physical Review D, 2007, v. 76, pp. 043006-043010.

© Валитова А.Ф., Кулбакова А.К., Янбеков А.А., Измаилов Р.Н., 2015 г.

GRAVITATIONAL LENSING PARAMETERS OF SUPER MASSIVE OBJECTS AT THE GALAXY CENTER

Yanbekov A.A., Sultanov I.F., Izmailov R.N. and Lukmanova R.F.
Zel'dovich International Center for Astrophysics,
M. Akmullah Bashkir State Pedagogical University, Ufa, Russia

We want to investigate that instead of a Schwarzschild black hole if there is a wormhole of same mass in the galaxy center and how the post-post-newtonian signatures of a black hole would differ from the signatures of a wormhole. Here we consider a phantom wormhole as a gravitational lens and that the light path lies between the source and observer without making any loops.

Consider the static and spherically symmetric metric given by [1]

$$ds^2 = -e^{2\Phi(r)} dt^2 + \frac{dr^2}{1-b(r)/r} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2) \quad (1)$$

where $\Phi(r)$ - redshift function, $b(r)$ - shape function, which is defined as

$$\Phi(r) = -\frac{r_0}{r}, \quad b(r) = r_0 + \gamma r_0 \left(1 - \frac{r_0}{r}\right), \quad 0 < \gamma < 1 \quad (2)$$

Applying the formalism of Keeton and Petters [2] for the calculating PPN parameters of gravitational lensing and used as a generic universal analytical approach, we define the following parameters: image position, magnification, total magnification, centroid, time delay.

Our goal is to apply a general framework for computing corrections to a core set of observable properties of the primary and secondary lensed images in a general geometric theory of gravity. At the same time, we demonstrate how to handle general gravity theories using PPN terms up to third-order.

We also determine whether the cancellations are generic or restricted to specific families of gravity theories; we show, for example, that the cancellations also occur in all theories of gravity that agree with general relativity in the weak-deflection limit.

References

1. Morris M. S., Thorne K. S., *Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity* // *Am. J. Phys.*, 1988, v. 56, pp. 395-412.
2. Charles R. Keeton, Petters A. O. *Formalism for Testing Theories of Gravity Using Lensing by Compact Objects. I: Static, Spherically Symmetric Case* // *Phys. Rev. D*, 2006, v. 73, 104032-104051

DARK MATTER DENSITY ESTIMATION IN THE EDDINGTON-INSPIRED BORN INFELD GRAVITY

Yafizova R.A, Izmailov R.N.

M. Akmullah Bashkir State Pedagogical University, Ufa, Russia

The issue of dark matter is at the center stage of modern astrophysics. The purpose of this paper is to investigate the stability of circular material orbits in the Eddington-Inspired Born Infeld (EiBI) galactic metric [1]. Stability is exclusively sensitive to the variation of the dark matter central density ρ_0 leading to an upper limit ρ_o^{upper} , such that stable circular orbits in the EiBI are possible only when the constraint $\rho_0 \leq \rho_o^{upper}$. To analyze the stability of circular orbits, one needs to analyze the second-order derivative of the concerned potential. Tangential velocity profile is taken as

$$v_{ig}^2 = v_\infty^2 \frac{\left(\frac{r}{r_{opt}}\right)^2}{\left(\frac{r}{r_{opt}}\right)^2 + r_0^2} \quad (1)$$

where r is the standard radial coordinate, r_{opt} is the optical radius containing 83% of the galactic luminosity. The parameter r_0 is defined as the ratio of the halo core radius and r_{opt} and v_∞ is the asymptotic constant velocity.

To approximately quantify ρ_o^{upper} , we consider our own Milky Way galaxy as an example. We can take the dark matter radius to be ~ 180 kpc. Calculation then yields a value $\rho_o^{upper} = 2.37 * 10^{11} M_{Sun} kpc^{-3}$. The actually fitted latest data on central density are $\rho_o^{Milky Way} = 4.13 * 10^{11} M_{Sun} kpc^{-3}$ (Burkert profile) and $1.40 * 10^7 M_{Sun} kpc^{-3}$ (NFW profile). In both cases, we see that ρ_o^{upper} is about four orders of magnitude larger than the above fitted values of ρ_0 , confirming the inequality $\rho_0 \leq \rho_o^{upper}$.

References

1. Harco T., Lobo F. S. N., Mak M. M., Sushkov S. V. Dark matter density profile and galactic metric in Eddington-inspired Born-Infeld gravity // Mod. Phys. Lett. A, 2014, v. 29, 1450049-1450062

© Yafizova R.A, Izmailov R.N., 2015.

УПРАВЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЕМ КИНКОВ В НЕОДНОРОДНОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ ДНК

Балашова В.Н.¹, Закирьянов Ф.К.¹, Якушевич Л.В.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Институт биофизики клетки РАН, Пушкино, Россия

Изучение механизмов управления динамическими режимами, возникающими в молекуле ДНК под действием различных внешних факторов, – одно из наиболее интересных и важных направлений в молекулярной биофизике, связанных с вопросами управления процессами жизнедеятельности клеток и клеточных систем. В то же время актуальность данных исследований связана и с перспективностью использования ДНК в качестве элементной базы будущей нанобиоэлектроники. Согласно концепции электронно-конформационного взаимодействия, изменение зарядового или электронного состояния системы приводит к изменению конформации, что в свою очередь индуцирует изменение электронного состояния. Следовательно, управляя конформационной динамикой молекулы ДНК, можно влиять на её проводящие свойства. Амплитуды конформационных движений относительно велики. Поэтому для их теоретического описания используются нелинейные уравнения математической физики.

Цель данной работы – проверить (подтвердить или опровергнуть) возможность управления движением нелинейной конформационной волны – кинка, в молекуле ДНК. Основной метод исследования – метод компьютерного моделирования. В качестве модели ДНК мы использовали модифицированное уравнение синус-Гордона с двумя дополнительными слагаемыми: первое имитирует процессы диссипации, второе – внешнее воздействие.

Нами была проведена серия компьютерных экспериментов для различных типов внешнего воздействия и для разных видов последовательностей азотистых оснований в ДНК. Выявлены основные закономерности, регулирующие движение кинка, и получен положительный ответ на вопрос – можно ли управлять движением кинка в ДНК.

**ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И
КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В НАНОПЛЕНКАХ
МУЛЬТИФЕРРОИКОВ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО**

Нугуманов А.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Магнитоэлектрический эффект и в нанопленках и массивных мультиферроиках представляет огромный интерес и активно обсуждается в научной литературе в настоящее время [1]. Мультиферроиками называют кристаллические структуры, в которых в определенном интервале температур возможно сосуществование магнитных, сегнето-электрических и упругих свойств. Однако в микроскопическом понимании природы этих явлений по-прежнему остается масса нерешенных вопросов, на решение некоторой части которых и направлено данное исследование. Представленная работа посвящена изучению магнитных свойств и построению теории динамических взаимодействий в нанопленках мультиферроиков. Эти структуры обладают специфическими поверхностными эффектами, имеющими огромные возможности практического применения [2], а причиной этого является очень сильная зависимость магнитных свойств в магнитных наноматериалах и нанопленках от отношения числа поверхностных атомов к общему числу атомов в системе [3].

Мы исходим из гамильтониана одноосного анизотропного мультиферроика, состоящего из двух эквивалентных магнитных подрешеток, в котором учитываем однородное обменное взаимодействие, анизотропию, магнитоэлектрическое взаимодействие, влияние внешнего магнитного поля. Для вычисления различных физических величин и их поведения в области фазовых переходов мы применяем моделирование квантовым методом Монте-Карло [4].

Литература

1. K. Prashanthi, V.R. Palkar. Investigation of magnetoelectric effect in novel multiferroic thin films for MEMS applications // Applied Electromagnetics Conference (AEMC 2009) (2009).
4. H.T. Diep. Quantum Effects in Antiferromagnetic Thin Films // Phys. Rev. B 43, 8509 (1991).
5. C.R. Tellier, A.J. Tossier, G. Siddall. Size Effects in Thin Films. // Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam-Oxford-New York, 310 p (1982).
6. M.E.J. Newman, G. T. Barkema. Monte Carlo Methods in Statistical Physics // Clarendon Press, Oxford (2002).

© Нугуманов А.Г., 2015 г.

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОФИЗИКА»

УДК 537.622:537.326

АНАЛИЗ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛН ЛЭМБА В КРИСТАЛЛЕ

FeVO_3

Адамова М.Е., Жуков Е.А.

Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия

В данной работе исследовались спектры упругих волн Лэмба в FeVO_3 с учетом ромбоэдрической анизотропии кристалла и граничных условий. В результате численного решения дисперсионных уравнений был построен частотный спектр волн Лэмба, представляющий зависимость между угловой частотой волны ω и ее волновым числом k . Также, на основе известных соотношений для фазовой и групповой скоростей $V_{ph}=\omega/k$ и $V_{gr}=d\omega/dk$ были построены зависимости $V_{ph}(\omega)$ и $V_{gr}(\omega)$ (Рис. 1).

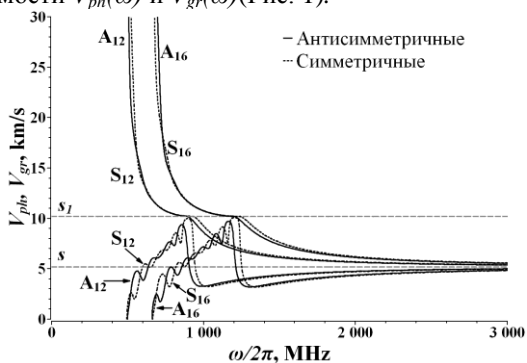


Рис. 1. Зависимости $V_{ph}(\omega)$ и $V_{gr}(\omega)$ для мод A_{12} - S_{12} и A_{16} - S_{16}

Согласно [1] диссипативная функция, описывающая передачу энергии, обратно пропорциональна разности фазовой и групповой скоростей. Тогда максимальное излучение энергии должно соответствовать участкам с линейным законом дисперсии, то есть при $V_{ph} \approx V_{gr}$. На Рис. 1 видно, что при $k \rightarrow \infty$ кривые групповой и фазовой скоростей асимптотически стремятся к скорости медленной поперечной упругой волны $s = 5,2$ км/с. Также групповая скорость наиболее близка к фазовой в районе скорости продольной волны $s_l = 10,2$ км/с. Наиболее явно это выражено для мод высших порядков, что говорит о повышении вероятности генерации волн с данной скоростью распространения.

Литература

[1] Барьяхтар В.Г., Иванов Б.А., Четкин М.В. Динамика доменных границ в слабых ферромагнетиках // УФН. – 1985. – Т. 146. – № 3. – С. 417–458.

УДК 537.622:537.326

СКОРОСТЬ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В $YFeO_3$ ПРИ ЕЁ ДВИЖЕНИИ В ПОСТОЯННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Комина О.Ю., Жуков Е.А., Щербаков Ю.И.

Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия

В работе представлены экспериментальные результаты по исследованию динамики доменной границы (ДГ) при её движении в кристаллических пластинках $YFeO_3$ с приложенными продвигающим и постоянным магнитными полями [1].

На рис. 1 приведены зависимости скорости V_m ДГ от частоты f управляющего магнитного поля с амплитудой $H_m = 36$ Э при применении постоянного магнитного поля под углом 50° к плоскости образца (рис. 1, а) с величинами полей $H = 12$ Э (нижний график) и 18 Э (нижний график), а также перпендикулярно образцу (рис. 1, б) с величинами полей $H = 8$ Э (нижний график) и 14 Э (нижний график).

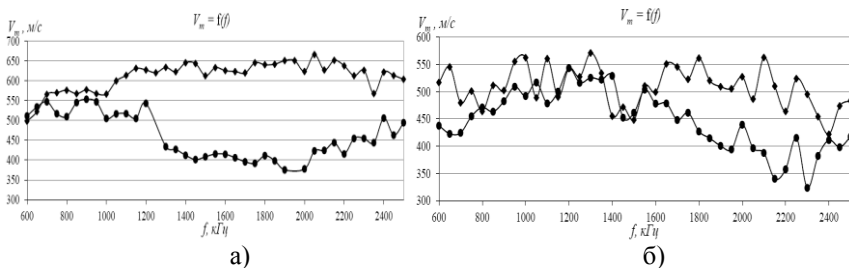


Рис. 1. Графики зависимостей $V_m = f(f)$

Итак, из графиков видно, что скорость ДГ V_m увеличивается в обоих случаях воздействия внешнего поля H . Однако, явная зависимость возрастания скорости ДГ с увеличением внешнего постоянного поля наблюдается только в случае приложения поля под углом 50° к плоскости образца.

[1] Adamova M.E., Zhukov E.A., Kaminsky A.V., Komina O.Yu., Kuz'menko 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. – V. 6. No. 3, 2014. – P. 03053 (2 pp).

АРТЕФАКТЫ, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МОЛЕКУЛ ДНК МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Акбутин Г.Д., Шарипов Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее время стали бурно развиваться исследования, в которых в качестве конструкционного материала для создания наноструктур используются природные макромолекулы, в частности ДНК. Это обуславливается уникальностью и перспективностью молекул ДНК как объект, который может иметь широкое применение, например в биосенсорах. Однако, при изучении особенностей молекул ДНК, иммобилизованных на поверхности слюды, возникают некоторые артефакты.

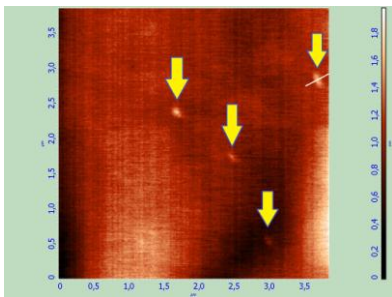


Рис.1. АСМ-изображение молекул ДНК, иммобилизованных на слюде

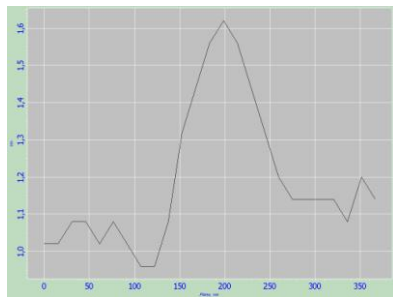


Рис.2. Профиль поперечного сечения по линии, проведенный на рис.1

На рис. 1 наблюдается светлые объекты (указано стрелкой). Это предполагаемые молекулы ДНК. Рассмотрим профиль поперечного сечения молекул (рис. 2). Видно, что ДНК имеет высоту 0,5 нм и ширину 75 нм. Из этих параметров видно, что ширина профиля молекулы имеет завышенное, а высота заниженное значение. Это можно объяснить так называемым "эффектом уширения"[1] и "эффектом занижения"[2].

Литература

1. Галлямов М.О. СЗМ нуклеиновых кислот и тонких органических пленок. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. - М. МГУ, 1999. - 11 с.
2. Z. Shao, J. Mou, D. M. Czajkowsky, J. Yang, and J.-Y. Yuan, Biological atomic force microscopy: what is achieved and what is needed // Advances in Physics, 1996, v. 45, No 1, pp. 1-86.

© Акбутин Г.Д., Шарипов Т.И., 2015 г.

УДК 538.911

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ МОНОАТОМНЫХ СЛОЕВ ГРАФЕНА И НИТРИДА БОРА

Беленков М.Е., Чернов В.М.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Разработка в последние годы технологий получения моноатомных слоевых соединений с различными проводящими свойствами от диэлектрических до металлических открывает перспективы получения новых гетероструктур для использования в электронных устройствах. Новые гетероструктуры могут формироваться за счет вандерваальсовых связей между моноатомными слоями различного химического состава. Кристаллические решетки монослоев различного состава как правило не соразмерны. Это накладывает ограничения на возможности получения тех или иных гетероструктур, а также определяет их свойства. В данной работе выполнены модельные расчеты гетероструктур состоящих из двух слоев - графенового слоя, обладающего металлическими свойствами и диэлектрического слоя нитрида бора.

Расчеты гетероструктур были выполнены молекулярно-механическим методом атом-атомного потенциала. Были исследованы бинарные слоевые гетероструктуры при различных относительных сдвигах и разворотах пар слоев друг относительно друга. В результате установлено, что из-за несоразмерности кристаллических решеток графенового слоя и слоя нитрида бора в бинарной гетероструктуре возникает сверхструктура со значительно большим периодом структуры, чем у каждого слоя по отдельности. Это является причиной возникновения в бинарной C-VN гетероструктуре узоров муара. Соразмерность периодов трансляции соседних слоев в гетероструктуре частично достигается за счет небольшого волнообразного изгиба - гофрирования каждого из моноатомных слоев. Изменение структуры монослоев при их взаимодействии должно приводить к изменению электронной структуры, что будет проверено в результате дальнейших расчетов первопринципными квантово-механическими методами.

Апробированная в данной работе методика моделирования гетероструктур, состоящих из различных моноатомных слоев, позволяет выполнять теоретические расчеты для прогнозирования структуры новых соединений и предсказания возможности их существования.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОАНТЕНН ДЛЯ ЗАЩИТЫ ОТ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Полетаев Д.А.

Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского
г. Симферополь, Россия

В настоящее время одним из важнейших аспектов обеспечения межпланетных путешествий является защита экипажа и оборудования от космических лучей 90 % которых составляют высокоэнергетические заряженные частицы (ВЗЧ) [1]. Существующие разработки данной области содержат многослойные покрытия и системы возбуждения искусственного магнитного поля. Однако данные конструктивные элементы слишком громоздки для транспортировки в космос. Представляется целесообразным провести анализ возможности применения наноматериалов для защиты от ВЗЧ. Целью работы является анализ возможности применения наноматериалов в качестве элемента защиты от ВЗЧ.

Наноантенны [2] способны взаимодействовать с электромагнитными волнами вплоть до оптического диапазона. Электромагнитная волна, падая на наноантенну, вызывает образование разности потенциалов на проводящем участке, приводящее к протеканию электрического тока. Представляется целесообразным использовать это явление для защиты от ВЗЧ.

Согласно гипотезе, ВЗЧ, пролетая мимо проводящего контура, вызывает возбуждение электрического тока, что, в свою очередь, производит магнитное поле, взаимодействующее с частицей, которая его возбудила. Проведенный теоретический расчет показывает возможность отклонения движения ВЗЧ от первоначального направления за счет применения наноструктур – объект, располагающийся после наноматериала не испытывает действие ВЗЧ, вследствие их отклонения.

Литература

1. Gaisser T.K. Spectrum of cosmic-ray nucleons, kaon production, and the atmospheric muon charge ratio // *Astropart. phys.* – 2012. – № 35. – pp. 801 – 806.
2. Bonanno A., Crepaldi M., Demarchi D. A 0,13 μm CMOS operational schmitt trigger r-to-f converter for nanogap-based nanosensors read-out // *IEEE transactions on circuits and systems.* – 2013. – № 4, vol. 60, pp. 975 – 988.

УДК 621.81

**СООТНЕСЕНИЕ ПИКОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ
ПОЛИАНИЛИНА, ПОЛУЧЕННОГО ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ
ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ АНИЛИН-ЗАМЕЩЁННЫХ
ТИАКАЛИКСАРЕНОВ**

Горбачук В.В., Стойков И.И., Ризванов И.Х.

Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

В настоящее время активно разрабатываются подходы к программируемому на молекулярном уровне синтезу электропроводящих полимеров с заданными свойствами. Главной причиной повышенного интереса учёных к данному направлению является непосредственная взаимосвязь между структурой мономеров, олигомеров, полимерных цепей и свойствами материалов, получаемых на их основе, такими как электропроводность, магнитные свойства и другие. Для определения структурных параметров используется комплекс физических и физико-химических методов. Особенно следует отметить методы, относящиеся к масс-спектрометрии, в настоящее время используемые для характеристики побочных продуктов окислительной полимеризации и для определения точной структуры основных продуктов электропроводящих олигомеров.

Для подбора структур, соответствующих масс-спектрам синтезированных полимеров, был использован многопараметрический метод. На основе сходимости с результатами (порядка 100-200 значений масс молекулярных ионов), полученными методом масс-спектрометрии, выбор был остановлен на наименьшем количестве структурных звеньев (и соответственно параметров), позволяющих обеспечить соответствие структур олигоанилинов наблюдаемым пикам молекулярных ионов.

Соответственно, были определены три основные структурные единицы полианилина: хинондиимин, диаминобензол, диамино хинон, в случае же полимеров, полученных на основе производных тиакаликсарена, показано, что введение макроциклических фрагментов не повышает сходимость модели с экспериментальными данными. Данный факт с точки зрения химии можно объяснить гидролитической диссоциацией амидных фрагментов, соединяющих звенья производных анилина с платформой тиакаликсарена.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения базовой части государственного задания в сфере научной деятельности.

АЛМАЗОПОДОБНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ ФАЗЫ И ИХ МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Рысаева Л.Х.^{1,2}, Баимова Ю.А.², Дмитриев С.В.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия,

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

Углеродные алмазоподобные фазы (УАФ) можно получить сшивкой углеродных каркасов фуллереноподобных молекул, тем самым образуя между некоторыми атомами углерода соединения с координационным числом 4 и электронными конфигурациями близкими к sp^3 . Исходная структура исследуемого УАФ представлена на рис. 1. Отметим, что в плоскостях xz и yz структура УАФ такая же как и в плоскости xy , то есть кристалл имеет кубическую симметрию.

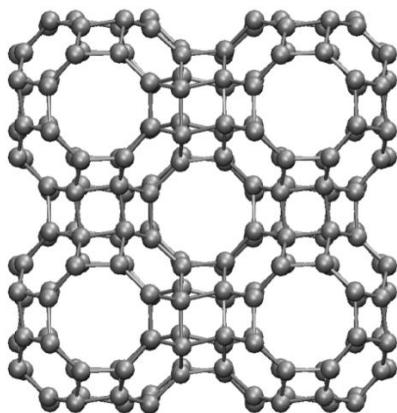


Рис. 1. Исходная структура углеродной алмазоподобной фазы после релаксации.
Показана трансляционная ячейка кристалла кубической симметрии

После анализа результатов, в некоторых УАФ были найдены свойства ауксетика, что дает новые возможности в изучении и применении новых материалов.

Литература

1. В.А. Грешняков, Е.А. Беленков, В.М. Березин. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз // Челябинск: ЮУрГУ, 2012 – 150с.

**ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ В
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ**

Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Нанокристаллические (НК) материалы представляют большой научный и практический интерес из-за их необычных физических свойств. Для получения материалов с НК структурой часто применяют методы интенсивной пластической деформации (ИПД). При этом в материале образуется кристаллографическая текстура, которую необходимо учитывать для правильной интерпретации экспериментальных результатов. В данной работе приведены результаты исследований кристаллографической текстуры в НК кобальте, полученном ИПД кручением. Исследования проведены на рентгеновском дифрактометре ДРОН-7 на $\text{Co K}\alpha$ -излучении. В работе изучены интегральные интенсивности линий в зависимости от температуры отжига и полюсные фигуры.

Установлено, что линия (101) имеет максимальную интенсивность как для образца в виде порошка, так и для образца после пластической деформации. Однако линия (002) для порошка имеет интенсивность 27%, а для образца после пластической деформации – 82%. Это свидетельствует о том, что при пластической деформации плоскости кристаллитов (002) преимущественно ориентируются перпендикулярно направлению деформации. Так же в результате ИПД наблюдается уменьшение интенсивности линии (100) и увеличение интенсивности линии (103). Полученные результаты свидетельствуют о том, что при пластической деформации кобальта образуется кристаллографическая текстура.

В работе показано, что интегральные интенсивности линий (002), (103), (112), (102) и (100) с повышением температуры отжига до $T \sim 300^\circ\text{C}$ плавно увеличиваются (рис. 1). Мы полагаем, что этот рост связан, в основном, с возвратом, т.к. при возврате в результате совершенствования кристаллической структуры возрастает интенсивность всех линий. Интенсивность линии (100) в этом интервале температур меняется незначительно. В интервале температур $25 \div 450^\circ\text{C}$ рост интенсивности линии (002) коррелирует с уменьшением интенсивности линии (101). Данную зависимость мы связываем с образованием текстуры в образце в результате ИПД. Таким образом, полученные результаты показывают, что при пластической деформации в кобальте образуется текстура с преимущественной ориентацией кристаллографических плоскостей (002) перпендикулярно к направлению прессования.

Для подтверждения выводов, полученных выше, нами были проведены исследования полюсных фигур пластически деформированного кобальта. Из

полученных полюсных фигур следует, что при пластической деформации происходит преимущественная ориентация осей [002] кристаллитов параллельно направлению приложенной нагрузки (перпендикулярно к плоскости образца) и под углом $\varphi \sim 75^\circ$ к направлению прессования. Перпендикуляры к плоскостям (100), (101) и (110) ориентированы преимущественно нормально к оси прессования с большим углом рассеяния $\Delta\varphi \sim \pm 45 \sim 60^\circ$.

Таким образом, результаты исследований полюсных фигур подтверждают выводы, полученные при изучении интегральных интенсивностей дифракционных линий.

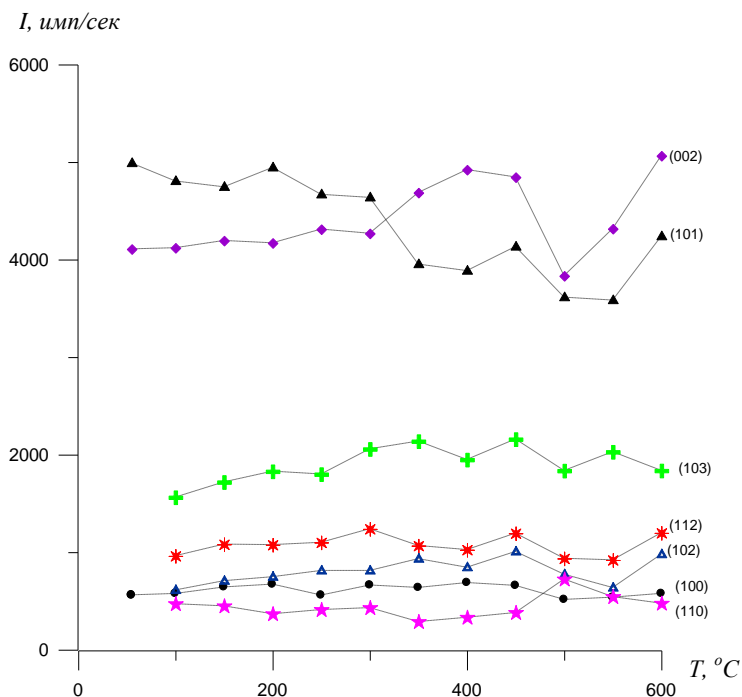


Рис. 1. Зависимость интегральной интенсивности дифракционных линий НК кобальта от температуры отжига

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ПЕРОКСИДОМ КАЛЬЦИЯ

Гайнетдинова Ю.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Тяжелые металлы и их соединения — широко распространенные промышленные загрязнители. Они попадают в окружающую среду со сточными водами, газообразными отходами промышленных предприятий, выхлопами автотранспорта и т.д. Наиболее опасными среди них являются: **свинец, ртуть, кадмий.**

Тяжелые металлы, попадая в окружающую среду, негативно влияют на экологическую систему «водоем – почва – растительный и животный мир – человек», поэтому необходима глубокая очистка воды перед использованием для хозяйственно-бытовых целей.

Согласно литературным данным, в настоящее время наряду с кристаллизацией, коагуляцией и др. методами очистки воды применяется и сорбция с использованием в качестве сорбентов углеродных материалов, оксидов металлов и др.

Однако в этой области, несмотря на широкое использование сорбции, существует ряд проблем: недостаточная сорбционная емкость материалов, отсутствие надежных способов регенерации, способов утилизации тяжелых металлов из отработанных сорбентов и др.

В связи с этим актуальным является синтез и применение для очистки вод новых видов сорбентов, с помощью которых можно очищать воду.

Целью настоящей работы явилось изучение сорбционных свойств синтезированного на кафедре физической химии и химической экологии пероксида кальция по отношению к ионам тяжёлых металлов: Cu(II), Cd(II), Ni(II) и Pb(II), а также установление факторов, влияющих на данный процесс.

Установлены оптимальные условия сорбции на пероксиде кальция для сорбционного извлечения вышеуказанных катионов металлов – меди (II), свинца (II), никеля (II), кадмия (II): pH 5,0 -6,0; время установления сорбционного равновесия – 10 минут, температура – 30⁰С, масса сорбента 1,5 г на 25 мл раствора.

Установлено, что пероксид кальция обладает высокими сорбционными свойствами по отношению ко всем изученным катионам металлов, при этом значения степеней извлечения Cd (II) выше на пероксиде кальция, чем на указанных выше сорбентах, что позволяет сделать вывод о том, что пероксид кальция как химический продукт является весьма привлекательным для применения на практике.

УДК 631.811

НАНОРАЗМЕРНЫЙ ГЕТИТ В СОСТАВЕ ПИТАТЕЛЬНОЙ СМЕСИ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ СОДЕРЖАНИЯ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ В РАСТИТЕЛЬНЫХ ТКАНЯХ

Юнусова А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Производство удобрений – это одна из важнейших отраслей химической промышленности. Это связано с тем, что выращивание высоких и устойчивых урожаев растений с высококачественной по питательным свойствам растительной продукции без применения минеральных удобрений невозможно вследствие естественного вымывания из почвы питательных веществ.

Целью настоящей работы явилось изучение влияния питательной смеси, содержащей смесь наноразмерного гетита, стабилизированного аскорбатом натрия, дигидрофосфата кальция, мочевины в различных соотношениях на процессы всхожести семян фасоли зерновой, а также исследование содержания глутаминовой кислоты при этом.

Следует отметить, что фасоль зерновая содержат большое количество глутаминовой кислоты. Однако по мере роста и развития в процессе всхожести семян происходит изменение содержания аминокислоты в растительных тканях. При этом уменьшение содержания глутаминовой кислоты приводит к потере всхожести семян, поэтому необходимо поддерживать высокую концентрацию указанного вещества в период прорастания. Применение питательных смесей в процессе всхожести семян способствовало бы решению данной проблемы.

Результаты исследований показали, что наибольшее содержание глутаминовой кислоты наблюдалось в пророщенных семенах фасоли при соотношении наноразмерный гетит : мочевина : дигидрофосфат кальция - 1:1:100. При этом содержание глутаминовой кислоты достигло около 10 мг/л, что превысило содержание глутаминовой кислоты в контрольных опытах, при проведении которых использовались питательные смеси, не содержащие наноразмерный оксид железа (3+).

На основании результатов экспериментов можно рекомендовать использовать в качестве питательной смеси - смесь наноразмерный гетит: мочевина : дигидрофосфат кальция - 1:1:100.с целью создания более благоприятных условий для развития и прорастания семян фасоли, а также оптимизации аминокислотного состава по содержанию глутаминовой кислоты, которая выполняет особую роль при прорастании семян бобовых растений.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЧЕСКОГО И
ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА
ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА**

Киан М., Юсупов А.Р., Сатыев А.И.

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

Изучение влияние внешних воздействий на свойства органических диэлектриков вызывает повышенный интерес. Это связано в первую очередь с эффектами электронного переключения, которые можно стимулировать внешними воздействиями. Так в работе [1], было показано, что в тонких пленках полимера полидифениленфталида наблюдается эффект переключения в высокопроводящее состояние под действием одноосного механического давления. Какова природа такого переключения, в настоящее время, сказать сложно. Поэтому целью данной работы является изучения влияния давления на электрофизические параметры молекул полидифениленфталида.

Определение влияния давления на электрофизические параметры было проанализировано на основании двух подходов. 1. Изменение механического одноосного давления. 2. Изменение гидростатического давления (измерения проводились в барокамере).

Измерения вольтамперных характеристик, при различных значениях давления, проводились на образцах, толщиной меньше критического значения. Установлено, что при воздействии на образец гидростатическим давлением выходной ток изменяется, но по сравнению с одноосного механического давления, это изменение, незначительно. Также установлено, что в случае гидростатического давления, переключения образца в высокопроводящее состояние не наблюдается. Ток увеличивается с повышением гидростатического давления до некоторого максимального значения. В случае одноосного механического давления, при достижении порогового значения давления [1], образец переключается в высокопроводящее состояние.

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.

**РАЗРАБОТКА ВАКУУМНОГО ТЕРМОСТАТА ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ
ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ**

Сатыев А.И., Набиуллин И.Р., Гадиев Р.М., Киан М.

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

В современной электронике ведется активное внедрение всевозможных органических материалов. В связи с этим, их исследование является востребованным и актуальным. Известно, что в различных органических материалах важную роль в электрофизических свойствах играет наличие электрически активных ловушечных состояний и их распределение, которые в свою очередь обуславливают протекание тока через данные материалы.

Одним из основных методов исследования энергетического распределения ловушечных состояний в объеме диэлектрических и полупроводниковых органических материалов является метод термостимулированной токовой спектроскопии. Исходя из этого, цель работы заключалась в разработке вакуумного термостата для изучения температурных зависимостей электрофизических свойств органических материалов.

Изготовленный термостат состоит из следующих основных элементов: металлический корпус, система охлаждения (проточная), нагреватель, столик, термопара, контактные выводы, смотровое окно и система откачки воздуха.

Нагревательный элемент был изготовлен из нихромовой проволоки в виде спирали и позволял производить нагрев термостолика до $+200^{\circ}\text{C}$. Регистрация температуры в ячейке осуществляется термопарой, присоединенной к столику в рабочем объеме. Термостолик установлен на хладопроводе, который соединен с проточной системой охлаждения. В качестве охлаждающий жидкостей можно использовать различные вещества, например, воду или жидкий азот.

Чтобы исключить влияние агрессивной окружающей среды и процессов конденсации на образце предусмотрена система откачки воздуха. В разработанном термостате для обеспечения вакуума использовали форвакуумный насос 2НВР-5ДМ, который позволял получать давление в рабочей камере порядка $P_{\text{раб}} \approx 5$ Па. Уровень вакуума регистрировался при помощи манометрического термопарного преобразователя ПМТ-2. Так же предусмотрены контактные выводы для подключения приборов.

**РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ БИНАРНЫХ ГРАФАНОВЫХ СЛОЕВ НА
ОСНОВЕ СЛОЕВ ГРАФЕНА L₄₋₈, L₄₋₆₋₁₂ и L₃₋₁₂**

Абдрахманов Э.К., Грешняков В.А., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Графановыми слоями, как правило, называют монослои из углеродных атомов в состоянии sp^3 гибридизации с присоединенными к ним неуглеродными атомами водорода, фтора, кислорода и др. Возможно ли существование слоевых соединений только из углеродных атомов в четырехкоординированных состояниях, до сих пор остается предметом дискуссии. В данной работе выполнены теоретические расчеты структуры графановых слоев, состоящих только из углеродных атомов.

Графановые слои модельно получали в результате сшивки пар графеновых слоев L₄₋₈, L₄₋₆₋₁₂ и L₃₋₁₂. В результате сшивки каждый атом графеновых слоев образовывал новую дополнительную связь с атомом соседнего слоя, в результате чего все атомы из состояния sp^2 гибридизации переходили в sp^3 гибридизованные состояния и получались бинарные графановые слои. Сшивка пар графеновых слоев выполнялась при различных относительных сдвигах – в результате получались графановые слои с различной структурой. После модельного построения графановых слоев выполнялась их геометрическая оптимизация методом молекулярной механики ММ+.

В результате выполненных модельных исследований была рассчитана структура пяти бинарных графановых слоев: один слой на основе графена L₃₋₁₂, по два слоя на основе L₄₋₈ и L₄₋₆₋₁₂. В структурах всех графановых слоев наблюдаются по две отличающихся кристаллографических позиций атомов, так как после оптимизации структуры половина атомов каждой из двух сшиваемых графеновых плоскостей сместилась в направлениях, перпендикулярных этим изначальным плоскостям. Длины межатомных связей в графановых слоях изменяются от 1.391 до 1.887 Å, тогда как углы между связями находятся в диапазоне от 59.8 до 141.2°. Углы между связями в графановых слоях существенно отличаются от угла 109.47° между связями в структуре кубического алмаза, что указывает на наличие значительных напряжений. Напряжения структуры графановых слоев характеризовали деформационным параметром Def, который рассчитывали как сумму модулей отклонения углов между связями в слоях графана от угла между связями в алмазе. Значение параметра Def для исследованных бинарных графеновых слоев изменяются в диапазоне от 22.25 до 41.75°.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СЛОЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ДВУХ- И ТРЕХКООРДИНИРОВАННЫХ АТОМОВ УГЛЕРОДА, ПОЛУЧАЮЩИХСЯ ИЗ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ L_{4,8}

Беленкова Т.Е., Чернов В.М.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Соединения углерода, состоящие из атомов в состояниях sp и sp^2 гибридизации называемые графинами (graphyne) вызывают значительный интерес потому, что как показывают теоретические расчеты в их электронной структуре должны быть конусы Дирака. Согласно теоретическим исследованиям выполненным ранее установлена возможность существования семи основных структурных разновидностей графеновых слоев модельно получаемых из слоев гексагонального графена L₆ [1,2]. В данной работе выполнен теоретический анализ и расчет структуры и электронных свойств основных структурных разновидностей графина, которые можно получить на основе графеновых слоев L_{4,8}.

Модельно слои графина могут быть получены в результате замены части или всех углерод-углеродных связей в графеновых слоях на фрагменты карбиновых цепочек полииновой структуры, содержащих четное число атомов [3]. Основные структурные разновидности α , β , и γ модификаций, получаются в результате замены трех, двух и одной связи у каждого атома на карбиновые цепочки соответственно. Теоретический анализ показал, что из графеновых слоев L_{4,8} могут быть получены семь новых структурных разновидностей графина. Геометрическая оптимизация и расчет электронной структуры были выполнены методами теории функционала плотности в рамках градиентного приближения (DFT-GGA). Для каждой из изученных структур были рассчитаны параметры элементарных ячеек и энергии сублимации. Максимальная энергия сублимации и соответственно максимальная устойчивость наблюдается для графеновых слоев γ модификаций. Расчеты электронных свойств показали, что часть из новых разновидностей графина должны проявлять металлические свойства, а другие будут полупроводниками.

Литература

1. В.В. Мавринский, Т.Е. Беленкова, В.М. Чернов, Е.А. Беленков // Вестник Челябинского государственного университета, 23(316), 2013, С. 31-39.
2. Е.А. Беленков, В.В. Мавринский, Т.Е. Беленкова Т.Е., В.М. Чернов В.М. // ЖЭТФ, **147**(5), 2015, С. 949-961.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ИЗ АТОМОВ
В $sp+sp^3$ ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Бухалов А.В., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Углеродные атомы в соединениях могут находиться в различных гибридных состояниях. Кроме трёх основных состояний sp , sp^2 , sp^3 , в которых атомы находятся в структурах карбина, графита и алмаза соответственно возможно существование углеродных материалов, состоящих из атомов в различных гибридных состояниях. Всего может быть четыре класса таких гибридных материалов, состоящих из $sp+sp^2$, $sp+sp^3$, sp^2+sp^3 , $sp+sp^2+sp^3$. Кристаллические и аморфные гибридные углеродные фазы различного состава уже синтезированы, а вот получение гибридных углеродных наноструктур пока что остаётся предметом только теоретических исследований. В данной работе были изучены $sp+sp^3$ гибридные углеродные наноструктуры.

В результате выполненного теоретического анализа была установлена возможность существования гибридных $sp+sp^3$ наноструктур аналогичных sp^2 наноструктурам: фуллеренам, нанотрубкам и слоям графена. Гибридные наноструктуры изученные в данной работе отличались в первую очередь длиной карбиновых цепочек, соединяющих атомы в состоянии sp^3 гибридизации. Карбиновые цепочки в таких соединениях могут содержать только чётное число атомов, причём чередование связей в цепочках подобно полииновым цепочкам. Геометрическая оптимизация двадцати пяти $sp+sp^3$ наноструктур была выполнена молекулярно-механическим методом ММ+. Некоторые из рассчитанных наноструктур имеют трубчатое строение и подобны обычным углеродным нанотрубкам. Их диаметр может меняться при изменении числа атомов в сечении. Также трубчатые соединения могут отличаться соотношением числа атомов в sp^3 гибридных состояниях и количеством карбиновых цепочек. Вероятно, изменяя соотношение атомов в разных гибридных состояниях, можно управлять электронными свойствами $sp+sp^3$ нанотрубок. Кроме трубчатых структур был рассчитан ряд гибридных $sp+sp^3$ слоёвых наноструктур. Основное отличие структуры таких слоёв от структуры графеновых слоёв заключается в том, что толщина слоя в поперечном сечении более одного атома. Интерес к гибридным $sp+sp^3$ слоям обусловлен тем, что, варьируя длины карбиновых цепочек, можно менять размер пор в слое. Пористые гибридные углеродные слои можно использовать на практике в качестве молекулярных сит.

РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТ ПОЛИМОРФОВ ГРАФЕНА

Коченгин А. Е., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Обычно графеном называют отдельный слой углеродных атомов с гексагональной структурой. В слоях гексагонального графена (L_6) каждый атом углерода связан ковалентными связями с тремя соседними атомами, так что атомы образуют сетку из правильных шестиугольников, в вершинах которых находятся углеродные атомы, а стороны гексагонов образованы углерод-углеродными связями. Однако возможно существование других полиморфных разновидностей графена. Какова должна быть трехмерная структура таких кристаллов неясно. В данной работе выполнен расчет структуры кристаллов четырех основных полиморфных разновидностей графена, а также их зонной структуры и плотности электронных состояний.

Трехмерная структура кристаллов графена была рассчитана методом атом-атомного потенциала. Структура отдельных слоев графена и свойства графеновых кристаллов были рассчитаны методом теории функционала плотности (DFT) при использовании обобщенного градиентного приближения (GGA). Были выполнены расчеты трехмерной структуры кристаллов четырех основных полиморфных разновидностей графена L_6 , L_{4-8} , L_{3-12} , L_{4-6-12} . В результате расчетов найдены значения параметров элементарных ячеек графеновых слоев и трехмерных кристаллов, сформированных из этих слоев, рассчитаны координаты атомов в элементарных ячейках. Также были вычислены удельные энергии межслоевых связей, энергии сублимации, плотности электронных состояний, а также рассчитана зонная структура, трехмерных кристаллов графена четырех основных структурных разновидностей. Все полиморфы графена должны обладать металлической проводимостью. Структуры слоев L_{4-8} , L_{3-12} , L_{4-6-12} можно рассматривать как деформированные по сравнению со структурой слоя гексагонального графена L_6 . Установлено наличие зависимости энергии сублимации кристаллов графена от степени деформации их структуры, характеризуемой численными значениями параметров Def и Str – чем сильнее деформирована структура, тем меньше энергия сублимации. Таким образом, наименее деформированная структура и максимальная энергия сублимации у кристаллов L_{4-8} (за исключением полиморфа L_6). Эта полиморфная разновидность, по-видимому, должна быть наиболее устойчива при нормальных условиях и именно ее необходимо пытаться экспериментально получить в первую очередь.

УДК 538.911

РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ L_{4-8} , L_{4-6-12} и L_{3-12}

Шаповалова К.Э., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают рядом уникальных физико-технических свойств и могут найти широкое практическое применение при производстве конструкционных материалов и материалов для электроники. Для практических применений необходимо управлять свойствами углеродных нанотрубок. Одним из возможных способов изменения свойств УНТ является получение нанотрубок из различных структурных разновидностей графена. В данной работе выполнены модельные расчеты структуры углеродных нанотрубок из основных полиморфных разновидностей графена.

Расчеты геометрически оптимизированной структуры были выполнены методом молекулярной механики ММ+. В качестве исходных слоев для построения УНТ были взяты графеновые слои L_{4-8} , L_{4-6-12} и L_{3-12} . Из этих слоев вырезались ленты в результате сворачивания которых получалась исходная структура УНТ для последующей геометрической оптимизации. После геометрической оптимизации полуэмпирическим квантово-механическим методом РМЗ рассчитывалась энергия связей приходящаяся на один атом.

В результате выполненных модельных исследований была рассчитана структура 24 углеродных нанотрубок. Нанотрубки были с зигзагообразной, креслообразной и хиральной структурой. Структура УНТ получающихся из слоев графена L_{4-8} и L_{4-6-12} оказалась цилиндрической (все атомы составляющих эти нанотрубки располагались на гладких цилиндрических поверхностях составляющих стенки нанотрубок). УНТ из графенового слоя L_{3-12} имели сильно деформированную структуру – поверхность стенок нанотрубок была гофрированная. Расчеты удельных энергий связей для нанотрубок разного диаметра и хиральности показали, что имеется зависимость энергии от диаметра нанотрубки – чем больше диаметр тем меньше значение удельной энергии связей. Таким образом, наиболее устойчивыми УНТ должны быть нанотрубки из слоев L_{4-8} и L_{4-6-12} с максимальным диаметром. Синтез углеродных нанотрубок с негексагональной структурой стенок, по-видимому, возможен в результате полимеризации молекул имеющих структуру углеродного каркаса близкую к структуре соответствующего графенового слоя L_{4-8} или L_{4-6-12} .

**ГИБРИДНЫЕ ФАЗЫ, ПОЛУЧАЕМЫЕ ИЗ ЖГУТОВ
ЗИГЗАГОБРАЗНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК**

Тиньгаев М.И., Беленков Е.А.

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Управление свойствами углеродных материалов возможно за счет изменения соотношения атомов в различных гибридизированных состояниях, без изменения химического состава. Значительный интерес представляют углеродные фазы, состоящие из sp^2+sp^3 гибридизированных атомов углерода, так как на их основе возможен синтез новых конструкционных материалов с уникальными свойствами. Модельно получить такие фазы можно в результате частичной сшивки углеродных наноструктур - фуллеренов, нанотрубок или слоев графена. Ранее были теоретически исследованы структуры, получаемые совмещением зигзаг нанотрубок и графеновых слоев [1,2]. В данной работе произведено модельное получение гибридных углеродных соединений, получающихся в результате частичной сшивки жгутов зигзагообразных углеродных нанотрубок.

Первоначальные расчеты структуры sp^2+sp^3 кластеров гибридных фаз были выполнены молекулярно механическим методом ММ+. Окончательная геометрическая оптимизация структуры фаз выполнялись первопринципными методами теории функционала плотности в градиентном приближении.

В результате первичных расчетов была установлена возможность существования 20 новых sp^2+sp^3 гибридных фаз. Однако одна из этих фаз после геометрической оптимизации методом DFT-GGA трансформировались в алмазоподобную структуру, а две другие фазы распались на отдельные графеновые слои. Таким образом возможно устойчивое существование семнадцать углеродных гибридных фаз, получающихся при частичной сшивке зигзагообразных углеродных нанотрубок. Для каждой из этих фаз рассчитаны структурные параметры, вычислены значения энергий сублимации, построены зонные диаграммы и диаграммы плотностей электронных состояний.

Литература

- [1] Е.А. Беленков, М.И. Тиньгаев Структура новых sp^2+sp^3 гибридных углеродных фаз, получаемых совмещением (n,n) однослойных углеродных нанотрубок // Письма о материалах, **5**(1), 2015, с. 15-19.
- [2] Е.А. Беленков, М.И. Тиньгаев Получение гибридных углеродных sp^2 и sp^3 фаз из слоев графена L_{4-8} // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, **6**, 2014. с. 42-47.

ОСОБЕННОСТИ ЭФФЕКТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПО ДАВЛЕНИЮ В ТОНКИХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ

Якупов Л.Ф., Лачинов А.Н.

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

Одним из направлений развития современной электроники является электроника электроактивных полимеров. Полимер класса полиарилефталидов - полидифенилефталид был выбран в качестве объекта исследования. Известно, что в тонких пленках этого полимера наблюдается эффект электронного переключения, вызванный одноосным давлением [1]. В докладе представлены результаты исследования влияния толщины полимерной пленки, влияние работы выхода электродов, влияние электрического поля на параметры переключения проводимости.

Изучение электрофизических свойств полиарилефталидов, подвергнутых различным внешним воздействиям, которые вызывают изменение электропроводности полимерных пленок, а также понимание механизмов генерации и транспорта носителей заряда в таких материалах актуально на сегодняшний день.

Экспериментальные образцы представляли собой структуру металл/полимер/металл.

Исследования проводились методом вольт-амперных характеристик (ВАХ). ВАХ измерялись при пошаговом воздействии одноосным механическим давлением. Полученные результаты измерений позволили оценить подвижности носителей заряда и концентрации собственных носителей заряда при разных значениях давления вблизи точки перехода полимерной пленки в высокопроводящее состояние.

В докладе обсуждаются следующие результаты: зависимость эффекта переключения от толщины полимерной пленки, работы выхода электродов и величина механического одноосного давления. Установлено, что увеличению прикладываемого давления порог переключения по полю смещается в меньшую сторону. Обнаружено влияние расщепления энергии электронов на уровне Ферми при разной ориентации спинов на электрофизические свойства экспериментальной структуры. В докладе обсуждается вероятная интерпретация экспериментальных результатов.

Литература

1. А.Н. Лачинов, В.М. Корнилов, Т.Г. Загуренко, А.Ю. Жеребов, ЖЭТФ 129, 4, 728-734 (2006).

ОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ

Муллагалиев И. Н., Салихов Р. Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Органическая электроника – это современное междисциплинарное направление науки и технологии, связанное с созданием новых электронных устройств, базовыми элементами которых являются органические тонкопленочные полевые транзисторы и фотовольтаические ячейки. На их основе разрабатываются новые поколения интегральных микросхем, солнечных батарей, сенсоров [1]. Тонкие пленки полианилинов (PANI), C60 и фуллеренпроизводных активно используются в качестве транспортного слоя в органических полевых транзисторах [2, 3].

В данной работе изучены вольтамперные характеристики органических полевых транзисторов, созданных на основе тонких пленок фуллерена и его производных и на основе модифицированных PANI. Для изготовления транзисторов были использованы стеклянные пластины с омическим контактом в виде ИТО. На слой ИТО методом центрифугирования наносился слой полиимидной пленки, который использовался в качестве подзатворного диэлектрика. Сверху были нанесены алюминиевые электроды методом термического распыления в вакуумной камере на установке ВУП 5. В области зазора между электродами в 50 мкм наносились пленка C60 или его производных и пленка PANI методом центрифугирования из раствора. Получены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики. Электрические характеристики полученных структур, были измерены при комнатной температуре по схеме с общим истоком. Зависимости имеют нелинейный характер во всем диапазоне приложенных к затвору напряжений. Ток стока увеличивается при отрицательном потенциале на затворе транзистора из C60 и положительном - из PANI, это означает, что транспортные слои имеют проводимость р- и n-типа соответственно. Следует отметить, что отсутствует типичный для большинства полевых транзисторов участок насыщения тока. Полученные зависимости характерны для нормально открытого полевого транзистора, т.е. канал проводимости формируется изначально в процессе изготовления образца.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 14-02-97008).

Литература

1. R.B. Salikhov, A.N. Lachinov, Polymer thin film chemical sensors (Advances in chemical sensors: InTech), p. 215-234 (2012).
2. Y.Ch. Li, Y.J. Lin, H.J. Yeh, T.C. Wen, L.M. Huang, Y.K. Chen, Y.H. Wang, Appl. Phys. Lett., 92, 093508 (2008).
3. X.H. Zhang, B. Kippelen, J. Appl. Phys., 104, 104504 (2008).

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА CELIV ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Фазылов Ф.И., Гарифуллин Э.Д., Юсупов А.Р.

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

Определение параметров носителей заряда в органических материалах позволяет оценить возможности материалов в качестве активной основы электронного устройства. Большое разнообразие методов позволяет эффективно определять подвижность и концентрацию носителей заряда, однако не все они подходят для работы с материалами толщиной в несколько десятков нанометров. Для таких случаев наиболее эффективным является метод CELIV (Экстракция носителей заряда линейно увеличивающимся напряжением)[1,2].

Целью работы является изучение влияния электрического поля на подвижность носителей заряда в пленках полидифениленфталаида (ПДФ). Для определения влияния электрического поля были рассмотрены два подхода. 1. Увеличение амплитуды напряжения. 2. Увеличение скорости нарастания напряжения. В качестве экспериментальных образцов использовались структуры ИТО (оксид индия олова) – ПДФ – Al. Напряженность электрического поля определяется по формуле $E = A \cdot t_{max} / d$, где A – скорость нарастания напряжения, t_{max} – время соответствующее максимуму тока экстракции, d – толщина полимерной пленки.

Согласно результатам, полученным на экспериментальных структурах, установлено, что с увеличением электрического поля, подвижность носителей заряда уменьшается, что согласно методике свидетельствует о влиянии инжекции носителей заряда. Как правило, такое поведение объясняется артефактами, возникающими вследствие уменьшения электрического поля внутри экспериментального образца.

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

Литература

1. Juska G., Arlauskas K., and Viliunas M., Extraction Current Transients: New Method of Study of Charge Transport in Microcrystalline Silicon, Phys. Rev. Letts., 2000, 84 4946.
2. Juška G., Arlauskas K., Viliunas M., Genevicius K., Osterbacka R., and Stubb H., Charge transport in p -conjugated polymers from extraction current transients, Phys. Rev. B 62, 2000, p. 16235-16238.

ТОНКИЕ ПЛЕНКИ ПОЛИАНИЛИНА В ЭЛЕКТРОНИКЕ

Салихов Т.Р., Юмагузин Ю.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Разработка эффективных электронных эмиттеров остается одной из актуальных задач физической электроники. Проведено измерение вольтамперной характеристики полевой эмиссии с исходной поверхности вольфрама и с острия, покрытого пленкой полианилина (PANI). Проведенные исследования показали высокую эмиссионную способность катода, покрытого PANI. Измеренные энергетические распределения эмитированных электронов показывают незначительные различия по сравнению с металлическими катодами, что выгодно при использовании таких типов катодов.

В данной работе измерены вольтамперные характеристики органических полевых транзисторов, созданных на основе модифицированных PANI. Для изготовления транзисторов были использованы стеклянные пластины с омическим контактом в виде ИТО. На слой ИТО методом центрифугирования наносился слой полиимидной пленки, который использовался в качестве подзатворного диэлектрика. Получены и проанализированы выходные и передаточные вольтамперные характеристики. Зависимости имеют нелинейный характер во всем диапазоне приложенных к затвору напряжений. Следует отметить, что отсутствует типичный для большинства полевых транзисторов участок насыщения тока. Полученные зависимости характерны для нормально открытого полевого транзистора, т.е. канал проводимости формируется изначально в процессе изготовления образца.

Преобразование солнечной энергии в электрическую - одна из глобальных проблем. Для создания органических солнечных элементов (ОСЭ) в виде бинарных донорно-акцепторных систем использована комбинация модифицированных PANI с фуллерен содержащими полимерами. Формирование ОСЭ осуществлялось на стеклянной подложке со слоем ИТО. Были измерены вольтамперные характеристики ОСЭ и проведен сравнительный анализ таких параметров, как напряжение холостого хода, ток короткого замыкания, коэффициент заполнения и КПД.

Проведенные исследования показали целесообразность применения тонких пленок полианилина для разработки эффективных электронных эмиттеров, солнечных элементов и полевых транзисторов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 14-02-97008).

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Егоров А.А.

Чувашский государственный университет, г. Чебоксары, Россия

Целью работы являлось исследование переходов на основе металлоуглеродного материала и монокристаллического кремния, а также исследование вольтамперных характеристик барьера Шоттки на основе тонкопленочной структуры n-Si/Ag и полупроводниковых устройств.

Задачей исследования являлись: изучить методику измерения вольтамперных характеристик материалов и вычисление параметров исследуемых полупроводниковых устройств, тонкопленочной структуры металл-кремний и фоточувствительного металлоуглеродного материала, а также вычислить высоту потенциальных барьеров на контактах n-Si+Ag и n-Si+Ag+ЛЦУ.

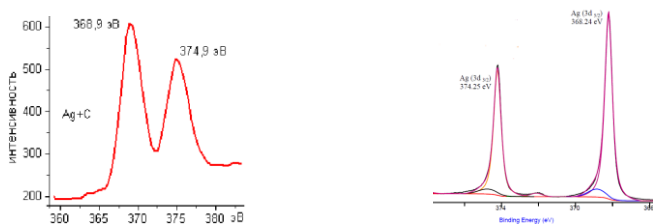


Рис. 1.-Анализ состава интеркалированной серебром пленки ЛЦУ методом РФЭС

Результаты

Изучен новый материал, обнаружено хим. взаимодействие серебра с карбином. Контакт металлоуглерод-кремний (n-Si/Ag-ЛЦУ) может быть использован при создании фоточувствительных устройств.

Литература

1. Кочаков В.Д., Новиков Н.Д. Способ получения углеродного наноматериала, содержащего металл.
2. Васильев А.И., Кочаков В.Д. Влияние отжига на физические свойства металлоуглеродных пленок. Вестник Чувашского университета. 2011. № 3. С. 189-192.

АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Корнилов В.М.¹, Карамов Д.Д.^{1,2}, Габидуллина Г.Ш.¹, Габидуллина Г.Г.¹,
Габидуллин В.В.¹, Гимазетдинова Л.Р.¹

¹Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

²Уфимский научный центр РАН, г. Уфа, Россия

Органическая электроника появились в качестве жизнеспособного конкурента аморфному кремнию. Устройства на основе органических тонкопленочных устройств находят все новые ниши в электротехнике, наноэлектронике. Высокопроизводительные полимерные материалы применяются в различных сферах, в том числе в светоизлучающих диодах, фотоэлектрических элементов солнечных батарей, и органических тонкопленочных транзисторах и в качестве активного элемента всевозможных сенсоров из-за достоинств органических веществ, таких как низкая стоимость, гибкость, легкость изготовления и биосовместимость. Полимеры интенсивно исследуются для применения в гибких дисплеях в качестве активной матрицы, для радиочастотной идентификации, для создания новых видов энергонезависимой памяти и т.п.

В отличие от неорганических материалов, тонкопленочные полимерные материалы имеют более сложную надмолекулярную структуру, которая зависит не только от химической структуры полимера, но и методов и условий создания полимерного слоя. При этом электрофизические параметры, в частности производительность органических электронных материалов, тесно связано с их морфологией и молекулярной упаковкой. Последовательное изучение всех стадий изготовления пленок полимера от стадии раствора до готовых пленок позволяет проследить связь между свойствами исходного раствора и структурами, сформированными в тонких пленках в процессе изготовления.

Одним из интересных представителей полимеров является полилифениленфталид (ПДФ) широкозонный полимер из класса полигетероариленов.

В работе представлены результаты экспериментального исследования пленок ПДФ методами атомно-силовой микроскопии (АСМ). Возможности АСМ были реализованы при картографировании полимерных пленок и подложек, на которых формировались пленки. Определены геометрические параметры пленок ПДФ и их структурных элементов до и после различных воздействий (механического, химического и термического). Обнаружена внутренняя (надмолекулярная) структура пленок, которая объясняется наличием в исходном растворе ассоциатов макромолекул.

ПОЛИМЕРНЫЕ ДАТЧИКИ ВЛАЖНОСТИ

Камалеев М.Ф., Бадретдинов Б. Р., Салихов Р. Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Полиимид находит применение во многих областях производства. Тонкие (толщиной меньше микрона) полиимидные пленки применяются в качестве оптических окон в источниках синхротронного излучения. Самоклеющаяся лента в виде рулонов, для высоковольтной и высокотемпературной изоляции электрических цепей (янтарный скотч). Основным преимуществом полиимида при их использовании в датчиках влажности является его обратимая абсорбция, то есть процесс поглощения и последующего выделения воды.

На стеклянную пластину со слоем ИТО методом центрифугирования наносим пленку полиимида из раствора. Полученный слой подвергаем полимеризации путем нагрева до 150С в течение 20-30 мин. Толщина полученной полимерной пленки достигает 2 мкм. Сверху на полимерный слой был нанесен алюминиевый электрод методом термического распыления в вакуумной камере на установке ВУП 5. Достаточно тонкая алюминиевая пленка имеет достаточно большую пористость, размером превосходящую молекулу воды, что позволяет молекулам воды свободно попадать на полиимидную плёнку и защищает от инородных веществ с более крупной атомной структурой. При попадании паров воды на полиимидную пленку, её диэлектрическая проницаемость возрастает, что приводит к увеличению емкости полученной конденсаторной структуры.

Была исследована зависимость емкости полученных структур от относительной влажности воздуха. Крутизна характеристик в полученных нами структурах изменялась в пределах 1.0 - 1.2 пФ/ %. Увеличение емкости "сэндвич" структуры объясняется диффузией молекул воды через тонкий слой металлического электрода в микропоры на поверхности полиимидной пленки. Из-за высокой диэлектрической проницаемости воды происходит значительный рост емкости структуры. К достоинствам полученных структур на основе полиимидных пленок следует отнести линейную зависимость емкости от относительной влажности, малый гистерезис (не более 1-2 %), высокую крутизну характеристик и небольшую постоянную времени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 14-02-97008).

Литература

1. Y.C Shubert P.J., Nevin J.H. A polyimide-based capacitive humidity sensor // IEEE Transactions On Electron Devices. 1985, v. 32, N 7, pp. 1220-1223.

© Камалеев М.Ф., Бадретдинов Б. Р., Салихов Р.Б., 2015 г..

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

УДК 548.1

СИММЕТРИЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

Замковская А.И., Максимова Е.М.

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского
г. Симферополь, Россия

Многие физические свойства кристаллов обладают анизотропией свойств и описываются тензорами разных рангов.

В работе рассматриваются особенности анизотропии и симметрии продольного пьезоэлектрического эффекта. Пьезоэффект называют продольным при совпадении направлений поляризации и механического напряжения.

Большую роль в наглядном понимании продольного пьезоэффекта играют указательные поверхности этого свойства, радиус-вектор которых равен размеру пьезомодуля в данном направлении.

Целью работы было определение направлений в кристалле, вдоль которых изучаемое свойство принимает экстремальные значения.

В пакете прикладных программ MathCad, [1], были построены трехмерные, вращающиеся модели указательных поверхностей пьезоэлектрических модулей для различных кристаллов, рис.1.

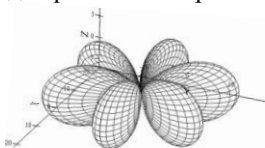


Рис. 1. Указательная поверхность продольного пьезоэффекта в кристалле кварца

Форма и ориентировка указательных поверхностей продольного пьезоэлектрического эффекта относительно кристаллической системы координат зависит от симметрии кристалла в соответствии с принципом Неймана: симметрия продольного пьезоэлектрического эффекта включает в себя 7 классов симметрии из 18 возможных классов кристаллов, обладающих продольным пьезоэффектом.

Литература

- [1] С. Н. Популях. Пакеты прикладных программ в физике – Симферополь: «Пирамида-Крым», 1998. – 104 с.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ РАДИАЦИОННОЙ ПОВРЕЖДАЕМОСТИ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Мукашев К.М.

Казахский Национальный университет имени Абая

г. Алматы, Казахстан

Как известно, воздействие ядерных излучений на вещество сопровождается целым рядом новых явлений. Наиболее важными среди них являются ядерные реакции и связанное с ними изменение элементного состава, образование и возникновение скоплений точечных дефектов, повреждение матрицы, вызванные каскадами атом - атомных соударений и др. и, как следствие, нарушение целостности кристалла,

Для изучения явлений, связанных с изменением кристаллической структуры материала в активной зоне реактора, зачастую бывает достаточным проведение имитационных экспериментов на ускорителях заряженных частиц. При этом очень важной является задача изучения профиля распределения дефектов вдоль глубины поврежденного слоя. В свое время с этой целью на основе теоретических исследований была разработана программа для расчета на ЭВМ профиля распределения смещенных атомов по глубине прохождения тяжелых ионов в материале [1]. Но любая программа, какой она универсальной ни была, все же не может учесть все аспекты сложного процесса взаимодействия заряженных частиц с реальной кристаллической решеткой, тем более она не может быть приемлема, когда объектами исследований являются многокомпонентные сплавы.

Заряженные частицы, двигаясь в веществе, теряют энергию. Потери энергии налетающей частицы могут происходить различными путями, в том числе на ионизацию и возбуждение электронных оболочек, поляризацию атомов среды, радиационные потери и ядерное торможение, роль которых в процессе образования структурных нарушений может быть различной. Вследствие этого профиль распределения дефектов по глубине тоже может быть различным, расположение которого зависит от вида и параметров бомбардирующих частиц, материала мишени, температуры облучения и др. В связи с этим экспериментально полученные параметры дефектной структуры могут значительно отличаться от теоретически рассчитанных.

Поскольку по мере прохождения заряженной частицы в веществе, происходит последовательный сброс ее энергии, то изучение профиля распределения дефектов по глубине в принципе является задачей исследования энергетической зависимости радиационной повреждаемости металла. К решению данной проблемы можно идти или изучением дефектной структуры металла путем последовательного стравливания его

поверхности, либо на основе метода переменных толщин поглотителя. Естественно, наиболее приемлемым является второй, неразрушающий метод исследования, сущность которого заключается в облучении заряженными частицами высокой энергии и изучении стопки фольг, суммарная толщина которой превышает длину свободного пробега частиц в данном материале. В результате использования такой методики, каждая фольга оказывается облученной частицами разной энергии и содержит соответствующие структурные нарушения, характерные для данной глубины материала. В качестве объектов исследования были использованы поликристаллические Mo и Ta, а также нержавеющая сталь 10X18H10T-ВД в виде фольг толщиной 100 мкм и диаметром 17 мм каждая. Исходное состояние металлов достигалось отжигом при $T=1200^{\circ}\text{C}$, а стали - при 1050°C в течение 1,5 часа в вакууме 10^{-5} Па. Толщина каждой фольги Δd определяет элемент пути $\Delta x_i = \Delta d_i \rho$, на котором происходит потеря энергии протонов $\Delta E_i = s_i(E) \Delta x_i$; средняя энергия протонов на другой стороне каждой фольги составит $E_{xi} = E_i - \Delta E_i$. Следовательно, каждая очередная фольга со стороны выходного окна ускорителя облучается частицами разной энергии, изучая степень повреждений которых можно установить ее энергетическую зависимость. Облучение осуществлялось потоком протонов $1,2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ до флюенса $2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ на изохронном ускорителе У-150 при температуре не выше 70°C . Исследование структурных нарушений в материалах проводилось методом электронно-позитронной аннигиляции. Изучение структурных нарушений материалов производилось на спектрометре с линейно-щелевой геометрией с угловым разрешением $0,5$ мрад. В качестве источника позитронов использовался изотоп ^{22}Na активностью 10 мКи.

УДК 517.958:536.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА НА ГРАНИЦЕ КОНТАКТА АТОМОВ ТИТАНА И НИКЕЛЯ

Хазгалиев Р.Г., Халиков А.Р.¹, Дмитриев С.В.

Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
¹Уфимский государственный авиационный технический университет
г. Уфа, Россия

В данной работе делается попытка описания процесса диффузии методом Монте-Карло на контактной границе двух металлов в рамках упрощенной двумерной модели кристалла. Для ускорения расчетов предполагается, что атомы различных сортов имеют одинаковый размер и не учитываются эффекты атомной релаксации, иными словами,

принимается модель жесткой кристаллической решетки. Взаимодействие между атомами описывается парными межатомными потенциалами с учетом дальнего действия включающая две первые координационные сферы, а диффузия осуществляется по вакансионному механизму. Несмотря на свою простоту, данная модель позволяет описать исследуемый процесс на качественном уровне и облегчает обработку и визуализацию результатов моделирования.

Для построения структуры контактной зоны основывались на диаграмме состояния Ti-Ni разделенную прямыми линиями на участки. Каждый участок представляет собой более простую диаграмму состояния. Например, в интервале от 0 до 35 % Ni участок аналогичен диаграмме состояния с эвтектичным распадом, а интервал от 35 до 50 % Ni изображает перетектическую диаграмму состояния, интервал от 50 до 75 % Ni диаграмму состояния с перитектическим равновесием, от 75 до 100 % Ni диаграмму с промежуточными фазами, образующимися в твердом состоянии т.о, становится возможным, приближенно определить энергии связей пар атомов на координационных сферах, которые в упрощенном варианте изменяются по линейному закону с корректировкой на температуры плавления соединений и тип образуемой диаграммы состояния. В реальных сплавах изменение энергий связи пар атомов не всегда будет линейно при изменении концентрации. Например, при добавлении некоторого количества вещества (*A*) к (*B*) в сплаве произойдут изменения, которые связаны с суммарным количеством валентных электронов в общей массе сплава, что в свою очередь, повлечет за собой изменение энергий связи атомов и возможность изменения фазового состав в некоторых локальных участках.

Основываясь на вышесказанном, провели 2 эксперимента, в которых учли влияния локальной концентрации (по 10x10 и 40x40 атомных ячеек) на энергии межатомных связей на первых двух координационных сферах. В ходе моделирования были обнаружены упорядоченные соединения, в том числе и стехиометрических составов. Характерные концентрационные кривые, на границе контакта атомов представлены на рис. 1. Зона диффузии следующая: для учета локальной концентрации 10x10 составляет ≈ 115 атомных слоев, а для 40x40 ≈ 95 атомных слоев. На всех концентрационных кривых видно ограничение диффузии в область элемента *A* и резкое изменение концентрации от 100 до 50% *A*(Ti) тогда как со стороны зоны элементов *B* происходит равномерное изменение концентрации. В зоне диффузии наблюдаем скачкообразное изменение концентрации элементов Ti и Ni, которое связано с формированием упорядоченных структур (ярко выражена, на рис. 1 (б)). Концентрация элементов в зоне диффузии стремится к составу 65 - 70% Ni.

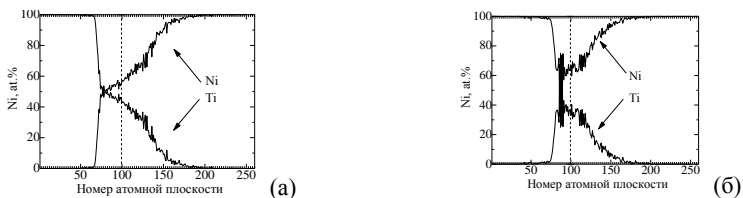


Рис. 1. Изменение концентраций в зоне соединения титан – никель

Анализируя приграничные области от Ti к Ni, наблюдаем формирование следующих типов структур (рис. 2): титан и зона диффузии никеля в титан (обозначена как - (1)), шахматная структура - (2), полосчатая структура - (3), область смеси Ti-Ni шахматной структуры и элемента Ni в чистом виде - (4), зона диффузии титана в никеле - (5), никель - (6).



Рис. 2. Результат моделирования по нелинейному закону изменения параметра парного потенциала от концентрации; учет локальной концентрации: (а) – 10×10 , (б) – 40×40 атомов; температура 750°C ; 1×10^9 элементарных актов диффузии в данном объёме

Сопоставляя рис. 2 и концентрационные кривые (рис. 1) можно показать, что диффузия элемента B(Ni) в A (Ti) ограничена, т.к. в зоне соединения формируются шахматная и полосчатая структуры. Резкое снижение концентрации элемента A до 50 % (рис. 1) объясняется образованием шахматной структуры, тогда как скачки концентрационных кривых в зоне диффузии связаны с образованием полосчатой структурой.

Подведем итоги: рассматривался сплав на контактной границе двух металлов в условии упрощенной двумерной модели кристалла на квадратной решетке. Предложенная модель может быть использована для моделирования рассмотренных процессов и на трехмерных решетках, а также для прогноза бинарных и многокомпонентных диаграмм состояния металлических систем.

УДК 669.715: 620.192.22

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО КОМПОЗИЦИОННОГО СПЛАВА АЛ30/18SiC_p

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

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

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

Исследованы структурные изменения и микротвердость композиционного материала на основе литейного алюминиевого сплава АЛ30, армированного частицами SiC (18 вес.%). Исходное состояние композиционного сплава – жидкоштампованное. Вырезанные из исходных заготовок образцы диаметром 8 мм и толщиной 0,25 мм подвергли кручению под давлением 4 ГПа на 5 оборотов при комнатной температуре на наковальне Бриджмана. При этом на периферии образца истинная степень деформации составила 6,2.

Структурные изменения композиционного сплава исследовали в исходном состоянии и после деформации в центре, на середине радиуса и на периферии образца. Измерения микротвердости проводили по радиусу деформированных образцов.

Исходное состояние композиционного сплава характеризовалось наличием α -Al твердого раствора, частицами эвтектического кремния и интерметаллидных фаз, а также равномерно распределенными включениями SiC.

Интенсивная пластическая деформация привела к значительному дроблению частиц эвтектического кремния и интерметаллидных фаз, и к менее интенсивному измельчению, несмотря на более высокие показатели твердости, армирующих частиц SiC. Кроме того, в процессе пластической деформации имеет место частичное растворение эвтектического кремния и интерметаллидных фаз.

ИПД КВД приводит к повешению значений микротвердости по сравнению с исходным жидкоштампованным состоянием (173,56 HV). Микротвердость в деформированном образце повышается по мере удаления от центра к периферии образца с 255,4 до 427,5 HV.

В работе обсуждены структурные изменения, имеющие место в процессе интенсивной пластической деформации, и влияние их на микротвердость композиционного сплава.

© Швец К.С., Халикова Г.Р., Корзникова Е.А., Трифонов В.Г., 2015 г.

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

$Gd_{100-x}Ga_x$ ($x = 0..10$)

Ульянов М.Н.^{1*}, Таскаев С.В.¹, Скоков К.П.¹, Карпенков Д.Ю.¹,
Ховайло В.В.¹, Батаев Д.С.¹, Пелленен А.П.²

¹⁾ Челябинский государственный университет, г. Челябинск

²⁾ НИУ «Южно-Уральский государственный университет», г. Челябинск

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования МКЭ в сплавах $Gd_{100-x}Ga_x$ ($x = 0..10$), подвергнутых интенсивной пластической деформации методом холодной прокатки. Как показано в предыдущих работах, ИПД может приводить к значительному изменению магнитных и термодинамических свойств [1]. Показано, что по сравнению с чистым недеформированным Gd во внешнем магнитном поле 2Т, в сплавах $Gd_{100-x}Ga_x$ происходит уменьшение МКЭ на 35%, а в пластически деформированных образцах – до 70%.

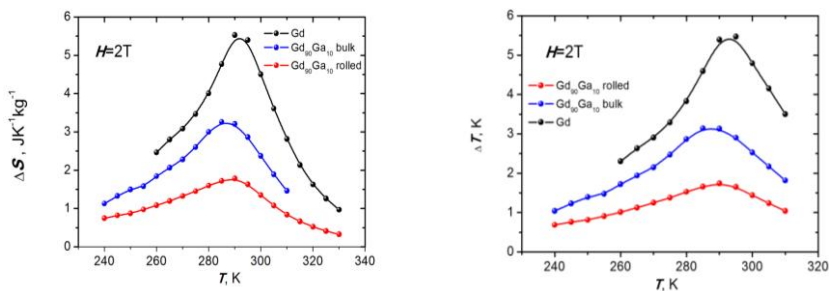


Рис.1. Изменение магнитной энтропии (слева) и адиабатической температуры (справа) недеформированного и холоднокатаного $Gd_{90}Ga_{10}$ сплавов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 15-12-10008.

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).

© Ульянов М.Н., 2015 г..

ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ

$Gd_{100-x}B_x$ ($x = 0, 10, 15$)

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

Ховайло В.В.¹, Батаев Д.С.¹, Пелленен А.П.²

¹⁾ Челябинский государственный университет, г. Челябинск

²⁾ НИУ «Южно-Уральский государственный университет», г. Челябинск

Работа посвящена изучению магнитных свойств тонких лент $Gd_{100-x}B_x$ ($x = 0, 10, 15$), подвергнутых интенсивной пластической деформации (ИПД). Метод ИПД является перспективным для разработки новых функциональных материалов. В зависимости от степени деформации, магнитные, 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 [1-2]. Это приводит к новым термодинамическим и магнитным свойствам, которые делают материалы неприменимыми для магнитокалорических приложений без дополнительной процедуры термообработки.

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования МКЭ в холоднокатаных лентах $Gd_{100-x}B_x$ ($x = 0, 10, 15$). По сравнению с чистым недеформированным Gd во внешнем магнитном поле 3Т, в сплавах $Gd_{100-x}B_x$ происходит уменьшение МКЭ на 20%, а в пластически деформированных образцах – до 70%. Было обнаружено, что магнитокалорические свойства могут быть полностью восстановлены с помощью термической обработки при высокой температуре.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 15-12-10008.

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).
2. S. Taskaev, K. Skokov, V. Khovaylo, V. Buchelnikov, A. Pellenen, D. Karpenkov, M. Ulyanov, D. Bataev, A.Usenko, M. Lyange, and O. Gutfleisch, J. Appl. Phys. **117** (2015) 123914.

© Ульянов М.Н., 2015 г.

УДК 536

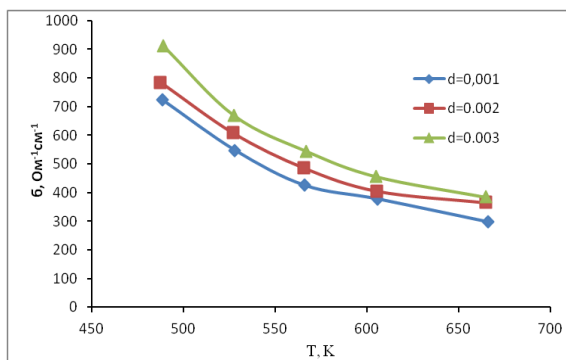
ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $\text{Ag}_x\text{Cu}_{(2-x)}\text{Se}$ ($x=0,01;0,02;0,03;0,04$) ПРИ ИЗМЕНЕНИИ СОСТАВА МЕТОДАМИ КУЛОНОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ

¹Абдрафикова Р.И., ¹Ишембетов Р.Х., ²Кубенова М.М.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

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

Были изучены влияние изменения составов при выводе серебра из сплавов $\text{Ag}_{0,02}\text{Cu}_{1,98}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0,04}\text{Cu}_{1,96}\text{Se}$ на электронную проводимость, на электронную термо-эдс.



На рис. представлены графики температурных зависимостей электронной проводимости для состава $\text{Ag}_{0,04-d}\text{Cu}_{1,96}\text{Se}$ ($d=0,001; 0,002; 0,003$;) Характер электронной проводимости при титровании не изменился, т.е. имеет металлический характер. При выводе

серебра электронная проводимость возрастает, что связано с увеличением вакансий, а вместе с ними и дырок.

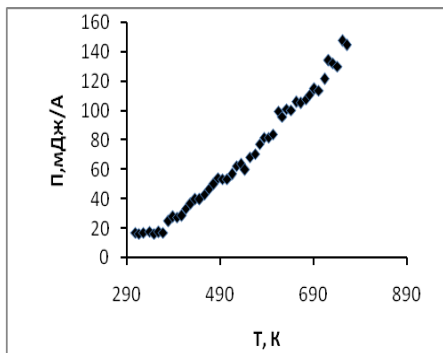
При сравнении графиков. можно заметить, что и общая проводимость также возрастает: при температуре 600 К электронная проводимость стала равна $400 \text{Om}^{-1}\text{cm}^{-1}$ против $200 \text{Om}^{-1}\text{cm}^{-1}$.

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х.Абрикосова, В.Ф.Банкиной, Л.В.Порецкой и др. - М.: Наука, 1975. - 219 с.

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭФФЕКТ ПЕЛЬТЬЕ В $\text{Ag}_{0.03}\text{Cu}_{1.97}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.04}\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$ Бикбулатов А.И.¹, Ишембетов Р.Х.¹, Кутербекоев К.А.²¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан

Одним из перспективных практических приложений халькогенидов меди является использование их в качестве р-ветвей гетеропереходов для полупроводниковых холодильников, работающих на эффекте Пельтье.



Целью данной работы было исследовать эффект Пельтье в $\text{Ag}_{0.03}\text{Cu}_{1.97}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.04}\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$.

Измерения проводились на поликристаллических образцах, спрессованных из порошка. Идентификация фаз проводилась методами РСА и электронной микроскопии. Для определения коэффициента Пельтье использовалось соотношение $\Pi = \alpha T$, где α – коэффициент термо-эдс, T – абсолютная температура.

Коэффициент электронной термо-эдс измеряли по широко известной методике подавления ионной составляющей. Электронными зондами служили рабочие спаи хромель-алюмелевых термопар, применяемых для измерения температуры, между хромелевыми ветвями которых измерялась электронная термо-эдс. При измерениях поддерживался постоянный градиент температуры вдоль образца порядка 10 К/см. Погрешность измерений не превышала 4-5 %.

Наблюдаемые значения коэффициента Пельтье образцов $\text{Ag}_{0.04}\text{Cu}_{1.96}\text{Se}$, $\text{Ag}_{0.03}\text{Cu}_{1.97}\text{Se}$ находятся в пределах $0.1 \div 0.34$ Дж/А, что является обнадеживающим результатом

ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $\text{Ag}_x\text{Cu}_{(2-x)}\text{Se}$ ($x=0,01;0,02;0,03;0,04$) В НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

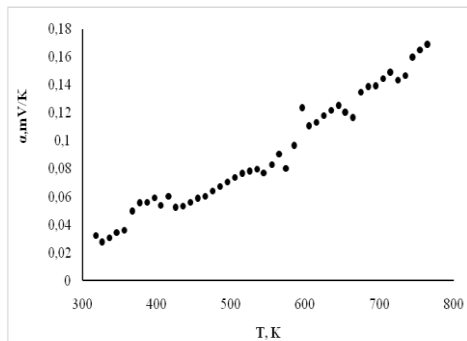
¹Шарипов Х.А., ¹Ишембетов Р.Х., ²Кутербеков К.А., ²Кубенова М.М.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

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

На рис.1 представлена температурная зависимость коэффициента электронной термо-эдс одного из твердых растворов $\text{Ag}_x\text{Cu}_{(2-x)}\text{Se}$ ($x=0,01;0,02;0,03;0,04$). В целом наблюдается рост α_e с повышением температуры. Зависимость носит вырожденный характер (рост α_e с температурой, как в металлах). В вырожденных полупроводниках коэффициент электронной термо-эдс связан с электропроводностью σ_e соотношением $\alpha_e = \frac{\pi^2}{3} \frac{\kappa^2}{e} \frac{T}{\partial\Phi}$, где Φ - уровень Ферми.

Коэффициент электронной термо-эдс также практически линейно зависит от температуры и положения уровня Ферми, что характерно для металлов и сильно вырожденных полупроводников. Знак термо-эдс соответствует р-типу проводимости. При вариации содержания серебра в пределах области гомогенности знак термо-эдс не изменяется. Знак коэффициента α_e положителен, что с учетом правила выбора знака для полупроводниковых соединений соответствует движению электронных дырок с горячего конца образца на холодный.



Температурная зависимость электронной проводимости, измеренной параллельно с α_e , носит металлический характер, указывая на вырожденность электронных состояний. Если сравнить величины коэффициента при температуре 700 К то видно, что коэффициент Зеебека увеличивается от 160 мкВ до 200 мкВ и больше с увеличением содержания серебра в составе, что позволяет считать их перспективными элементами для термоэлектрических преобразователей.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$, $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$

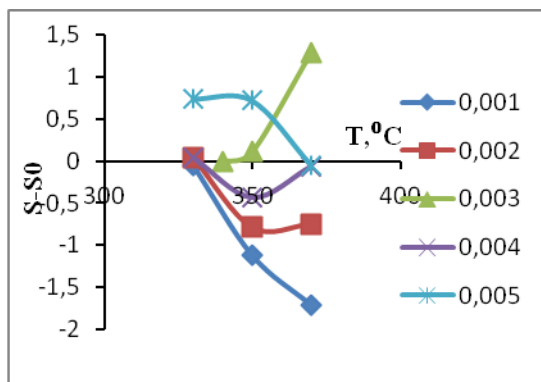
¹Шираев А.А., ¹Ишембетов Р.Х., ²Нурахметов Т.Н.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

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

Для исследования термодинамических свойств твердых растворов нами был применен метод кулонометрического титрования, разработанный К. Вагнером и развитый Ш. Миятани для суперионных халькогенидов серебра и меди. ЭДС E электрохимической ячейки типа $\text{Ag}/\text{AgI}/\text{Ag}_{2+\delta}\text{Se}/\text{Pt}$ представляет собой высоту уровня Ферми μ и решая соответствующие уравнения получим для энтропии атомов серебра:

$$S_{\text{Ag}} - S_{\text{Ag}}^{\circ} = e \frac{\partial E}{\partial T} \quad (1)$$



На рис. представлены зависимости энтропии от температуры сплавов $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$, $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$, которые были рассчитаны по экспериментальным зависимостям эдс ячейки с применением твердых электролитов CuVg при различных температурах и степени нестехиометричности U сплава $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$. В

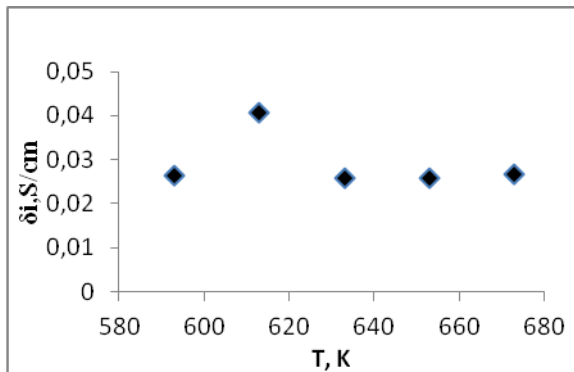
интервале температур от 330°C до 350°C наблюдается уменьшение энтропии связанное, видимо, с упорядочением в катионной подрешетке, а выше 350°C для составов с $\delta=0,003; 0,005$; наблюдаются увеличение энтропии, видимо, из-за дальнейшего перераспределения катионов.

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х.Абрикосова, В.Ф.Банкиной, Л.В.Порецкой и др. - М.: Наука, 1975. - 219 с.

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И ИОННАЯ ТЕРМО-ЭДС СПЛАВА¹Юнусов Р.В., ¹Ишембетов Р.Х., ²Нурахметов Т.Н.¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия²Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, г. Астана, Казахстан

В обычных твердых телах ионная проводимость находится на уровне 10^{12} - 10^{10} $\text{Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$, и даже вблизи точки плавления не превышает 10^{-3} $\text{Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$. В суперионных проводниках ионная проводимость имеет порядок 10^{-1} $\text{Ом}^{-1}\text{см}^{-1}$ при комнатной температуре, что близко к проводимости концентрированных растворов жидких электролитов [1]. В исследовании суперионных проводников в последние годы были достигнуты большие успехи.



В работе исследована зависимость ионной проводимости от температуры и влияние легирования литием на ионную проводимость и ионную термо-эдс. На рис. приведен график ионной проводимости $\text{Li}_{0,04}\text{Cu}_{1,96}\text{S}$. Выявлено,

что уменьшение размеров зерен и легирование литием, даже в малом количестве, приводит к уменьшению ионной проводимости.

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х.Абрикосова, В.Ф.Банкиной, Л.В.Порецкой и др. - М.: Наука, 1975. - 219 с.

ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ СПЛАВОВ $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$ и $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$.

¹Абдрафикова Р.И., ¹Ишембетов Р.Х., ²Жунусбеков А.А.

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

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

На рис.1-2 представлены температурные зависимости электронной проводимости σ_e для сплавов $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$ и $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$. Видно, что графики похожи, за исключением того, что величина электронной проводимости $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$ на порядок меньше чем в случае с $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$. Таким образом, увеличение содержания лития от $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$ до $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$ приводит к резкому понижению электронной проводимости. Понижение электропроводности (более чем на порядок) при замещении меди литием в $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$ можно объяснить затрудненностью обмена электронами между катионами меди и лития.

Думаем, что, внедренные ионы лития, являясь центрами рассеяния, снижают подвижность дырок. Из вспомогательных графиков температурных зависимостей проводимостей твердого раствора $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$ в координатах $\ln\sigma_e$ ($\ln T$) можно определить механизм рассеяния. Если считать, что падение проводимости с температурой обусловлено только снижением подвижности μ_e носителей, из графиков $\mu_e \sim T^{-1,56}$, что свидетельствует о преобладании в $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$ рассеяния на тепловых колебаниях решетке.

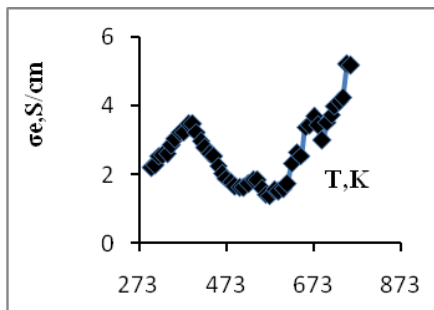


Рис. 1. Проводимость $\text{Li}_{0,06}\text{Cu}_{1,94}\text{S}$

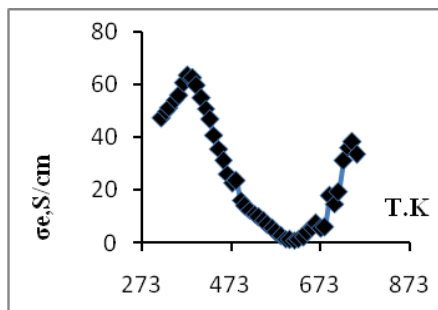


Рис. 2. Проводимость $\text{Li}_{0,1}\text{Cu}_{1,9}\text{S}$

Литература

1. Полупроводниковые халькогениды и сплавы на их основе / Под. ред. Н.Х.Абрикосова, В.Ф.Банкиной, Л.В.Порецкой и др. - М.: Наука, 1975. - 219 с.

СТРУКТУРА И ДИНАМИКА ДЕФЕКТОВ ХИРАЛЬНОГО НЕМАТИКА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

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

Экспериментально изучена динамика и взаимопревращение дефектов в нематохолестерических каплях, инициируемых электрическим полем. В случае капли с равновесным шагом спирали (P) больше чем радиус капли (R) ($R/P \leq 1$) образуется структура с одним дефектом типа Франка–Прайса [1], которая при достижении порогового значения напряжения $U = 1.5$ В, начинает вращаться как целое. На кривой зависимости $\omega(U)$

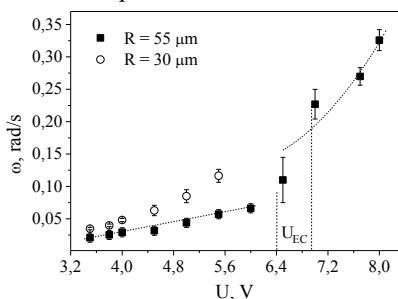


Рис. 1. Зависимость угловой скорости вращения дефектной структуры от приложенного напряжения U для нематохолестерика с шагом $P = 72$ мкм; U_{EC} – порог электроковективной неустойчивости.

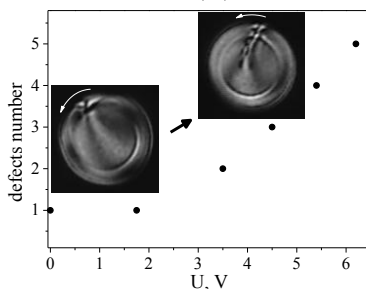


Рис. 2. Зависимость количества дефектов в цепочке от приложенного напряжения U в каплях нематохолестерика с шагом $P = 54$ мкм.

(рис. 1) для капель с $R = 55$ мкм можно выделить две области. В области напряжений $U < 6.4$ В вращение дефектной структуры капли связано с возможным электромеханическим эффектом [2]. При значениях $6.4 < U < 7$ В имеет место переходная область включения электроковективного механизма. В каплях с соотношением $R/P \geq 1$ наблюдаются более сложные процессы. В частности, дефект с зарядом $m = 2$ с увеличением электрического поля начинает ”диссоциировать“ и трансформируется в цепочку точечных дефектов единичной силы $|m| = 1$ (рис. 2). Обнаружено, что количество дефектов в цепочке зависит от величины электрического поля, и цепочка представляет собой систему чередующихся дефектов разного знака.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-02-97014 и №13-02-01117), гранта Республики Башкортостан молодым ученым и молодежным научным коллективам (договор № 5-2015) и стипендии Президента РФ СП-904.2013.1.

[1] C. Robinson, J.C. Ward, R.B. Beevers. Disc. Faraday Soc. 25, 29 (1958).

[2] N.V. Madhusudana, R. Pratibha. Liq. Cryst. 5, 1827 (1989).

СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ ТЕРМИЧЕСКИ НЕУПРОЧНЯЕМОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С, ПОДВЕРГНУТОГО РАВНОКАНАЛЬНОМУ УГЛОВОМУ ПРЕССОВАНИЮ И ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ПРОКАТКЕ

Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В.
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Исследовали влияние обработки, включавшей равноканальное угловое прессование (РКУП) и последующую изотермическую прокатку, на структуру и сверхпластичность (СП) термически неупрочняемого алюминиевого сплава 1570С (Al-5%Mg-0,2%Sc-0,08%Zr). Гомогенизированный слиток подвергали 3 проходам РКУП при температуре 325°C, а затем прокатке до суммарной степени обжатия 87%, при этой же температуре. Показатели СП сплава определяли при растяжении образцов с размерами рабочей части 1,5×3×6 мм, в интервале температур 350-520°C и скоростей деформации 10^{-3} - 10^{-1} с⁻¹. Структуру сплава исследовали методами оптической и электронной микроскопии.

Установлено, что литая, гомогенизированная структура сплава с равноосными зернами размером ~25 мкм становится в результате РКУП частично рекристаллизованной, содержащей около 20-30% новых зерен размером 1-2 мкм, формирующихся вдоль исходных высокоугловых границ. Показано, что сплав даже с такой структурой может демонстрировать высокоскоростную СП с удлинениями более 2000% при скоростях деформации $\sim 10^{-2}$ с⁻¹ и температурах выше 475 °С. Наибольшее удлинение ~2500% зафиксировано при температуре 520°C и скорости деформации $1,4 \times 10^{-2}$ с⁻¹.

После изотермической прокатки удельная доля рекристаллизованных зерен в структуре сплава увеличилась незначительно (до ~35-40%). При этом наибольшее удлинение (~2970%) сплав продемонстрировал при более высокой скорости деформации ($5,6 \times 10^{-2}$ с⁻¹) и меньшей температуре (500 °С).

Проанализированы особенности изменения параметров сверхпластического поведения сплава в зависимости от исходной структуры и температурно-скоростных условий нагружения.

©Мухаметдинова О.Э.,
Автократова Е.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев М.В., 2015 г.

УДК 538.911

**ЭФФЕКТ ГЕТЕРОГЕНИЗАЦИИ ПО ОСНОВНЫМ УПРОЧНЯЮЩИМ
ФАЗАМ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ КРИОПРОКАТАННОГО
АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА Д16**

Ильясов Р.Р., Автократова Е.В., Крымский С.В., Ситдииков О.Ш., Маркушев
М.В. Михайловская А.В., Кишик М.С.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
г. Москва, Россия

Методами оптической металлографии, просвечивающей и растровой электронной микроскопии изучены параметры продуктов гетерогенизирующего отжига – вторичных выделений частиц основных упрочняющих θ - и S-фаз, проведенного в широком диапазоне температур и выдержек предварительно закаленного сплава Д16 стандартного состава. Рассмотрено влияние размера и распределения этих частиц по размерам и объему на структуру матрицы сплава, формирующуюся в процессе последующей изотермической деформации прокаткой до суммарной степени $\epsilon \sim 2$ при температуре жидкого азота.

На основе анализа изменений твердости, зеренной структуры и фазового состава сплава на различных этапах обработки, сделаны рекомендации по оптимизации его гетерогенности с целью получения наиболее однородной и мелкозернистой структуры листов.

Рассмотрены особенности влияния гетерогенизации и ее параметров на структурно-механическое поведение сплава, в частности на процессы трансформации его структуры при прокатке и при последующем отжиге выше и ниже температуры сольвуса с различной скоростью нагрева и длительностью выдержки. Обсуждены природа и механизмы рекристаллизации сплава в зависимости от степени гетерогенности его структуры перед прокаткой.

Сделан вывод об эффективности разработанной схемы деформационно-термической обработки для получения новых, инновационных продуктов из сложнолегированных термически упрочняемых алюминиевых сплавов типа Д16, обладающих регламентированной структурой и фазовым составом, а также улучшенным комплексом служебных свойств.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-38-20654 мол_а_вед.

УДК 669.715;536.483;539.24*25

ЭФФЕКТ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ Т-ФАЗЫ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ КРИОПРОКАТАННОГО И СОСТАРЕННОГО АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА Д16

Крымский С.В.¹, Михайловская А.В.², Котов А.Д.², Яковцева О.А.²,
Автократова Е.В.¹, Ситдииков О.Ш.¹, Маркушев М.В.¹

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

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, Россия

Исследовали влияние размера частиц Т-фазы ($Al_{20}Cu_2Mn_3$) на параметры зеренной структуры и на микротвердость сплава Д16 после криогенной прокатки до степени $\epsilon \sim 3,5$ при температуре жидкого азота. Для этого горячепрессованный пруток перед прокаткой гетерогенизировали при температуре 505 °С в течение 1 и 72 часов и закаливали в воду, что позволило получить два состояния с частицами Т-фазы с размерами $\sim 115 \times 60$ и $\sim 180 \times 90$ нм.

Установлено, что при прокатке имело место интенсивное взаимодействие решеточных дислокаций с частицами Т-фазы, при этом размеры частиц не изменялись и они выстраивались в направлении прокатки, образуя строчки. При прокатке в обоих состояниях сплава сначала формировались малоразориентированные дислокационные (ячеистые и/или полосовые) структуры с широкими границами. С увеличением степени деформации происходило совершенствование таких структур, границы становились более узкими и упорядоченными вследствие увеличения в них плотности дислокаций. После прокатки со степенью $\sim 3,5$ лишь в состоянии после часовой выдержки (с частицами меньших размеров) обнаруживали новые границы с высокоугловыми разориентировками и новые зерна нанометрических размеров.

Обнаружено, что криопробатка обоих состояний, несмотря на различия в формирующихся структурах, приводит к увеличению микротвердости сплава практически до одинакового уровня (до ~ 180 НВ). При этом их твердость после гетерогенизации отличалась на 20-30 НВ, а наибольший ее прирост отмечался при прокатке до степеней $\sim 1,0$ в материале с большим размером частиц Т-фазы.

Полученные данные обсуждены с позиций современных представлений о физических процессах, происходящих в твердых телах в экстремальных условиях нагружения. Сделан вывод о роли дисперсных частиц в гетерогенном зарождении новых зерен при реализации рекристаллизации по непрерывному механизму.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-38-20654 мол_а_вед.

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ИОННЫЙ ПЕРЕНОС В ХАЛЬКОГЕНИДАХ МЕДИ И СЕРЕБРА

Степанов Ю.М., Хуснутдинов Д.М.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета
г. Стерлитамак, Россия

Суперионные проводники, или твердые электролиты обладают целым рядом уникальных физических свойств, главное из которых – высокая ионная проводимость. Для выявления общих закономерностей, присущих физико-химической природе ионного переноса в различных материалах, установления связи между структурой, динамикой решетки и свойствами смешанных ионно-электронных проводников, в качестве объектов исследования были выбраны халькогениды меди и серебра: $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$, $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Te}$, AgCuSe .

Эксперимент по неупругому рассеянию медленных нейтронов проводился на двойном времяпролетном спектрометре прямой геометрии ДИН-2ПИ, который расположен на одном из нейтронных пучков импульсного быстрого реактора ИБР-2 в Лаборатории Нейтронной Физики им. И.М. Франка ОИЯИ, (г. Дубна).

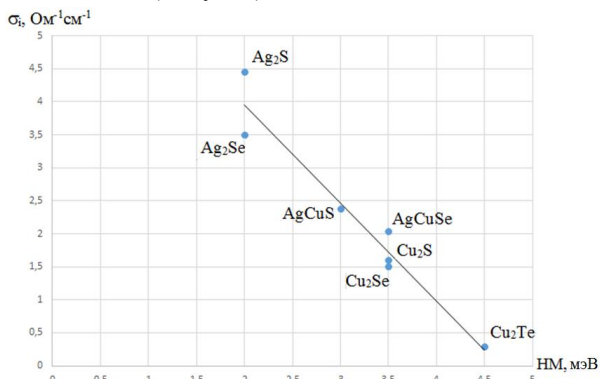


Рис. 1. Корреляция между величиной низкоэнергетической моды и величиной ионной проводимости для халькогенидов меди и серебра

Установлено, что величина низкоэнергетической моды коррелирует с величиной ионной проводимости и определяется электронным строением, соотношением масс подвижного катиона и аниона, поляризуемостью и степенью ионности их связи. Знание данных закономерностей позволит с помощью модельных экспериментов предсказывать суперионные свойства в новых соединениях и синтезировать суперионные проводники с заданными физико-химическими свойствами.

© Степанов Ю.М., 2015 г.

ЗОННАЯ СТРУКТУРА В ИНТЕРКАЛАТНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ НА ОСНОВЕ ДИХАЛЬКОГЕНИДА ЦИРКОНИЯ

Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Биккулова А.В., Нигматуллина Г.Р.
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Дихалькогениды циркония интеркалированные серебром относятся к широкому классу интеркалатных соединений на основе слоистых дихалькогенидов переходного металла (СДПМ). Дихалькогениды переходных металлов являются весьма перспективными как исходные решетки-матрицы для интеркалирования, поскольку эти материалы могут использоваться в качестве электродов новых поколений химических источников тока.

Расчет зонной структуры исследуемых соединений был выполнен в рамках теории функционала электронной плотности методом псевдопотенциала в базисе плоских волн, реализованный в программном

На рис. 1 приводится график зависимости энергии от волнового вектора (зонную структуру) для $ZrTe_2$. Из этой зависимости видно, что валентная зона разбивается на две подзоны энергий.

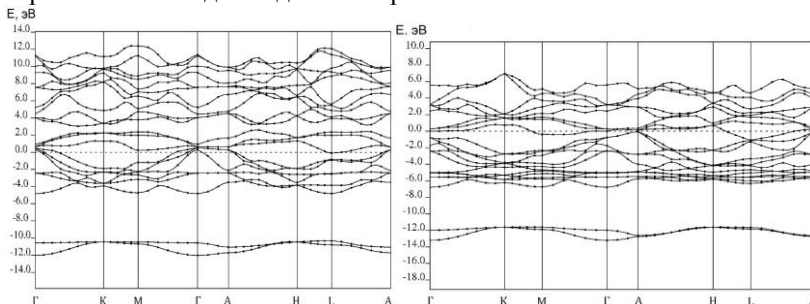


Рис. 1. Зонная структура: $ZrTe_2$, $AgZrTe_2$

Потолок валентной зоны образован р-состояниями Те и d-состояниями Zr. Зона проводимости формируется из d-, p-, s-состояний Zr и d-состояния Те с незначительным вкладом р-состояния Те, между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости энергетическая щель отсутствует, в зонной структуре $ZrTe_2$ имеет полуметаллический характер.

Литература

1. Gianozzi P. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open source software project for quantum simulations of materials // J. Phys.: Condes. Matter. 2009. V. 21. No 39. 395-502.

ВОЗДЕЙСТВИЕ РАДИОВОЛН МИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА НА БИОЛОГИЧЕСКУЮ ТКАНЬ

Ахметгалиев Б.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Проблема воздействия радиоволн миллиметрового диапазона на биологическую ткань и микроорганизмы остаётся чрезвычайно актуальной. Особое место занимает использование в медицине - так называемая КВЧ терапия. Данный метод терапии, использующий фиксированные частоты в диапазоне 42 - 78 ГГц - 42.2 ГГц (7.1мм), 53.5 ГГц (5.6 мм) и 60.7 ГГц (4.9 мм) является доступным, безопасным за счет низкой интенсивности неионизирующего излучения. На данный момент не известно случаев побочного действия на организм человека.

Электромагнитные волны миллиметрового диапазона обладают низкой проникающей способностью в биологические ткани (0,2 — 0,8 мм), практически полностью поглощаются поверхностными слоями кожи (молекулами воды, гидратированными белками, молекулами коллагена, клетками соединительной ткани), не оказывая при этом теплового воздействия. [1,2].

КВЧ-терапия нашла широкое применение при лечении: заболевания верхних отделов желудочно – кишечного тракта, патологии органов кровообращения и крови, хроническом бронхите, травме почек и др.

Местное воздействие ЭМИ КВЧ с шумовым спектром стимулирует течение регенераторных процессов в послеоперационных ранах, наблюдается снижение числа инфекционных осложнений послеоперационных ран в 3-5 раз. Таким образом, наряду с оптимизацией течения раневого процесса КВЧ-терапия выгодна и экономически. При ее использовании резко ограничивается применение лекарственных средств, сокращаются сроки госпитализации больных.[3]

В работе рассмотрены и обобщены имеющиеся сведения по проблемам воздействия ЭМИ КВЧ на биологические ткани.

Литература

- 1 Н.Д. Девятков, М.Б. Голант. Миллиметровые волны и их роль в процессах жизнедеятельности. 1991. М. Изд. Радио и связь. 169 с.
- 2 А.Б. Рубин. Биофизика (том 1). 2004. М.: Изд. МГУ. 448 с.
- 3 Н. Г. Соколова. Физиотерапия: Учебник для мед.вузов.2008.РнД Изд. Феникс 350 с.

© Ахметгалиев Б.М. 2015 г.

СЕКЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ РАДИОТЕХНИКИ И СВЯЗИ»

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВОСП-СР, В С И L ДИАПАЗОНАХ

Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время для протяженных линий наиболее эффективным способом является внедрение ВОСП-СР. При этом важной частью таких линий являются оптические усилители (ОУ), обеспечивающие одновременное усиление сигнала ВОСП-СР в требуемом диапазоне длин волн. В данной работе смоделирована 40 канальная DWDM система передачи, работающая в С и L диапазонах со скоростью передачи данных соответствующая уровню синхронной цифровой иерархии STM – 64.

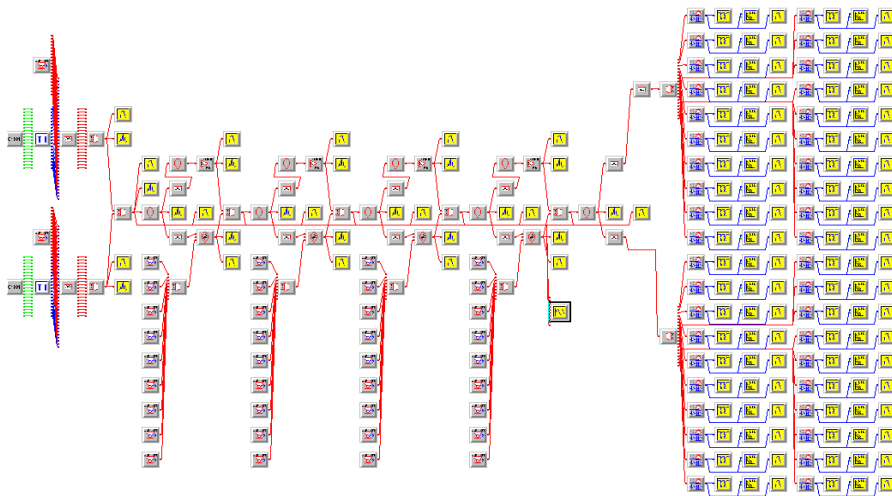


Рис. 1. Модель ВОЛП со спектральным разделением каналов, разработанная в системе автоматического проектирования LinkSim

Уменьшение дисперсии обоих диапазонов было достигнуто применением компенсирующего волокна.

Усиление С и L диапазонов произвели отдельно, разделив их предварительно оптическими фильтрами.

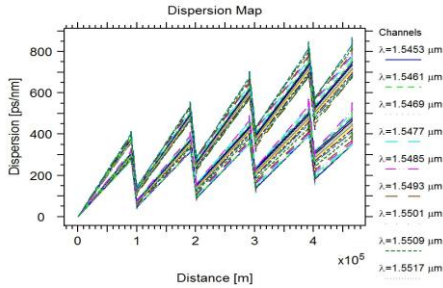


Рис. 3. Диаграмма дисперсии

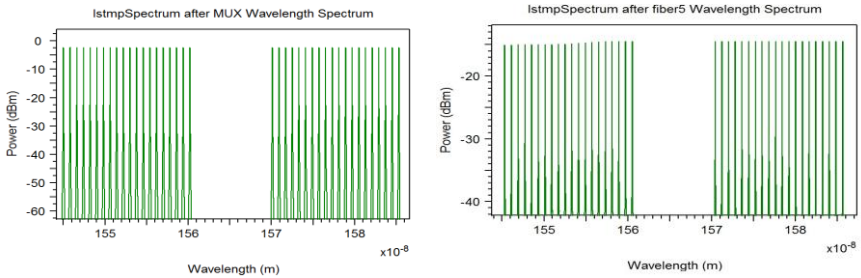


Рис.2. а) спектр сигнала после первого MUX б) спектр сигнала после 420 км

Также в данной работе были исследованы условия распространения волн по ВОЛП при изменении скорости передачи, расстоянию между усилителями, мощности накачки первых трех лазеров романовского усилителя.

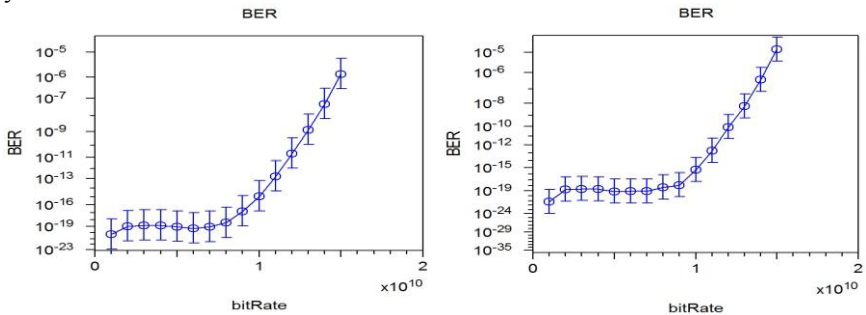


Рис. 3. Зависимость BER от скорости передачи для C и L диапазонов

Модель учитывает влияние дисперсионных и нелинейных эффектов, особенности оптического усиления и шумовые характеристики усилителей, и обеспечивает возможность исследования влияния различных факторов на параметры передачи.

УДК 621.391.63

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ WDM

Салимгареев Р.Р., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа,

Россия

В настоящее время широкое распространение в системах связи получила технология волнового мультиплексирования (WDM), позволяющая серьезно увеличить скорость передачи данных. В данной работе мы рассмотрим волокно с ненулевой смещенной дисперсией (NZDSF) и рассчитаем необходимые параметры линии связи с 10 каналами на участке Янаул –Бирск. Нами взято 10 рабочих длин волн от $\lambda_1=1546,92$ нм до $\lambda_{10}=1550,12$ нм из частотного плана.

Энергетическая длина участка $L_{\text{э}}$ рассчитывается по формуле:

$$P_{\text{ИМ}} - \alpha_{\text{И-ВС}} - N_{\text{Н}} \alpha_{\text{Н}} - \alpha L_{\text{э}} - \alpha_{\text{ВС-СД}} \geq P_{\text{ФДМ}} + \text{Э}$$

$$0,245L_{\text{э}} \leq -23,69$$

$$L_{\text{э}} = 96,7 \text{ км- энергетическая длина участка.}$$

Длина трассы Янаул –Бирск 115 км, что больше рассчитанной длины, поэтому необходимо применить оптический усилитель.

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

Длина регенерационного участка для максимальной взятой длины волны определяется из выражения:

$$L_{\text{д}} = \frac{\pi \times c}{8\lambda^2 \times |D| \times B^2} =$$
$$= \frac{3,14 \times 3 \times 10^8 \text{ м/с}}{8 \times (1550,12 \times 10^{-9})^2 \text{ м} \times 2,5 \times 10^{-6} \text{ с/м} \times (10^{10})^2 \text{ бит/с}} = 196,02 \text{ км}$$

Компенсатор дисперсии для данной трассы не требуется, так как полученная длина регенерационного участка больше длины трассы.

ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК X-ОБРАЗНОГО МНОГОСЛОЙНОГО ПЛАНАРНОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ

Хайруллин Т.Н., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Оптический ответвитель служит для объединения либо разъединения сигналов в оптическом волокне, когда создается разветвленная сеть передачи данных. Это многополюсное устройство, в нем излучение, которое поступает на полюса со стороны входа, распределяется среди его выходных оптических полюсов. Исследуем планарный X-образный ответвитель с многослойной структурой.

В формате основной программы САПРа VeamPROP внешний вид такого ответвителя показан на рисунке 1.

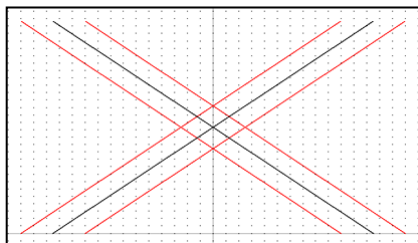


Рис. 1. X-образный ответвителью.

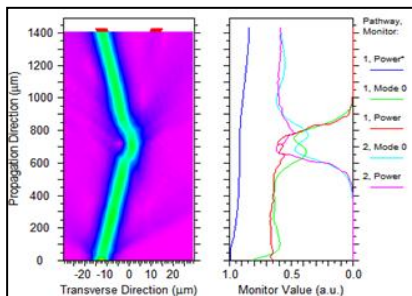
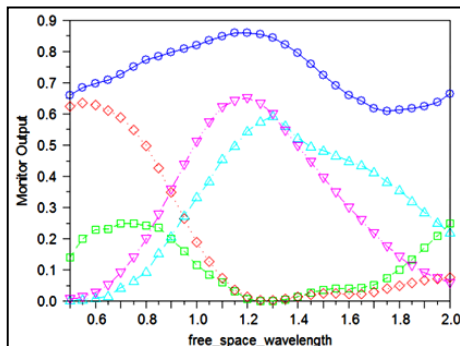


Рисунок 2. Распространение излучения

На рисунке 2 представлено распространение излучения в ответвителе (при $\lambda=1.31$ мкм). В данном случае практически все излучение проходит через 2-ой канал.



По графику (рис. 3) видим, что при $\lambda \approx 0.55$ мкм и $\lambda \approx 1.3$ мкм мощность излучения в первом и во втором каналах соответственно достигает своего пика.

Рис. 3. График зависимости мощности от длины волны

УДК 621.391.63

ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ ДЛЯ НУЖД ОАО РЖД НА УЧАСТКЕ УФА-КРОПАЧЕВО

Рыжиков О.А., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Количество сообщений, которое может быть передано по проводным частотным каналам связи, ограничено рабочей полосой частот, используемых для передачи информации. Расширение этой полосы в сторону высокочастотных диапазонов неэффективно в связи с резким увеличением при этом потерь энергии. Значительное расширение рабочей полосы частот становится возможным при использовании волоконно-оптических линий связи (ВОЛС).

Энергетическая длина участка рассчитывается по формуле:

$$P_{\text{ИМ}} - \alpha_{\text{И-ВС}} - N_{\text{Н}} \alpha_{\text{Н}} - \alpha L_{\text{Э}} - \alpha_{\text{ВС-СД}} \geq P_{\text{ФДМ}} + \mathcal{E};$$

$$L_{\text{Э}} \leq 120 \text{ км};$$

Длина регенерационного участка по дисперсии определяется из выражения:

$$L_{\text{Д}} \leq \frac{\pi * c}{8 * \lambda^2 * D * B^2}$$

$$L_{\text{Д}} = 223,8 \text{ км}$$

Так как расстояние по железной дороге между Уфой и Кропачево 164 км, что больше рассчитанной длины. Необходимо применить оптический усилитель.

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

Длина регенерационного участка по дисперсии, больше расстояния по железной дороге между Уфой и Кропачево. Компенсация дисперсии не требуется. Данный проект предоставляет потребителям весь спектр необходимых услуг связи.

УДК 621.391.63

ИССЛЕДОВАНИЕ НАПРАВЛЕННОГО ВОЛОКОННО- ОПТИЧЕСКОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ

Борисова Р.В., Лопатюк А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Оптические ответвители решают задачи разделения или объединения потоков оптического излучения, отвода части оптического излучения из

основного канала передачи в другие. Исследуем направленный волоконно-оптический ответвитель.

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

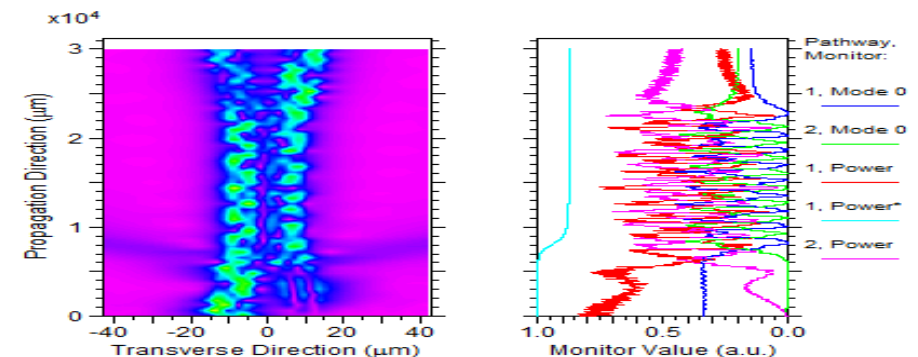


Рис.1. Оптический ответвитель в формате САПР-а и график распространения мощностей в ответвителе

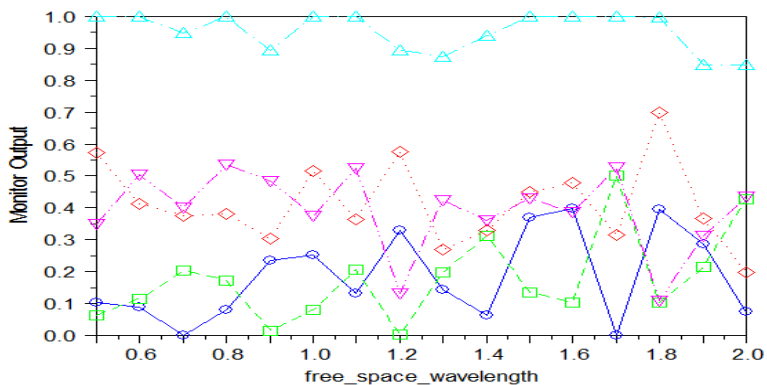


Рис. 2. График зависимости мощности от длины волны

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.

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

АНАЛИЗ ДИСПЕРСИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКОН ПРИ ДЕФЕКТАХ КОНСТРУКЦИИ

Валиуллин А.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Тема микроструктурированных волокон является наиболее актуальной в области волоконной оптики последнего времени. Уникальные дисперсионные свойства таких волокон и их зависимость от геометрии дырчатого волокна вызывают сильный интерес. Поэтому становится актуальной задача соблюдения точности формирования элементов структуры волокна в поперечном сечении. Сложность технологического процесса изготовления таких волокон определяет необходимость оценки влияния вариации диаметра отверстий и отклонения расположения отверстий относительно идеальной симметричной структуры в поперечном сечении ОВ. Анализ изменения дисперсионных характеристик для различных конструкций микроструктурированных оптических волокон (МОВ) позволяет провести оценку технологических допусков на конструктивные особенности (дефекты) конкретного образца. В докладе рассматриваются различные типы конструкций ОВ, два из которых изображены на рисунке [1-2]: обычное одномодовое МОВ и МОВ для компенсации хроматической дисперсии.



Рис. 1. Типы конструкций МОВ: а) для компенсации хроматической дисперсии; б) обычное одномодовое

Для анализа направляемых мод неслабонаправляющих оптических волокон, какими являются МОВ, применялся векторный метод конечных элементов с полностью векторным представлением электрических и магнитных полей [3].

Литература

1. Бурдин А.В., Бурдин В.А., Султанов А.Х., Дельмухаметов О.Р. Алгоритм расчета хроматической дисперсии одномодовых ОВ на основе метода смешанных конечных элементов // Инфокоммуникационные технологии. Т.7, №2, 2009. – С.13-16.

2. B. Kuhlmeiy, G. Renversez, and D. Maystre. Chromatic dispersion and losses of microstructured optical fibers // *Applied optics*, Vol.42, No.4, 2003. – P.634-639.
3. Koshiba M., Inoue K. Simple and Efficient Finite Element Analysis of Microwave and Optical Waveguides // *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* Vol. 40, №2, 1992. – P. 371-377.

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

УДК 523.681

МИНЕРАЛЫ ВНЕЗЕМНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Гонцова С.С., Максимова Е.М.

Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского,
г. Симферополь, Россия

Минералы являются составной частью пород земного строения и Солнечной системы в целом. Различие в условиях формирования объектов Солнечной системы привело к различиям в их минеральном составе. На сегодняшний день известно около 4000 минералов, из них ~ 280 найденных в метеоритах, [1].

В работе исследовался минеральный состав ряда образцов железных метеоритов (Дронино, Кампо-дель-Сьело, Сихотэ-Алиньский) методами рентгеновской дифрактометрии, сканирующей электронной микроскопии и рентгенофлуоресцентного анализа.

Из минералов, имеющих космическое происхождение, во всех образцах доминируют камасит α -(Fe,Ni) (низкотемпературная объемноцентрированная фаза железа) и тэнит γ -(Fe,Ni) (высокотемпературная гранецентрированная фаза железа). В метеоритах Кампо-дель-Сьело и Сихотэ-Алинском в виде включений встречаются также шрейберзит Fe_2NiP , когенит $(\text{Ni,Fe,Co})_3\text{C}$, добреелит FeCr_2S_4 , [2]. В метеорите Дронино – дрониноит $\text{Ni}_6\text{Fe}_3(\text{OH})_{16}\text{Cl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

Следует, отметить, что ряд характерных минералов образуется в метеоритах не в космосе, а в результате наземного изменения метеоритного железа, как, например, минерал чукановит $\text{Fe}_2[\text{CO}_3](\text{OH})_2$ в метеорите Дронино, [3].

Литература

- [1] Додд Р.Т. Метеориты. Петрология и геохимия: Пер. с англ. – М.: Мир, 1986. – 384
- [2] Гонцова С.С., Максимова Е.М., Наухацкий И.А., Милюкова Е.Т. Идентификация минеральных фаз железных метеоритов групп IAB и IIAB // XXI Всероссийская конференция студентов-физиков и молодых ученых: материалы конф. – Омск: АСФ России, 2015, с. 337-338
- [3] N. V. Chukanov, I. V. Pekov, L. A. Levitskaya, A. E. Zadov. Droninoite, $\text{Ni}_3\text{Fe}^{3+}\text{Cl}(\text{OH})_8 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, a new hydrotalcite-group mineral species from the weathered Dronino meteorite // *Geology of Ore Deposits*, 2009, v. 51, pp. 767-773.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОКАРОТАЖА ВЕРТИКАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ

Гаврилов А.К., Викторов С.В.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета
г. Стерлитамак, Россия

В работе рассмотрен алгоритм моделирования процесса исследования вертикальной скважины методом электрического зондирования. В модели учитывается глинистая корка вокруг скважины, которая формируется в результате бурения. При моделировании используется комбинированный метод интегральных преобразований и интегральных уравнений, формируемых на основе теории потенциала двойного слоя [1].

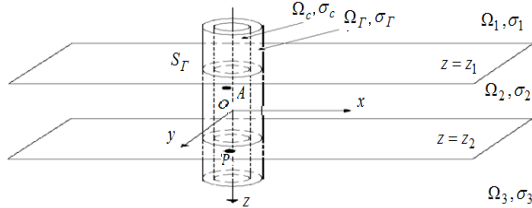


Рис. 1. Вертикальная скважина в слоистой среде

Математическая модель потенциального поля точечного источника $u(P)$ постоянного тока в данной среде имеет следующий вид:

$$\Delta u_c(P) = -\frac{I}{\sigma_c} \delta(P - A); \quad (1)$$

$$\Delta u_\Gamma(P) = 0; \quad \Delta u_i(P) = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad (2)$$

$$u_i(P)|_{z_i} = u_{i+1}(P)|_{z_i}, \quad \sigma_i \frac{\partial u_i(P)}{\partial z} \Big|_{z_i} = \sigma_{i+1} \frac{\partial u_{i+1}(P)}{\partial z} \Big|_{z_i}, \quad i = 1, 2; \quad (3)$$

$$u_i(P)|_{S_{\Gamma_i}} = u_\Gamma(P)|_{S_{\Gamma_i}}, \quad \sigma_i \frac{\partial u_i(P)}{\partial n} \Big|_{S_{\Gamma_i}} = \sigma_\Gamma \frac{\partial u_\Gamma(P)}{\partial n} \Big|_{S_{\Gamma_i}}, \quad i = 1, 2, 3; \quad (4)$$

$$u_c(P)|_{S_c} = u_\Gamma(P)|_{S_c}, \quad \sigma_c \frac{\partial u_c(P)}{\partial n} \Big|_{S_c} = \sigma_\Gamma \frac{\partial u_\Gamma(P)}{\partial n} \Big|_{S_c}; \quad (5)$$

$$u_c(P) \rightarrow 0, \quad u_\Gamma(P) \rightarrow 0, \quad u_i(P) \rightarrow 0, \quad P \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2, 3. \quad (6)$$

Литература

2. Викторов С.В. Комбинированный метод решения задачи электрокаротажа вертикальной скважины // Журнал Средневолжского математического общества, 2011. – Т. 13. – № 2. С. 57-62.

© Гаврилов А.К., Викторов С.В., 2015 г.

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

УДК 532

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РОСТА ЗАТРУБНОГО ДАВЛЕНИЯ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ГДИС В ДОБЫВАЮЩЕЙ СКВАЖИНЕ С ВЫСОКОЙ ОБВОДНЕННОСТЬЮ ПРОДУКЦИИ

Сарапулова В.В.

ООО «РН-УфаНИПИнефть», г. Уфа, Россия

Одним из наиболее распространённых методов гидродинамических исследований скважин является метод регистрации кривой восстановления давления в остановленной добывающей скважине. При закрытии скважины процесс восстановления забойного давления сопровождается ростом динамического уровня (границы раздела фаз «жидкость-газ») и давления газа в межтрубном пространстве скважины [1]. При росте давления газа выше предельного допустимого значения могут возникнуть технические проблемы на устье скважины. Актуальной является задача прогнозирования/предупреждения высокого затрубного давления при исследованиях скважин, в том числе в скважинах с высокой обводненностью продукции.

В данной постановке задачи полагается, что давление газа в затрубе добывающей скважины с высокой обводненностью при остановке на исследование определяется только ростом динамического уровня. При этом адаптация модели проводится введением приведенного радиуса через скин-фактор S .

Произведя сравнение промысловых и расчетных данных по данной модели получено, что при величине $S = -4.23$ они согласуются с достаточной для практики точностью. На момент окончания исследования расчетное значение затрубного давления равно 65 атм, промысловое – 70 атм (относительная погрешность составляет 7%). По сравнению с программой Saphir приведенная модель является более простой в реализации. При интерпретации промысловых данных в программном обеспечении Saphir при скин-факторе $S = -3.9$ происходит наилучшее совмещение кривых восстановления давления (относительная погрешность затрубного давления на момент окончания исследования не превышает 1%).

Данная модель с достаточной для практики точностью позволяет прогнозировать динамику роста затрубного давления при проведении исследований в добывающих скважинах с высокой обводненностью. Это позволяет предупреждать возможные технологические проблемы, связанные с нежелательным достижением высокого давления на устье скважины.

Литература

1. Шагиев Р.Г. Исследование скважин по КВД. - М.: Наука, 1998, 304 с.

УДК 536.2, 532.546

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СКИН-ЗОНЫ НА ОСНОВЕ ТЕРМОГДИС ОСТАНОВЛЕННЫХ НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИН*

Бобренёва Ю.О.¹, Иткулова Ю.А.¹, Марьин Д.Ф.², Давлетбаев А.Я.¹

¹РН-УфаНИПИнефть, г. Уфа, Россия

²Лаборатория гидродинамических процессов в многофазных системах Башкирского государственного университета, г. Уфа, Россия

В процессе эксплуатации скважин по различным причинам происходит ухудшение фильтрационных характеристик призабойной зоны пласта (ПЗП). В связи с этим одной из основных задач нефтедобычи является поддержание ПЗП в состоянии, позволяющем достаточно полно использовать потенциальные возможности пласта по притоку и приемистости. Следовательно, диагностика ПЗП является одной из основных задач гидродинамического исследования скважин (ГДИС). Основными параметрами, характеризующими ухудшение ПЗП, являются проницаемость и радиус зоны загрязнения. Однако существующая методика ГДИС [1] не позволяет определять эти характеристики. Поэтому развитие методики, основанной на использовании температурных данных [2], может дополнить стандартный подход и определить неизвестные параметры пласта.

В работе предложена методика ТермоГДИС для остановленных нагнетательных скважин. На основе численного моделирования выявлено, что после остановки скважины основным источником тепла является теплообмен с окружающей средой, а главным теплоносителем является теплопроводность. Однако на начальных этапах (порядка 2-3 часов), пока отток нагнетаемой жидкости в пласт продолжается, основную роль теплоносителя выполняет конвективное слагаемое. Этот начальный этап и представляет существенный интерес, поскольку по скорости оттока жидкости можно определить радиус и проницаемость скин-зоны.

Предложенная методика ТермоГДИС опробована на промысловых данных. На основе успешно проведенного ГДИС методом КПД проведена интерпретация температурных данных, в результате которой были определены радиус и проницаемость загрязненной зоны.

**Работа выполнена при финансовой поддержке ООО «РН-Юганскнефтегаз».*

Литература

1. Earlougher R.C. Advances in well test analysis // Society of Petroleum Engineer's Monograph 5 – 1977. – 264 p.
2. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. – Москва: Недра, 1965. 238 с.

© Бобренёва Ю.О., 2015 г.

ЗУБНЫЕ ИМПЛАНТАТЫ ЧУЛОЧНОГО ТИПА

Шарипов Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Зубные имплантаты чулочного типа — это принципиально новый класс зубных имплантатов, нацеленный на максимальное воспроизводство биологических и потребительских свойств естественных зубов после их утраты. Каждый такой имплантат формируется из мягкого затвердевающего материала внутри оболочки из биологически совместимого материала, которая имитирует форму естественного зуба. Внутри и на поверхности оболочки имплантата предусматриваются структуры 1) для надёжной фиксации имплантата в челюстной кости, 2) для его амортизации, 3) для регенерации пульпы и её иннервации, 4) для регенерации периодонта и его иннервации 5) для циркуляции жидкости внутри тела имплантата, 6) для самовосстановления имплантата биологической тканью по мере его износа 7) для адгезии с десной. Детальное описание этих структур содержится в патентах [1] и [2].

Создание зубных имплантатов с перечисленными выше структурами требует решения целого ряда интересных задач, как медико-биологического профиля, так и инженерно-технического и технологического профиля. С точки зрения прикладной физики здесь имеются задачи

1) подбора материала для обеспечения требуемых механических свойств;

2) изготовления многослойной оболочки с волокнистой структурой на одной или сразу на двух поверхностях с прохождением волокон сквозь оболочку;

3) создания полостей внутри мягкого затвердевающего материала и сквозных пор субмиллиметрового или даже микронного масштаба.

На данный момент создание зубных имплантатов чулочного типа находится на стадии формирования проекта, выбора технологий, поиска инвесторов, поиска соисполнителей и подрядчиков с требуемыми технологическими возможностями. Потенциальный рынок оценивается в 7 миллиардов жителей Земли, которые рано или поздно сталкиваются с потерей зубов.

Литература

1. Патент № 2401082 РФ МПК А61С8/00. Полимерный зубной имплантат чулочного типа и способ его применения / Шарипов Р. А., Опубликовано 10.10.2010 г., Бюл. 28.
2. Патент № 2559094 РФ МПК А61С8/00. Зубной имплантат чулочного типа в закрытом исполнении / Шарипов Р. А. Опубл. 10.08.2015 г., Бюл. 22.

© Шарипов Р. А., 2015 г.

АНАЛИЗ ДИНАМИКИ ТЕМПЕРАТУРЫ В НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИНАХ НА ОСНОВЕ ТРЕХМЕРНОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рабцевич Ю.А.¹, Иткулова Ю.А.², Давлетбаев А.Я.²

¹Лаборатория гидродинамических процессов в многофазных системах
Башкирского государственного университета, г. Уфа, Россия

²РН-УфаНИПИнефть, г. Уфа, Россия

Использование температурных данных позволит улучшить стандартную методику гидродинамического исследования скважин. Большое число работ посвящено термозондированию пласта при работе добывающих скважин с постоянным дебитом (например, [1]). Однако исследованию температурных эффектов в остановленных нагнетательных скважинах практически не уделялось внимания. Анализ плоско-радиальной модели показал, что основное влияние на изменение температуры на забое таких скважин оказывает теплообмен с окружающей средой. Этот источник тепла определяется коэффициентом теплообмена с окружающей средой. Однако вид коэффициента остается под вопросом. Трехмерное численное моделирование позволит напрямую учесть влияние кровли и подошвы на изменение температуры в пласте, и тем самым обосновать вид коэффициента обмена с окружающей средой. Для моделирования используются ресурсы гидродинамического симулятора «Eclipse».

Для численных расчетов использовалась трехмерная прямоугольная неравномерная сетка. Результаты моделирования показали, что во время работы нагнетательной скважины холодная закачиваемая жидкость охлаждает кровлю, а во время ее остановки наблюдается обратный эффект – нагрев пласта от окружающих пород.

Анализ чувствительности для различных значений толщины кровли показал, что выбор толщины кровли должен зависеть от времени работы скважины, теплофизических и физических параметров задачи. Анализ результатов трехмерного численного моделирования показал, что в некотором приближении для 10 суток остановки нагнетательной скважины можно брать коэффициент теплообмена с окружающей средой константой.

Литература

1. Чекалюк Э.Б. Термодинамика нефтяного пласта. – Москва: Недра, 1965. – 238 с.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА
НАГНЕТАНИЯ МЕТАНА В СНЕГ, СОПРОВОЖДАЕМОЕ
ГИДРАТООБРАЗОВАНИЕМ**

Русинов А.А., Чиглинцева А.С.

Бирский филиал Башкирского государственного университета
Бирск, Россия

Как известно, образование и отложение твердых фаз в пластах и в системах подземного и наземного оборудования нефтяных и газовых месторождений является одной из основных проблем нефтегазовой отрасли. Наибольший интерес среди таких отложений представляют газовые гидраты – твердые кристаллические соединения, образующиеся при определенных термобарических условиях и имеющие в своей основе газ (чаще метан) [1].

Процессы техногенного образования гидрата в настоящее время носят чаще негативный характер, обусловленный затратами на устранение таких отложений при добыче и транспортировке углеводородного сырья. Однако такие процессы могут иметь и положительный аспект, например, использоваться для хранения газа. Это обуславливается тем, что в гидратном состоянии может храниться газ достаточно больших объемов [2].

В работе рассматривается модельная задача о процессе гидратообразования, происходящего при нагнетании холодного газа в пласт, насыщенного снегом. В исходном состоянии значения температуры и давления снега и метана соответствуют термодинамическим условиям существования их в свободном состоянии. Полагаем, что через границу пласта закачивается такой же газ, причем, температуру инжектируемого газа считаем равной температуре конденсированных фаз (снега, гидрата и воды).

В зависимости от исходного термобарического состояния системы «снег+газ», а также интенсивности нагнетания газа, определяемой значением давления, могут возникать различные характерные зоны в области фильтрации. В зонах, где одновременно находятся снег, газ и гидрат или вода, газ и гидрат считаем, что выполняется условие фазового равновесия. В ходе проведенного численного эксперимента получены распределения давления, температуры, а также насыщенностей фаз в характерных зонах.

Литература

1. Шагапов В.Ш., Мусакаев Н.Г., Хасанов М.К. Нагнетание газа в пористый резервуар, насыщенный газом и водой // Теплофизика и аэромеханика. – 2005. – Т. 12, № 4. – С. 645-656.
2. Шагапов В.Ш., Чиглинцева А.С., Русинов А.А. О миграции пузырьков в условиях образования гидрата // Прикладная механика и техническая физика. – 2015. – №2. – С. 43-52.

ЗАМЕЩЕНИЕ МЕТАНА ДИОКСИДОМ УГЛЕРОДА В ГАЗОГИДРАТЕ ПРИ ДОБЫЧЕ МЕТАНА ИЗ ГИДРАТНОГО ПЛАСТА

Рафикова Г.Р.

Бирский филиал Башкирского государственного университета

г. Бирск, Россия

В настоящее время большое внимание уделяется проблеме поиска и разработки альтернативных источников энергии. Одними из перспективных источников энергии являются залежи газогидрата, запасы метана в которых превышают запасы всех открытых на сегодняшний день углеводородных месторождений [1]. Представляется, что одним из перспективных способов извлечения метана из газогидратного пласта является его замещение из состава гидрата диоксидом углерода [2,3]. Организованный искусственно такой круговорот, с одной стороны, позволит организовать добычу природного газа, а с другой, позволит утилизировать углекислый газ необходимых объемов без отрицательных экологических последствий.

В работе рассматривается процесс добычи метана из гидратного пласта путем закачки углекислого газа в пласт и замещения метана диоксидом углерода в газовом гидрате. Математическая модель задачи состоит из уравнений сохранения масс, Менделеева-Клапейрона, законов Дальтона, Дарси и закона Фика. Полагается, что процесс происходит в области стабильности гидратов метана и диоксида углерода.

Полученная система дифференциальных уравнений для плотности газовой смеси и плотности углекислого газа, гидратонасыщенности диоксида углерода в пористой среде позволяет оценить зависимости времени изменения основных параметров от значений коэффициента диффузии и выявить при каких параметрах будут реализовываться наиболее выгодные режимы добычи метана и консервации углекислого газа.

Литература

1. Макогон Ю.Ф. Газогидраты. История изучения и перспективы их освоения // Геология и полезные ископаемые Мирового океана. 2010. №2. С. 5-21.
2. Цыпкин Г. Г. Математическая модель инъекции углекислого газа в пласт с образованием гидрата // Доклады академии наук. 2014. № 4. С. 422–425.
3. Воронов В.П., Городецкий Е.Е., Григорьев Б.А., Муратов А.Р. Экспериментальное исследование процесса замещения метана в газовом гидрате диоксидом углерода // Вести газовой науки. 2011. №2 (7). С. 235-248.

© Рафикова Г.Р., 2015 г.

АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА ИЗМЕНЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ПРИЗАБОЙНОЙ ЗОНЕ ПЛАСТА*

Сельтикова Е.В.¹, Иткулова Ю.А.², Мусин А.А.¹, Давлетбаев А.Я.²

¹Лаборатория гидродинамических процессов в многофазных системах
Башкирского государственного университета, г.Уфа, Россия

²РН-УфаНИПИнефть, г.Уфа, Россия

Снижение дебита нефти является одной из главных проблем нефтедобычи и зависит от многих факторов, в том числе от состояния призабойной зоны пласта (ПЗП). Оценка различных температурных эффектов во время работы и остановки нагнетательных/добывающих скважин поможет определить какой фактор оказывает наибольшее влияние на изменение температуры во время работы или остановки скважины.

Для проведения такого анализа был разработан численный код на основе метода контрольного объема [1]. Рассматривалась одномерная радиальная фильтрация жидкости в пласт с учетом влияния ствола скважины и послепритока. Численный анализ показал, что учет этих факторов сильно влияет на изменение температуры, особенно вблизи скважины. Решалась полная задача на давление и температуру. Сначала находилось распределение давления по пласту. Зная распределение давления, определялась скорость фильтрации жидкости. Далее решалось уравнение на температуру с учетом всех тепловых эффектов (теплопроводности, конвекции, эффекта Джоуля-Томсона, адиабатического расширения и теплообмена с окружающей средой).

Оценка температурных эффектов показала, что в работающих добывающих скважинах основное влияние на изменение температуры оказывает эффект Джоуля-Томсона, в остановленных добывающих и нагнетательных – теплообмен с окружающей средой.

Анализ изменения температуры на забое в присутствии загрязненной зоны показал, что с уменьшением проницаемости скин-зоны температура на забое для добывающих скважин увеличивается, для остановленных нагнетательных с холодной закачкой эффект нагрева вблизи забоя проявляется позже.

Проведенный анализ полезен для разработки и выбора методики при термогидродинамическом исследовании скважин.

**Работа выполнена при финансовой поддержке ООО «РН-Юганскнефтегаз».*

Литература

1. Патанкар С. // Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат. 1984. 152 с.

УДК 538.7

ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ПЛАСТЕ ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ ТЕПЛООБМЕНЕ С ОКРУЖАЮЩИМИ ПОРОДАМИ

Султанова А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При закачке теплоносителя в пласт температурное поле пласта, кроме расхода Q_0 и температуры T закачиваемой жидкости, в значительной степени определяется теплообменом с окружающими пласт породами. Для оценки потерь тепла из пласта рассматривается решение следующей задачи:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - v(\rho c)_f \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{\alpha_0}{\sqrt{t}} (T - T_0); \quad r_w < r < \infty \quad (1)$$

$$T(r, t = 0) = T_0, \quad T(r = r_w, t) = T_w. \quad (2)$$

В (1)-(2) λ – теплопроводность пласта, ρc и $(\rho c)_f$ – объемные теплоемкости пласта и закачиваемой жидкости, скорость фильтрации $v = \frac{Q_0}{2\pi r h}$, h – мощность пласта. Коэффициент теплообмена определяется из

выражения $\alpha_0 = \frac{(\rho c)_0}{h} \sqrt{\frac{\alpha_0}{\pi}}$, где $(\rho c)_0$ и α_0 – объемная теплоемкость и температуропроводность окружающих пласт пород, r_w – радиус скважины.

Решение задачи (1)-(2) получено в виде:

$$T(r, t) = T_0 + (T_w - T_0) \frac{1}{\Gamma(\theta)} \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} e^{-\left(z + \frac{\alpha_0 r}{\rho c \sqrt{az}}\right)} z^{\theta-1} dz. \quad (3)$$

Здесь $\Gamma(\theta)$ – гамма функция, $\theta = \frac{Q_0 (\rho c)_f}{4\pi a h \rho c}$.

Численные расчеты, проведенные по формуле (3), позволяют определить влияние на температуру пласта различных факторов и оценить дол. Потерь тепла в окружающую среду.

НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ПРИТОК ЖИДКОСТИ ИЗ ПЛАСТА В СКВАЖИНУ ЧЕРЕЗ ТРЕЩИНУ ГИДРОРАЗРЫВА

Евграфов Н.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Гидравлический разрыв пласта один из наиболее эффективных методов увеличения нефтеотдачи. Для его осуществления необходимо знать, как изменяется давление в трещине гидроразрыва при различной проницаемости в любой момент времени. Постановка задачи выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial P_r}{\partial t} = \kappa_r \left(\frac{\partial^2 P_r}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P_r}{\partial y^2} \right) \quad 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq h_r,$$

$$\frac{\partial P_f}{\partial t} = \kappa_f \left(\frac{\partial^2 P_f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P_f}{\partial y^2} \right) \quad 0 \leq x \leq L, \quad w_r \leq y \leq 0.$$

$$k_r \frac{\partial p_r(x, y = 0, t)}{\partial y} = k_f \frac{\partial p_f(x, y = 0, t)}{\partial y}$$

$$P_r(x, y = 0, t) = P_f(x, y = 0, t).$$

$$\frac{\partial p_r(x = 0, y, t)}{\partial x} = \frac{\partial p_r(x = L, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial p_r(x, y = h_r, t)}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial p_f(x = L, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial p_f(x, y = -w_f, 0)}{\partial y} = 0$$

$$P_f(x = 0, t) = P$$

Задача решается аналитически и численно.

Литература

1. Константинов С.В., Гусев В.И. Техника и технология проведения гидравлического разрыва пластов за рубежом. – М.:Недра, 1997. - 304 с.
3. Gidley J.L., Holditch S.A., Nierode D.E., Veatch R.W. Recent advances in hydraulic fracturing. – Monograph Series, 1989. – 145 с.

Евграфов Н.А., 2015 г.

**ОЦЕНКА ФАКТОРА СНИЖЕНИЯ ПРОВОДИМОСТИ
РАСКЛИНИВАЮЩЕГО МАТЕРИАЛА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ
ЖИДКОСТИ ГИДРОРАЗРЫВА НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ
ЗАПАДНОЙ СИБИРИ**

Шангареев И.И., Назарова А.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

ГРП является в настоящее время наиболее результативным геолого-техническим мероприятием, обеспечивающим кратное увеличение добычи нефти и повышение эффективности разработки низкопроницаемых коллекторов за счет создания высокопроводящей трещины, закрепленной расклинивающим наполнителем (пропантом).

Пропанты или расклинивающие наполнители представляют собой керамический песок, изготавливаемый на основе каолиновых и бокситовых глин. Высокая гидравлическая проводимость (проницаемость) упаковки пропанта является одной из важнейших характеристик расклинивающих наполнителей [1].

Вследствие массового применения ГРП при добыче нефти изучение проводимости расклинивающих наполнителей в пластовых условиях является крайне актуальным. Исследования проводимости пропанта позволят оптимизировать дизайн проведения мероприятий ГРП, а также оценить степень снижения во времени проводимости пропанта для геолого-физических условий месторождений.

Экспериментальные исследования проводимости пропанта позволяют изучить фильтрационные процессы в трещине ГРП и оценить влияние различных факторов на снижение остаточной проводимости пропанта для различных геолого-физических условий объектов разработки.

Исследования подверглась многокомпонентная система(жидкость) применяемая в пластовых условиях 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).

Критерием выбора жидкости ГРП явилась загрузка полимера, условно разделенная на типы– гель №24, №30, №34.

Для расчета фактора снижения проницаемости рекомендуется использовать корреляционную формулу, представленную на рисунке 1. Данная корреляционная зависимость позволяет находить значения для различной концентрации полимера в жидкости ГРП [2].

Результаты исследований по оценке фактора снижения проводимости пропантной пачки в зависимости от типа технологической жидкости ГРП демонстрируют, что:

- средние значения остаточной проницаемости для средних рецептур жидкости ГРП применяемых на месторождениях Западной Сибири, являются приемлемыми (более 0.33) и соответствуют значениям известным в мировой практике (0,3-0,4);

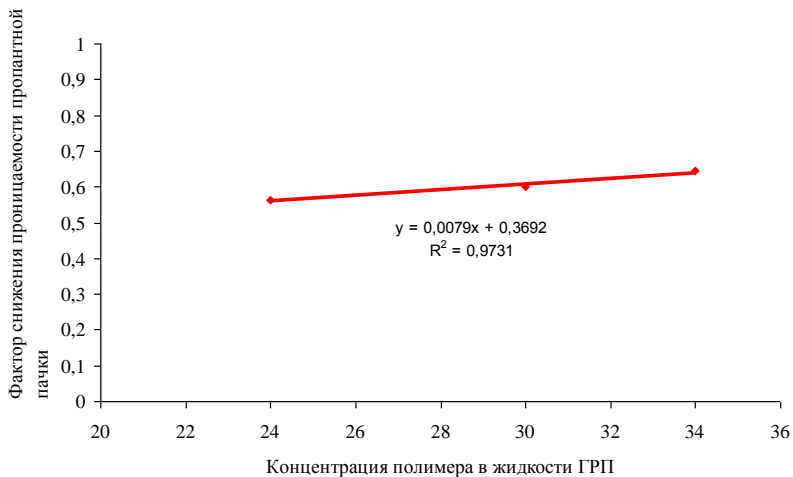


Рис. 1. Фактор снижения пропантной пачки

- контроль качества применяемых реагентов и достаточности концентрации брейкера (деструктор) при проведении ГРП является крайне актуальной и важной задачей, которая эффективно решается лабораторными исследованиями;

Многокомпонентная система (средние рецептуры) подвергшиеся тестированию показали приемлемые результаты и рекомендованы к применению на месторождениях Западной Сибири.

Литература

1. ГОСТ Р 51761-2005 «Пропанты алюмосиликатные».
2. API RP 61: 1989. Рекомендуемая методика оценки испытаний на кратковременную проводимость пачки расклинивающего материала. Общее введение = Recommended practice for evaluating short term proppant pack conductivity. – Введ. 01.10.1989. – 21 с.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЧ ЭМ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВОДО-НЕФТЯНЫЕ ЭМУЛЬСИИ

Тухбатова Э.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Эмульсии представляют собой дисперсную систему, которая состоит из мелких капель жидкости, находящихся в другой жидкости. Распространенными примерами эмульсий являются молоко, некоторые лекарства, вода в нефти.

С течением времени все эмульсии самопроизвольно разрушаются. Однако, если в одних случаях распад эмульсии на дисперсную и дисперсионную фазу составляет несколько секунд, то в других случаях процесс распада может длиться больше года. Для того, чтобы ускорить процесс разрушения эмульсий, применяют различные техники, способствующие этому процессу. Одним из способов разрушения эмульсий является термический метод, основанный на использовании энергии СВЧ поля.

Работа посвящена построению математической модели СВЧ ЭМ воздействия на водо-нефтяные эмульсии с учетом конвективных течений, их численному исследованию с использованием метода контрольных объемов на языке программирования MATLAB.

Рассматривается инвертная эмульсия, в которой дисперсной фазой являются капли воды, дисперсионной – нефть. При нагреве дисперсной системы возникают свободно-конвективные течения, которые так же учитываются при построении математической модели. Математическое моделирование основано на модели, предложенной в работах [1, 2].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 14-01-97005.

Литература

1. Закирьянова Г.Т., Ковалева Л.А., Насыров Н.М. Исследование процессов тепломассопереноса и динамики расслоения эмульсии при воздействии электрических полей // Вестник ЮУрГУ. – 2009. № 22(1). – С. 59-65.
2. Закирьянова Г.Т., Ковалева Л.А., Мусин А.А., Насыров Н.М. О влиянии высокочастотного и низкочастотного электрических полей на расслоение эмульсии // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. – 2010. Т. 13. № 2. – С. 83-89.

ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ ПЛАСТА ПРИ ЗАКАЧКЕ ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ ТЕПЛООБМЕНА С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ

Петрова Е.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается задача, описывающая распределение температуры T в пласте при закачке в пласт жидкости через скважину с постоянным дебитом:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) - v(\rho c)_f \frac{\partial T}{\partial r} - \alpha(T - T_c); \quad r_w < r < \infty \quad (1)$$

$$T(r = r_w, t) = T_w, \quad T(r, t = 0) = T_c \quad (2)$$

В отличие от задачи, рассмотренной в [1], здесь учитывается стационарный теплообмен пласта с окружающими породами. Поток тепла через кровлю и подошву пласта считается пропорциональным разности усредненной по толщине пласта температуры $T(r, t)$ и начальной температуры окружающих пород. Скорость фильтрации жидкости определяется из решения гидродинамической задачи и принимается в виде:

$$v = \frac{Q}{2\pi hr} \quad (3)$$

В (1)-(3) (ρc) и $(\rho c)_f$ – объемная теплоемкость пласта и флюида. α – коэффициент теплообмена, Q – расход флюида, h и λ – мощность и теплопроводность пласта.

Аналитическое решение задачи получено в виде:

$$T(r, t) = T_c + (T_w - T_c) \frac{1}{\Gamma(\theta)} \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} e^{-\left(z + \frac{\alpha r^2}{\rho c 4az}\right) z^{\theta-1}} dz, \quad z = \frac{r^2}{4a(t - \tau)} \quad (4)$$

Здесь $\alpha = \frac{\lambda}{\rho c}$, $\Gamma(\theta)$ – гамма-функция.

При $\alpha = 0$ из (4) следует решение задачи, полученное в [1].

Расчеты по формуле (4) позволяют определить основные характеристики исследуемого процесса.

Литература

1. Петрова Е.Ю. «Моделирование температурного поля пласта при плоскорадиальной фильтрации жидкости» // Вторая межрегиональная школа-конференция «Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах». – Уфа, 2015 – с. 135.

ИЗУЧЕНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДОПИРОВАННЫХ НЕПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЯХ МЕТОДОМ ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Кабанова П.К., Картавцева И.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время изучение электропроводности неполярных жидкостей, допированных поверхностно-активными веществами (ПАВ), является актуальной задачей [1]. Особенно это связано с развитием направлений практического применения наблюдаемых эффектов.

Экспериментально были исследованы растворы неионного ПАВ Span 80 в неполярной жидкости – тетрадекане различных концентраций. Основным методом исследования являлся метод спектроскопии электрохимического импеданса, основанный на измерении полного сопротивления (импеданса) ячейки и зависимости этого сопротивления от частоты приложенного переменного гармонического напряжения [2].

Ранее нами было использовано приближение простейшей эквивалентной схемы [3], учитывающей лишь свойства диффузного слоя. Однако было установлено, что данная эквивалентная схема не описывает все параметры нашей системы.

В настоящей работе нами была применена схема, учитывающая также адсорбционные процессы на поверхностях электродов. В результате анализа полученных результатов определены характеристики носителей заряда, свойства адсорбционного и диффузного слоев.

Литература

1. Andrei Dukhin and Sean Parlia // Current Opinion in Colloid & Interface Science, 2013, v. 18, pp. 93–115.
2. Графов Б.М., Укше Е.А. Электрохимические цепи переменного тока// М.: Наука, 1973. - 128 с.
3. Кабанова П.К., Картавцева И.А. Изучение процесса переноса заряда в растворе ПАВ-неполярная жидкость: тез. докл. ВНКСФ-21: 2015, с. 195.

© Кабанова П.К., Картавцева И.А., 2015 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕРМОЗАВОДНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ПЛАСТА НА ОСНОВЕ СХЕМЫ ЛОВЕРЬЕ

Хисамов А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Опыт освоения залежей высоковязкой нефти и битумов показал, что перспективной технологией разработки месторождений являются термические методы.

Целью данной работы является исследование распределения температуры пласта в течение этапа закачки на основе схемы Ловерье.[1,2] Согласно этой схеме в пласте рассматривается усредненная по толщине температура, при этом теплопроводность пласта в горизонтальном направлении не учитывается. В окружающих пласт породах учитывается теплопроводность в вертикальном направлении. Тогда температура в окружающих пласт породах описывается следующим уравнением:

$$T_2(z, r, t) = T_0 + (T_w - T_0) \operatorname{erfc} \left(\frac{z + \frac{r^2 \lambda_2}{4\theta \rho c a_2 h}}{2\sqrt{a_2 t - \frac{r^2}{4\theta}}} \right) H \left(a_2 t - \frac{r^2}{4\theta} \right) \quad (1)$$

$$\theta = \frac{Q}{4\pi a_2 h} \frac{(\rho c)_f}{\rho c}$$

где $H(x)$ – функция Хэвисайда; $\theta = \frac{Q}{4\pi a_2 h} \frac{(\rho c)_f}{\rho c}$ – конвективный параметр. Температура в пласте $T_1(r, t)$ определяется из (1) при $z=0$. В (1) T_w и T_0 – температуры закачиваемой жидкости и пласта, Q – расход закачиваемого теплоносителя, λ_2 и a_2 – теплопроводность и температуропроводность окружающих пород, h – толщина пласта, $(\rho c)_f$ и ρc – объемные теплоемкости флюида и пласта.

На основе проведения численных расчетов по формуле (1) получены результаты, которые могут быть использованы для оценки эффективности применения термических технологий в нефтедобыче.

Литература

1. Louwerier H.A. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of hot fluid. Applied Scientific Research. Section A, 1955, vol 5, №2,3.
2. Хисамов А.А. Моделирование процесса термозаводнения нефтяного пласта с трещиной гидроразрыва // Тезисы докладов Второй межрегиональной школы-конференции) «Теоретические и экспериментальные исследования в конденсированных средах», г.Уфа, 2015, с150-151.

© Хисамов А.А., 2015 г.

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НЕСКОЛЬКИХ ТЫСЯЧ
ПУЗЫРЬКОВ В БЕЗГРАНИЧНОЙ ЖИДКОСТИ**

Гильманова Г.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Самоорганизация пузырьков в акустическом поле или самодействие акустических волн в пузырьковой жидкости - это сильно нелинейный эффект, обязанный своим существованием двустороннему взаимодействию пузырьков и акустического поля. Осциллирующие градиент давления и объем пузырьков приводят к осредненной силе, действующей на пузырьки (сила Бьеркнеса), которая вызывает дрейф пузырьков в более медленном масштабе времени, чем период акустического поля. В свою очередь, поскольку пузырьки играют важнейшую роль в дисперсии и диссипации звука, их миграция вызывает изменение поля. Это приводит к проявлению интересных нелинейных явлений, таких как самофокусировка и самоиндуцированная прозрачность, а также формированию нитевидных структур [1, 2].

В данной работе был разработан трехмерный код реализующий динамику многих тысяч пузырьков одинакового радиуса под действием акустического поля в безграничной жидкости. Источник акустических волн находится в начале координат, пузырьки равномерно распределены вблизи источника, после включения источника пузырьки начинают двигаться от источника колебания либо к узлу, либо к пучности волны, в зависимости от радиуса.

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.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (№14-01-31369-мол_a).

Литература

1. Akhatov I., Parlitz U., Lauterborn W. Pattern formation in acoustic cavitation // J. Acoust. Soc. Am. – 1994. – V. 96. – P. 3627–3635.
2. Mettin R., Luther S., Ohl C., Lauterborn W., “Acoustic cavitation structures and simulations by a particle model,” Ultrason. Sonochem. – 1999. – V. 6. – P. 25–30.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОБЛЕМЫ РЕМАСШТАБИРОВАНИЯ СКВАЖИННЫХ ДАННЫХ ПРИ ПОСТРОЕНИИ СЕТОЧНОЙ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Габбясова А.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Геологическая модель - это цифровая сеточная модель месторождения углеводородов, которая непротиворечиво содержит исходные данные и представляет из себя геологическую обстановку месторождения на начальной разработки. Построение модели можно разделить на следующие этапы: загрузка и анализ исходных данных, построение структурного каркаса, построение модели литологии и построение модели ФЕС(физико-ёмкостных свойств).

Исходной информацией для построения цифровой геологической модели служат данные РИГИС, стратиграфические графики, 2D или 3D сейсмические исследования, данные инклинометрии скважины. Размеры геологической сетки определяются характером внутреннего строения отложений и разбуренностью месторождения. Размер ячейки по вертикали определяется расчлененностью и неоднородностью разреза и минимальными толщинами прослоев, которое необходимо сохранить в детальной геологической сетки.

Целью работы является установить зависимость и граничные значения для определения оптимального количества слоев для корректного отражения исходных скважинных данных на трехмерной геологической модели.

Задачей данной научной работы является оценка потери скважинных данных, в зависимости от детализации сетки и создание методики подбора сеток для более корректного осреднения данных.

В качестве исходных скважинных данных берутся кривые литологии и стратиграфии. Определяется мощность пласта и скважинные данные осредняются. Производится дифференциальная и интегральная оценка ошибки по каждой скважине.

Таким образом, были получены и проанализированы графики распределения интегральной и дифференциальной погрешностей. В результате анализа выявлено, что дифференциальная ошибка слабо связана с дисперсией ошибок, а интегральная ошибка имеет четко выраженную точку перегиба, которая соответствует оптимальному числу слоев. По определенному числу слоев сформирована геологическая сетка, на которую перенесены скважинные данные, а затем проведен визуальный контроль результатов.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА НЕФТЕШЛАМОВЫЕ РЕЗЕРВУАРЫ

Бухмастова С.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В результате добычи нефти и дальнейшей ее переработки в нашей стране накопилось огромное количество нефтяных шламов (нефтешлама), которые усугубляют экологическую ситуацию. Поэтому переработка и утилизация нефтешлама является актуальной задачей. Из-за высокой вязкости нефтяного шлама его транспортировка усложняется. Вязкость уменьшается при помощи теплового воздействия на шлам. В данной работе рассматривается численное моделирование теплового воздействия высокочастотного (ВЧ) электромагнитного (ЭМ) поля на нефтешламовые резервуары.

Решалось уравнение теплопроводности, записанное в цилиндрической системе координат:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r k_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + q \quad (1)$$

где ρ , c , k_{eff} – плотность, удельная теплоемкость и эффективный коэффициент теплопроводности среды; T – температура; q – плотность распределенных источников тепла в шламе.

В математической модели учитывается конвективный перенос тепла путем введения эффективного коэффициента теплопроводности:

$$k_{eff} = \varepsilon \cdot k \quad (2)$$

где ε – коэффициент конвекции углеводородной жидкости.

В свою очередь ε определяется из выражения [1]:

$$\varepsilon = 0,18 \cdot (\text{Gr} \cdot \text{Pr})^{0,25} \quad (3)$$

где Gr и Pr – число Грасгофа и Прандтля.

Выявлено что за счет механизма конвективного переноса тепла, время разогрева жидкости уменьшается на порядки.

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

Литература

1. Клименко А. В., Зорина В. М. Теоретические основы теплотехники. // Справочник, Москва, 2001, - С. 230.

© Бухмастова С.В., 2015 г.

АНАЛИЗ КРИВЫХ ПАДЕНИЯ ДОБЫЧИ НА ГАЗОВЫХ СКВАЖИНАХ

Ишкин Д.З., Нуриев Р.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В случае низко и сверхнизко проницаемых коллекторов определение параметров пласта классическими методами ГДИ (КВД, КПД) характеризуется большими длительностями исследований. Как следствие исследования добывающих скважин сопровождаются большими потерями в добыче. Наряду с ГДИ в последнее время широкое распространение получает анализ добычи (АД) или, как его называют за рубежом, «Decline analysis». Это исследование предполагает прослеживание в течение длительного времени динамики изменения дебита и забойного давления на скважине. Анализ этих данных позволяет определять параметры пласта и заканчивания скважины.

В работе проведен анализ кривых падения добычи на трех газовых скважинах с регистрацией забойного давления глубинными датчиками:

- 1) скважина с ранее проведенным успешным КВД;
- 2) скважина с длительным КВД без выхода на радиальный режим притока;
- 3) скважина со сложным заканчиванием МГРП, по КВД отсутствует выход на радиальный режим притока.

Во всех примерах удалось качественно описать кривую падения добычи. В первом случае проведено сопоставление результатов с данными по КВД: полученные по анализу добычи параметры хорошо согласуются с параметрами по ГДИ. Во втором и третьем случаях получена качественная оценка параметров пласта.

Исходя из проведенного анализа, сделаны выводы:

- АД позволяет оценить параметры пласта на скважинах, ГДИ на которых неприменимы, в связи с большим временем выхода на радиальный режим притока;

- АД менее чувствителен к шумам, т.к. к интерпретации принимают дебиты и забойные давления одновременно;

- АД относится к малозатратным исследованиям из-за отсутствия потерь в добыче и необходимости в привлечении исследовательских бригад;

Также выделили основные критерии выбора «кандидатов» под исследования методом анализа добычи:

- Анализируемые данные должны начинаться с момента запуска скважины в работу после бурения или длительного ГТМ;

- Согласованность дебитов и давлений;

- Стабильная работа скважин окружения.

УДК 622.276.4

**ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ
КИСЛОТНЫХ СОСТАВОВ НА ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА
ГОРНЫХ ПОРОД В УСЛОВИЯХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ
ЗАПАДНОЙ СИБИРИ**

Аминев Т.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время во всем мире активно ведутся разработки крупных нефтяных объектов, относящихся к карбонатным коллекторам. По мере их разработки накапливаются проблемы, связанные с ухудшением коллекторских свойств породы в призабойной зоне пласта (ПЗП), что приводит к значительному снижению продуктивности скважин и, как следствие, уменьшению объемов добываемой нефти. Одним из основных способов интенсификации скважин для условий карбонатных коллекторов является кислотная обработка ПЗП.

В связи с этим является необходимым проведение комплекса гидродинамических исследований с целью повышения эффективности кислотной обработки ПЗП.

В данной работе приведены результаты экспериментальных лабораторных исследований с использованием реального керна объектов и соответствующих проб пластовых флюидов (нефти и воды), в ходе которых было изучено влияние различных кислотных составов и потокоотклоняющих составов на фильтрационные свойства горных пород.

УДК 538.93

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ТЕПЛА
В ТРЕХСЛОЙНОЙ СРЕДЕ**

Саббахов А.Б.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Область вечной мерзлоты занимает две трети площади нашей страны. Мерзлотные процессы осложняют строительство и эксплуатацию зданий и дорог. Две основные проблемы, с которыми сталкиваются во время строительства в условиях мерзлоты, это:

- просадка вследствие естественного и антропогенного нагрева мерзлых, насыщенных льдом грунтов под фундаментами зданий, насыпями железных и шоссейных дорог, покрытиями аэродромов;

- выпучивание свай, фундаментов, опор мостов, оснований линий электропередач и т. д. вследствие объемного расширения при замерзании в грунте воды, которая превращается в лед.

Целью данной работы является анализ изменения температурного поля в мерзлом грунте, отделенного от окружающей среды слоем теплоизолятора, с течением времени. Математической моделью процесса теплопроводности является уравнение теплопроводности, которое имеет вид:

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

где $a = \lambda / c\rho$ – коэффициент температуропроводности, [м²/с];

λ – коэффициент теплопроводности, [Вт/(м*град)],

c – удельная теплоемкость, [кДж/(кг*град)],

ρ – плотность, [кг/м³].

Граничные условия имеют следующий вид:

$$T_0 = T(0, t), \quad (2)$$

$$T_N = T(H, t) = const. \quad (3)$$

H – глубина, на которую проникают колебания температуры.

В качестве начального распределения температуры в системе возьмем градиент:

$$T(x, 0) = \pm \frac{\partial T}{\partial z}, \quad 0 \leq x \leq H. \quad (4)$$

В качестве объекта для расчетов был взят существующий участок дороги «Чита – Хабаровск». Уравнение (1) было решено неявным методом конечных разностей.

Анализ полученных результатов показал:

- если в системе слоев присутствует слой с достаточными теплоизолирующими характеристиками, процесс теплопереноса замедляется;

- объединение схожих по тепловым свойствам слоев в единый слой дает результирующее распределение температуры, не значительно отличающееся от результата, полученного, когда слои не объединены;

- для корректной оценки теплоизолирующих свойств необходимо в качестве начальных условий использовать градиент температуры;

Литература

4. Волков Е.А. Численные методы. Учеб. пособие для вузов. - 2-е изд., испр. - М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987. - 248 с.
3. Чудновский А.Ф. Теплофизика почв - М.: Наука, 1976. — 353 с.
4. Макарычев С. В., Мазиров М. А. Теплофизика почв: методы и свойства. — Суздаль, 1996, т. 1 — 231 с.

© Саббахов А.Б., 2015 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИТОКА ФЛЮИДА К СКВАЖИНЕ В КОЛЛЕКТОРЕ ТРЕЩИНОВАТОГО ТИПА

Батырова Л. Д.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В данной работе исследуется процесс фильтрации жидкости в коллекторе трещиноватого типа. Фильтрация флюида происходит в сети трещин и описывается уравнением пьезопроводности следующего вида:

$$\frac{\partial P}{\partial t} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \varphi + \rho \frac{\partial \varphi}{\partial P} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\rho \frac{k}{\mu} r \frac{\partial P}{\partial r} \right) \quad (1)$$

Уравнения состояния:

$$\rho = \rho_0 \cdot e^{c_1(P-P_0)}, \quad \varphi = \varphi_0 \cdot e^{c_2(P-P_0)}, \quad k = k_0 \cdot e^{c_3(P-P_0) \cdot m} \quad (2)$$

Краевые условия:

$$P|_{t=0} = P_0, \quad P|_{r=r_w} = P_0, \quad \left(r \frac{\partial P}{\partial r} \right) |_{r=r_w} = \frac{q\mu}{2\pi h k} \quad (3)$$

В результате численного моделирования было установлено:

1. Чем больше коэффициент сжимаемости трещин, тем сильнее изменяется проницаемость пласта и тем сильнее ухудшается фильтрация в околоскважинной области.

2. С увеличением длительности отбора увеличивается область отбора в пласте.

3. С увеличением дебита жидкости существенно увеличиваются эффекты изменения проницаемости и пористости коллектора от изменения порового давления.

Литература

1. А. Давлетбаев, В. Байков, Т. Дое, О. Емченко, А. Зайнуллин, А. Игошин, А. Федоров. Анализ результатов исследований коллектора трещиновато-кавернозно-порового типа. SPE 136248. 2010.
2. Абдуллин Р.И., Давлетбаев А.Я., Бикбулатова Г.Р., Игнатъев А.А., Ямалов И.Р. Исследования нагнетательных скважин в карбонатных месторождениях с коллектором трещиновато-кавернозно-порового типа. SPE 171243. 2014.

© Батырова Л.Д., 2015 г.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ТЕЧЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ УГЛЕВОДОРОДОВ В ТРУБОПРОВОДЕ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ НАГРЕВАТЕЛЕМ

Мирошниченко В.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день наибольшее количество добытой нефти транспортируется по нефтепроводам. Во многих случаях трубопровод пролегает в условиях пониженных температур, что приводит к образованию парафиновых отложений на стенках трубопроводов. Такие отложения со временем уменьшают пропускную способность нефтепровода, а затем и вовсе образуют мощную пробку, которая полностью останавливает движение жидкости в трубе[1]. В связи с этим необходима разработка новых методов предотвращения парафинообразования и ликвидации уже существующих пробок.

Для того что бы избежать накопление парафина необходимо соблюдать определенный температурный режим работы нефтепровода. В связи с чем интерес представляет использование электромагнитного излучения для подогрева нефтепродуктов при их транспортировке.

В настоящей работе приведены результаты численного моделирования неизотермического ламинарного течения высоковязкой углеводородной жидкости в трубопроводе с учетом теплообмена с окружающей средой и при наличии точечного источника электромагнитного излучения. Математическая модель включает в себя уравнение конвективной теплопроводности:

$$\rho c \left[\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right] = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] + q,$$

В рамках простой математической модели численно исследованы особенности неизотермического ламинарного течения высоковязкой углеводородной жидкости при наличии точечного источника электромагнитного излучения. Показана эффективность использования таких источников для подогрева перекачиваемых по трубопроводам нефтей.

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

Литература

1. Тронов В.П. Механизм образования смоло-парафиновых отложений и борьба с ними // М.: Недра. 1970. – 192 с.

ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ СКЛОНОВ КРИОЛИТОЗОНЫ

Хабибуллин И.Л., Нигаметьянова Г.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается термомеханическая модель процесса протаивания многолетнемерзлых пород под теплоизоляционным слоем и промерзании сезонно-талого слоя с учетом наличия снежного покрова.

Разработанная модель определения устойчивости склонов в процессе протаивания многолетнемерзлых пород позволяет оценить коэффициент устойчивости склонов в зависимости от времени и множества параметров: теплофизические и механические свойства слагающих склон грунтов, составляющие радиационного баланса, экспозиция и угол наклона склона и т.д.

Для определения устойчивости оттаивающего склона, рассматривается термомеханическая модель. На поверхности склона имеется талый слой, толщиной l . При оттаивании мерзлого грунта исчезает цементирующее действие льда, существенно снижается устойчивость грунта и становится возможным сползание талого слоя вниз по склону.

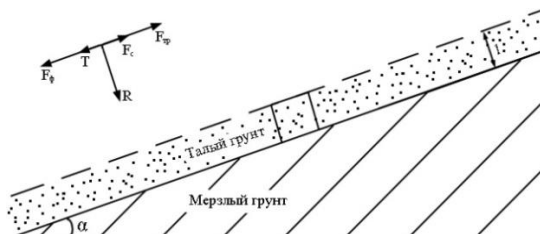


Рис. Схема для определения устойчивости склона

На поверхности склона выделим объем талого грунта, толщиной l , единичной длины и ширины. (Рис.).

Талый слой насыщен водой, в результате действия взвешивающей силы поровой воды, нормальная и касательная составляющие веса грунта уменьшаются:

$$R = (\rho - \rho_B)g \cdot l \cdot \cos \alpha, \quad T = (\rho - \rho_B)g \cdot l \cdot \sin \alpha,$$

где ρ — плотность грунта, ρ_B — плотность воды.

Тогда сила трения, действующая на выделенный объем равна: $F_{TP} = (\rho - \rho_B)g \cdot l \cdot \cos \alpha \cdot \operatorname{tg} \varphi$, где φ - угол внутреннего трения частиц грунта.

В общем случае сопротивление объема грунта сдвигу, в соответствии с законом Кулона-Мора, определяется следующим выражением [1]:

$$\tau = F_{TP} + C = (\rho - \rho_B)g \cdot l \cdot \cos \alpha \cdot \operatorname{tg} \varphi + C, \quad (1)$$

где C — сцепление частиц грунта.

Поскольку грунт водонасыщенный, в талом слое возможна фильтрация воды вниз по склону за счет гравитационного напора: $F_\phi = \rho_B \cdot g \cdot i \cdot l = \rho_B \cdot g \cdot h \cdot \sin \alpha$. Скорость фильтрации воды вдоль талого слоя определяется по закону Дарси $V = K_\phi \cdot \sin \alpha$, где K_ϕ — коэффициент фильтрации грунта.

Таким образом, суммарная сдвигающая сила равна:

$$F_C = T + F_\phi = \rho \cdot g \cdot l \cdot \sin \alpha. \quad (2)$$

Приравнявая (1) и (2) получаем условие равновесия выделенного объема талого грунта:

$$F_C \equiv \rho \cdot g \cdot l \cdot \sin \alpha = (\rho - \rho_B)g \cdot l \cdot \cos \alpha \cdot \operatorname{tg} \varphi + C \equiv \tau,$$

Эти результаты служат для обоснования технических и проектных решений по ликвидации овражных систем.

В частности, на основе расчета температурных полей определяется оптимальная глубина заложения и толщина слоев теплоизолятора в конструктивном слое засыпки объема ликвидируемого оврага.

Расчет коэффициента устойчивости откосов позволяет своевременно определить и реализовать технические решения по стабилизации деструктивных термоэрозионных процессов.

Литература

1. Калинин Э.В. Инженерно-геологические расчеты и моделирование. М.: Изд. МГУ, 2006,-256с.
2. Ананенков А.Г., Ставкин Г.П., Лобастова С.А, Хабибуллин И.Л. Экологические основы землепользования при освоении и разработке газовых и газоконденсатных месторождений Крайнего Севера. М.: Наука, 2000.-316 с.
3. Марахтанов В.П. Термомеханическое оттаивание грунтов (понятие и методика расчета) Криосфера Земли, 2006, том X, №4, с.59-67.

© Нигаметьянова Г.А., 2015 г.

ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА ИЗ СНЕГА В ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ

Белова С.В., Чиглинцева А.С.

Бирский филиал Башкирского государственного университета

г. Бирск, Россия

Интерес к исследованию процесса образования газогидратов в пористых пластах, структура которых представляет собой снег, возникает в результате разработки более экономичных способов хранения, транспортировки, очистки газа и воды [1 - 3]. Известно [3 - 4], что из 1 м^3 гидрата можно получить до 160 м^3 природного газа.

В работе рассматривается процесс образования гидрата в замкнутом объеме, насыщенном снегом и газом при отрицательной температуре. Полагается, что начальное давление и температура удовлетворяют условиям стабильности гидрата.

Для построения математической модели процесса гидратообразования из снега, используются уравнения сохранения масс, притока тепла, а также уравнения состояния для идеального газа и линейный закон Дарси.

Кинетика гидратообразования определяется диффузией газа через гидратный слой, образующийся при его контакте со снегом. Полагается, что пласт снега состоит из сферических частиц, размеры которых составляют порядка 1 мкм .

В ходе проведенного численного эксперимента получена динамика распределения давления, температуры, гидратонасыщенности и снегонасыщенности в замкнутом объеме при различных коэффициентах диффузии, при различных радиусах и при различных начальных снегонасыщенностях. Выявлены три режима гидратообразования. Показано, что при уменьшении коэффициента диффузии или радиуса частицы процесс происходит медленнее, а при снижении начального значения снегонасыщенности быстрее.

Литература

4. Истомин В.А., Якушев В.С. Газовые гидраты в природных условиях. М.: Недра, 1992.
5. Воротынцев В.М., Малышев В.М. Газовые гидраты.
6. Макогон Ю.Ф. Гидраты природных газов. М.: Недра, 1974.
7. Шагапов В.Ш., Чиглинцева А.С., Русинов А.А. О миграции пузырьков в условиях образования гидрата // Прикладная механика и техническая физика. – 2015. – №2. – С. 43-52.

© Белова С.В., 2015 г.

ЗАДАЧА О ЗАКАЧКЕ МЕЧЕНОЙ ЖИДКОСТИ В СКВАЖИНУ С ТЕХНОГЕННОЙ ТРЕЩИНОЙ ГИДРОРАЗРЫВА

Исмагилова И.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

При разработке низкопроницаемых коллекторов активно применяется гидравлический разрыв пласта. С целью исследования взаимовлияния добывающих и нагнетательных скважин с техногенными трещинами, в частности, для выявления источников обводнения добывающих скважин, в ряде случаев проводятся исследования методом закачки меченой жидкости (трассерные исследования). При планировании исследований возникает необходимость расчета объема меченой жидкости, ее концентрации и прогнозирование времени, при котором агент достигнет скважин окружения. Актуальной является задача моделирования процесса закачки меченой жидкости в скважину с техногенной трещиной.

Уравнения, которые описывают перемешивание жидкостей в пористой среде и распределение давления в системе «скважина-трещина-пласт», представлены уравнениями конвективной диффузии и пьезопроводности и имеют вид:

$$\phi_f \beta_{ft} \frac{\partial P_f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_f}{\mu_L} \frac{\partial P_f}{\partial x} \right) + \frac{q}{w_f h} \quad (1)$$

$$\phi_f \frac{\partial C_{Sf}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_f \frac{\partial C_{Sf}}{\partial x} \right) - V_f \frac{\partial C_{Sf}}{\partial x} \quad (2)$$

$$\phi_m \beta_{mt} \frac{\partial P_m}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k_m}{\mu_L} \frac{\partial P_m}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k_m}{\mu_L} \frac{\partial P_m}{\partial y} \right) \quad (3)$$

$$\phi_m \frac{\partial C_{Sm}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{mx} \frac{\partial C_{Sm}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{my} \frac{\partial C_{Sm}}{\partial y} \right) \cdot \left(V_{mx} \frac{\partial C_{Sm}}{\partial x} + V_{my} \frac{\partial C_{Sm}}{\partial y} \right) \quad (4)$$

В данной работе была построена двумерная модель системы «скважина-трещина-пласт», выполнено численное исследование задачи о фильтрации жидкости в пористой среде при закачке меченой жидкости в скважину с техногенной трещиной на неравномерной сетке, изучены влияния геометрии системы «скважина-трещина-пласт» на распределения давления и

диффузионного фронта в продуктивном пласте. Результаты численных исследований показали:

1. С увеличением длительности закачки увеличивается область повышения давления (область возмущения) вдоль трещины. В момент времени $t=1000$ сек для трещин с проницаемостью $k_f=10 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$ и $k_f=100 \cdot 10^{-12} \text{ м}^2$ и полудлиной $x_f=50 \text{ м}$ отмечается повышение давления в низкопроницаемой матрице.
2. При закачке отмечается область проникновения меченой жидкости вглубь трещины. С увеличением длительности закачки увеличивается область диффундирования (перемешивания закачиваемого агента и пластовой жидкости).
3. Чем больше длительность закачки и чем ближе диффузионный фронт к границе контакта трещина-матрица, тем меньше абсолютные значения диффузии. Профиль коэффициента диффузии на границе контакта трещины и матрицы изменяет наклон и принимает меньшие абсолютные значения. Это обуславливается уменьшением конвективной скорости, которая вносит основной вклад в коэффициент диффузии.

Литература

1. Николаевский В.Н. Механика пористых и трещиноватых сред. Недр, 1984
2. Зенкевич О, «Конечные элементы и аппроксимация», Мир, 1986
3. Забродин П.И., Розенберг М.Д., Раковский Н.Л. Вытеснение нефти из пласта растворителем, Недр, 1986.

© Исмагилова И. Р., 2015 г.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И БЕЗРАЗМЕРНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ

Сельтикова Е.В.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Разработка месторождений высоковязкой нефти является достаточно важной проблемой на сегодняшний день, так как геологические запасы легкой нефти уже истощены. Одним из перспективных направлений считается использование тепловых методов, в том числе внутрипластового горения. Метод основан на экзотермических окислительных реакциях углеводородов.

Чтобы инициировать процесс горения в пласте, вблизи забоя нагнетательной скважины подводят теплоту с помощью газовой горелки, электронагревателя или окислительных реакций. После создания очага горения в пласт нагнетается воздух для поддержания процесса внутрипластового горения. В данном случае процесс переноса тепла можно описать уравнением теплопроводности:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - V \frac{\partial T}{\partial x} + J Q_{fuel} - \alpha (T - T_0), \quad (1)$$

где Q_{fuel} – теплотворная способность топлива, J – скорость изменения массы нефти в единице объема среды в процессе окисления нефти, V – скорость конвективного переноса, ρ – плотность, c – удельная теплоемкость, λ – коэффициент теплопроводности, T – температура, T_0 – температура окружающих пород, α – коэффициент теплоотдачи, t – время.

Считалось, что температура в начальный момент времени равнялась пластовой температуре. На границах пласта также поддерживается пластовая температура.

Задача решалась численно на языке программирования MATLAB, методом контрольного объема по неявной схеме [1]. В работе рассмотрены различные возможные варианты развития процесса внутрипластового горения. Также проведен анализ по безразмерным параметрам. Анализ поможет определить критические значения для определения переходных режимов процесса внутрипластового горения, а также анализировать процесс не прибегая к ресурсоемким вычислениям.

Работа проводилась в рамках договора со «Сколковским институтом науки и технологий» о проведении научно-исследовательских работ №700 – MRA.

Литература

1. Патанкар С. // Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Пер. с англ. М.: Энергоатомиздат. 1984. 152 с.

УДК 537.9

ВОЗДЕЙСТВИЕ СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ НА ВОДНО-УГЛЕВОДОРОНЫЕ СИСТЕМЫ В ЦЕНТРОБЕЖНОМ ПОЛЕ

Султангужин Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Одним из важных технологических процессов в нефтедобыче является промысловая подготовка нефти, в которой основную задачу составляет обезвоживание водонефтяной эмульсии.

Результаты исследований воздействия СВЧ электромагнитного поля на различные образцы эмульсий показали, что эффективность их расслоения в СВЧ электромагнитном поле зависит от толщины бронирующей оболочки. При СВЧ электромагнитном воздействии на эмульсию основная энергия поглощается водной фазой, сосредоточенной в глобулах, покрытых бронирующей оболочкой. В результате в глобулах воды возникают объемные источники тепла, за счет чего происходит их интенсивный нагрев, приводящий к разрушению бронирующей оболочки.

Лабораторный стенд для исследования комплексного воздействия СВЧ электромагнитного излучения на водонефтяные эмульсии в центробежном поле сил состоит из следующих основных узлов. Сепарационная камера выполнена в виде цилиндра из композитного материала и установлена на каркасе. Она предназначена для комплексной обработки водонефтяной эмульсии СВЧ электромагнитным излучением в центробежном поле сил. Электродвигатель служит для вращения сепарационной камеры. Вращение электродвигателя передается посредством системы шкивов и зубчатого ремня. Блок магнетрона генерирует электромагнитные волны. Электромагнитная энергия передается в сепарационную камеру через волновод специальной конструкции. Система подачи и отбора состоит из емкостей для водонефтяной эмульсии, нефти и воды, а так же из шестерчатого насоса. После разделения производится контроль температур.

В качестве испытуемого объекта использовалась естественная водонефтяная эмульсия с различным объемным содержанием воды. Для оценки эффективности комплексной обработки водонефтяной эмульсии были проведены серии экспериментов

Проведенные испытания показали, что комплексное воздействие СВЧ электромагнитного поля в центробежном поле сил приводит к эффективному снижению содержания воды в водонефтяной эмульсии.

© Султангужин Р.Ф., 2015 г.

ГЕОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОЛЕОТЛОЖЕНИЯ В СКВАЖИНАХ

Давлетбакова Л.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основным направлением борьбы с отложением солей при добыче нефти должно быть их предупреждение. Основным условием выпадения осадков служит перенасыщение вод в результате термобарических изменений, когда в исходном растворе снижается величина равновесной концентрации.

Анализ изменения ионного состава пластовой воды в 360 пробах из 35 скважин за 10 лет (2000-2009 г.г.) попутной воды показал склонность к выпадению гипса, который при высоких температурах осаждается в модификации бассанита и ангидрита. Для прогнозной оценки солеотложения проведем численные расчеты по методу Дж. Е. Оддо и М. Б. Томсона по индексу насыщения:

$$SI = \lg \frac{[Kt^{2+}] \times [An^{2-}]}{K} \quad (1)$$

где SI - индекс насыщения; $[Kt^{2+}] \times [An^{2-}]$ - произведение молярных концентраций в растворе катиона и аниона, образующих соль; K - константа произведения растворимости, которая в зависимости от термобарических условий и ионной силы раствора определяется:

$$pK = a + bT + cT^2 + dP + eI^{0.5} + fI + hTI^{0.5}, \quad K = 10^{-pK} \quad (2)$$

где T - температура в градусах Фаренгейта, °F; P – давление, Па, I- ионная сила раствора, мг-экв/л, a, b, c, d, e, f, g, h - эмпирические коэффициенты.

Результаты прогнозирования сульфатных солей

Типы сульфатных солей	Индекс насыщения (SI)					
	Положительный		Отрицательный		Циклический	
	Кол-во скважин	Уд-ое соот-ие	Кол-во скважин	Уд-ое соот-ие	Кол-во скважин	Уд-ое соот-ие
Гипс	3	10,4%	21	72,3%	5	17,3%
Бассанит	5	17,3%	13	44,8%	11	37,9%
Ангидрит	10	34,5%	10	34,5%	9	31%

Результаты вычислений показали, что в 18-ти скважинах существует риск выпадения гипса, бассанита и ангидрита из-за положительного индекса насыщения $SI > 0$, поэтому эти скважины должны быть включены в фонд риска по солеотложению, и за ними необходим постоянный контроль.

Литература

1. В.Е. Кашавцев, И.Т. Мищенко Солеобразование при добыче нефти – М.: 2004. – 432 с.

ОСОБЕННОСТИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ НЕЛИНЕЙНОМ ЗАКОНЕ ФИЛЬТРАЦИИ

Дударева О.В.

Бирский филиал Башкирского государственного университета,

г. Бирск, Россия

В последнее время, значительное число работ посвящено изучению нарушений закона Дарси при малых скоростях фильтрации. Такие отклонения могут происходить за счет аномальных свойств жидкостей. Однако, из экспериментальных данных [1-2], проведенных в низкопроницаемых пластах, известно, что отклонения от закона Дарси происходят не только при фильтрации нефти, но также наблюдаются и при однофазной фильтрации воды.

В работе предложена модель нелинейной фильтрации, которая описывает экспериментальные зависимости скорости фильтрации от градиентов давления. Данная модель с предельным градиентом давления учитывает темп выхода нелинейного закона фильтрации к линейному закону Дарси. На основе предложенной модели решены задачи нестационарной фильтрации упругой жидкости при переходных режимах работы скважины. В частности задача, описывающая процесс восстановления забойного давления при переменном дебите скважины и задача о перераспределении дебита при переменном забойном давлении.

В результате проведения численных расчетов показано, что по форме кривых восстановления давления можно судить о фильтрационных свойствах пласта. Отметим, что с увеличением значения предельного градиента давления замедляется процесс восстановления давления.

Выявлено, что при фильтрации жидкости, когда проявляются нелинейные эффекты, наблюдается снижение дебита скважины. Причем с увеличением значения предельного градиента давления дебит скважины понижается.

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. Вып.31. №2. С. 4-7.
2. J.Xu, R.Jiang, L.Xie, M.Yang, G.Wang, J.Liu. Transient Pressure Behavior for Dual Porosity Low Permeability Reservoir Based on Modified Darcy's Equation // SPE 153480. 2012. Pp. 1-10.

УДК 533.15

ДИФФУЗИОННАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ ГАЗА

Шепелькевич О.А., Юмагулова Ю.А.

Бирский филиал ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет»,
г. Бирск, Россия

Гидратообразование из растворов газа в воде, которое осуществимо при определенных значениях давления, температуры и концентрации растворенного газа представляет большой научный и практический интерес, например, для хранения и транспортировки природного газа в газогидратном состоянии, опреснения воды, «гидратной» осушки газа и т.п. [1, 2].

В работе рассмотрена плоская, радиально-симметричная и сферически-симметричная задача об образовании газогидрата на границе контакта с водным раствором газа при термобарических условиях стабильности гидрата. Предполагается, что скорость роста гидратного слоя лимитируется диффузией газа из водного раствора к поверхности контакта. Система основных уравнений состоит из уравнения диффузии и законов сохранения массы для воды и газа [3].

Данная задача в математическом плане подобна задаче Скрайвена [4] для роста парового пузырька в перегретой жидкости. Получено автомодельное решение задачи, позволяющее определить поля концентрации растворенного в воде газа. Получены трансцендентные уравнения для нахождения автомодельной координаты, определяющей рост толщины гидратного слоя.

Показано, что в зависимости от геометрии задачи темпы гидратообразования будут различными (для сферической гидратной частицы интенсивность гидратообразования является наибольшей).

Литература

1. Кузнецов Ф.А., Истомина В.А., Родионова Т.В. Газовые гидраты: исторический экскурс, современное состояние, перспективы исследований // Рос. хим. ж. 2003. Т.47. №3. С. 5.
2. Чувилин Е.М., Перлова Е.В., Махонина Н.А., Якушев В.С. Фазовые переходы воды в газонасыщенных грунтах // Геология и геофизика. 2002. Т.43, №7. С. 689–687.
3. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Ч. 1. 464 с. Ч. 2. 360 с.
4. Scriven L.E. On the dynamics of phase growth // Chem. Eng. Sci. 1959. V.10. №1. P. 1.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ»

УДК 372.853

ПРОВЕДЕНИЕ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ ПО РАЗДЕЛУ “УРАВНЕНИЯ ЛАГРАНЖА 2 РОДА” КУРСА “ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА. ОСНОВЫ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД”

Хайдар Г.М., Екомасов Е.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В современном учебном плане на преподавание раздела “Уравнения Лагранжа 2 рода” отводится 8 часов. Из них лекционных занятий – 4 часа, практических занятий 4 часа. При проведении практических занятий по разделу используется 12 аудиторных задач, и 12 домашних. В конце раздела предусмотрена контрольная работа. Практические занятия включали теоретическую и практическую части. В рамках теоретической части обязательным является введение понятий обобщенных координат, циклических координат, обобщенного импульса, обобщенной энергии; представление общего уравнения механики в форме уравнения относительно независимых координат; законы сохранения обобщенного импульса и энергии; рассмотрение условия совпадения полной и обобщенной энергии; исследование уравнений Лагранжа 2 рода для задач теории колебаний. В рамках практической части студентам должна быть дана методика решения задач на составление уравнения Лагранжа 2 рода в независимых координатах для различных несвободных систем. На примере задачи о колебаниях двойного плоского маятника было последовательно рассмотрено составление функции Лагранжа, составление уравнений его движения и их решения. По результатам проведенной работы удобно иметь методические указания.

Литература

2. Л. Ландау, Е. Лившиц, Л. Розенкевич. Задачи по теоретической физике Государственное научно-техническое издательство Украины. 1935 г. -120с.
3. И.И. Ольховский, Ю.Г. Павленко, Л.С. Кузьменков. Задачи по теоретической механике для физиков. 2-е изд. –Спб.: Лань, 2008. -400 с. И.И. Ольховский. Курс теоретической механики для физиков: Учебное пособие.4-е изд, стер.-СПб:Издательство “Лань”, 2009.-576с.

ПЕРСПЕКТИВЫ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ МОДУЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЫ ОБУЧЕНИЯ И ОЦЕНКИ УСПЕВАЕМОСТИ СТУДЕНТОВ В КУРСАХ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В недавней статье авторы оценили опыт использования модульно-рейтинговой системы обучения (МРС) в преподавании курсов общей физики (1). Были подчеркнуты несомненные преимущества такой системы обучения и оценки знаний. Однако используемая система имеет и ряд явных минусов. Некоторые из этих недостатков неустраняемы и являются как бы «родимыми пятнами» этой системы. Другие, по нашему мнению, могут быть устранены или минимизированы стараниями преподавателей или изменениями в Положении о МРС. Перспективам исправления этих недостатков в преподавании курсов общей физики и посвящен настоящий доклад.

Используя собственный опыт преподавания в рамках МРС, авторы пытаются аргументированно обосновать следующие предложения:

- *Позволить кафедрам, а не функционерам УМУ определять необходимость применения МРС в преподавании курсов, за которые ответственна кафедра (как в МФТИ)*

- *Либо совсем отказаться от применения МРС для зачетов по предметам, где основной формой отчетности является экзамен (для курсов общей физики – зачеты по решению задач и по физпрак-тикуму), либо вернуться к 45-балльной границе для получения зачета*

- *Снизить минимальный балл для допуска к экзамену с 35 до 30 баллов*

- *Увеличить роль экзамена: вместо искусственного требования получения на экзамене 20 баллов из 30 для оценки «отлично» изменить соотношение между вкладами текущего, рубежного и итогового контроля (экзамена). А именно: распределение соотношения между текущим, рубежным и итоговым контролем изменить с 40/30/30 на 25/25/50.*

Литература

1. Абдуллин А.У., Акманова Г.Р. Опыт использования модульно-рейтинговой системы обучения и оценки успеваемости студентов в курсах общей физики «Механика» и «Оптика» // Сборник трудов VII Международной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании» - Уфа: РИЦ БашГУ, 2014, с.13-18.

© Абдуллин А.У., Акманова Г.Р., 2015 г.

**МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ ДИСЦИПЛИН ЕСТЕСТВЕННО-
НАУЧНОГО ЦИКЛА**

Акманова Г.Р., Хизбуллина Р.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Предметная система преподавания дисциплин естественнонаучного цикла в школе в целом обеспечивает возможность формирования у учащихся определенной системы научных знаний и умений. Несогласованность школьных учебных программ по физике, химии, биологии, географии, отсутствие в них взаимосвязанности, преемственности и единой интерпретации понятий, законов и теорий, приводит к отрывочности знаний школьников; отсутствию у учащихся единой научной картины мира и понимания закономерностей его развития, и к неспособности комплексно применять знания и практические навыки, полученные при изучении основ естественных наук в школе. В преодолении этих недостатков большая роль принадлежит межпредметным связям. С точки зрения дидактики, реализация межпредметных связей значительно повышает научный уровень обучения, влияет на содержание учебного материала, на методы преподавания. Кроме того, активное использование межпредметных связей позволяет оптимизировать процесс преподавания предметов естественнонаучного цикла и, тем самым, уменьшить все возрастающую учебную нагрузку на учащихся.

Большое значение имеет проблема реализации межпредметных связей физики и физической географии. Отражение их взаимосвязи и взаимовлияния, общности географических понятий и физических законов в содержании учебного материала в виде межпредметных связей является одним из основных условий познания учащимися причинно-следственных связей в окружающем мире, природы в целом.

Привлечение межпредметных связей в преподавании этих естественнонаучных дисциплин дает возможность более полного раскрытия и объяснения географических явлений и процессов с точки зрения законов физики. С другой стороны, многие географические явления и процессы могут служить иллюстрацией при изучении физических законов. Такой подход позволяет избежать повторения трактовки одних и тех же понятий в отдельных учебных дисциплинах и закладывает основы для формирования у учащихся устойчивых причинно-следственных связей в естественнонаучной картине мира. Использование межпредметных связей физики и физической географии может быть успешным в том случае, если будут иметься четкие представления об основных направлениях реализации межпредметных связей этих учебных дисциплин, а также система методов их реализации.

ХИМИЯ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

УДК 547.26`11

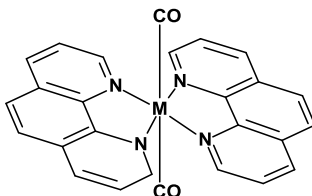
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БИС-ФЕНАТРОЛИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛА ГРУППЫ ХРОМА И ИХ ОКСОДИЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Васильев Е.В.

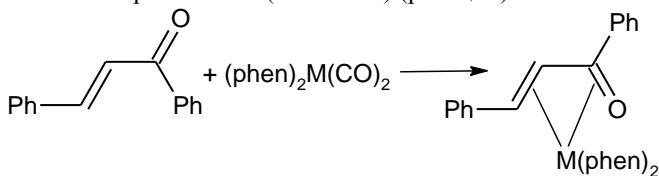
Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

Конечной целью данной работы является разработка новых способов получения функционализированных винилфосфонатов с использованием комплексов металлов группы хрома. Ранее было продемонстрировано, что при использовании их карбонильных производных получаемые комплексы неустойчивы и склонны к диспропорционированию [1,2]

В качестве стабилизирующего лиганда-свидетеля в координационную сферу металла нами был введен орто-фенантролин.



Данная работа посвящена квантовохимическому исследованию бис-фенантролинкарбонильных комплексов хрома и молибдена и их реакции с 1,3-дифенил-1-оксопропеноном (халконом) (реакции).



Литература

1. Курамшина, Е.А. Синтез, строение и фосфорилирование π -комплексов гетеродиенов с железом и металлами подгруппы хрома / Е.А. Курамшина // Дис-серт. канд. хим. наук, Казань, 2003.
2. Павлова, И.В. Синтез, строение и реакции гидрофосфорилирования циклических кетонов, енонов, диенонов и их тиоаналогов в координационной сфере железа и металлов подгруппы хрома / И. В. Павлова // Диссерт. канд. хим. наук, Казань, 2005.

© Васильев Е.В., 2015 г.

РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В ПРИСУТСТВИИ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Василюк К.С.¹, Диниахметова Д.Р.², Фризен А.К.²

¹Башкирский государственный университет, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии Российской академии наук, Уфа, Россия

В данной работе произведена оценка констант элементарных стадий радикальной полимеризации метилметакрилата в присутствии фуллера C₆₀ на основании ранее проведённых квантово-химических расчётов. Константы скорости реакции были рассчитаны по формуле Аррениуса, где предэкспонент равен 10¹⁰ для бимолекулярных реакций, T= 333 К (таблица).

№	Реакция	H _{акт} , кДж/моль	ΔH, кДж/моль	k, л×моль ⁻¹ ×с ⁻¹
1	M+(PhCOO) [•] →PhC(O)OM [•]	0.2	-94.2	9.3×10 ⁹ (R ₁)
2	C ₆₀ +(PhCOO) [•] →PhC(O)OC ₆₀ [•]	13.9	-74,7	2.5×10 ⁹ (R ₂)
3	C ₆₀ +R [•] →C ₆₀ R [•]	18.3	-29.0	1.4×10 ⁷ (R ₃)
4	C ₆₀ R [•] +M→RC ₆₀ M [•]	19.4	48.0	3.0×10 ² (R ₄)
5	C ₆₀ R [•] +R [•] →C ₆₀ R ₂ [•]	0	-87.6	10 ⁶ (R ₅)
6	C ₆₀ R ₂ [•] +R [•] →C ₆₀ R ₃ [•]	24.6	-21.2	1.4×10 ⁶ (R ₆)

Реакция присоединения R[•] к фуллерену C₆₀ имеет скорость 3,15×10⁻⁵ л×моль⁻¹×с⁻¹ при [C₆₀]=2,25×10⁻³ моль/л [1] и [R[•]]=10⁻⁹ моль/л [2], что хорошо согласуется с литературными данными (k = 1.1×10⁷ л×моль⁻¹×с⁻¹). Так как R₂>R₃, следовательно, быстрее происходит гибель Г. В случае реакции Г с М скорость реакции равна 2,6×10⁷, а в случае реакции радикалов R[•] с фуллереном C₆₀ 3,2×10⁻⁵. Поскольку R₁ на 2 порядка больше, чем R₃, можно предполагать, что быстрее и вероятнее будет происходить зарождение цепи. Участие фуллеренильных радикалов в реакции продолжения цепи маловероятно, так как R₄ на 4 порядка меньше R₅. Однако, учитывая концентрацию мономера равную 10 моль/л, можно предположить, что в реальных системах реакция 4 должна протекать быстрее. Таким образом, при полимеризации, инициируемой ПБ, преимущества у C₆₀ по сравнению с мономером за Г нет. Можно допустить, что C₆₀ не расходуется в реакции инициирования, а в большей степени участвует в реакциях с радикалами роста.

1. Медведева Н.А. Особенности формирования фуллерен(C₆₀)содержащих макромолекул в радикальной (со)полимеризации: Дис. ... канд. хим. наук. Баш. гос. университет, Уфа, 2013.

2. Фризен А.К. Активные центры комплексно-радикальной полимеризации виниловых мономеров в присутствии ферроцена: Дис. ... канд. хим. наук. – Уфа, 2007. -140с.

© Василюк К.С., Диниахметова Д.Р., Фризен А.К., 2015 г

ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ СТИРОЛА В ПРИСУТСТВИИ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀

Диниахметова Д.Р., Фризен А.К.

Уфимский институт химии РАН, г. Уфа, Россия

При квантово-химическом моделировании элементарных актов полимеризации стирола в присутствии фуллера C₆₀ кроме рассмотрения термодинамических характеристик необходимо рассчитать константы, оценить скорости, учитывая концентрации компонентов смеси. Константы реакций оценены по уравнению Аррениуса, в котором предэкспонент равен 10¹⁰, а температура 333К (таблица).

Таблица. Оцененные константы и энергетические характеристики (в кДж/моль) элементарных актов полимеризации стирола в присутствии C₆₀, инициированной пероксидом бензоила, ДАК.

	Реакция	k	H _{акт}	ΔH
1	$M + (\text{PhCOO})^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet}$	10 ⁹	1.9	-88.1
2	$M + (\text{CH}_3)_2\text{C}^{\bullet}(\text{CN}) \rightarrow R^{\bullet}$	10 ⁷	18.8	-61.4
3	$\text{C}_{60} + \text{PhC}^{\bullet}\text{OO} \rightarrow \text{PhC}(\text{O})\text{OC}_{60}^{\bullet}$	10 ⁹	13.9	-74.7
4	$\text{C}_{60} + (\text{CH}_3)_2\text{C}^{\bullet}(\text{CN}) \rightarrow (\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CN})\text{C}_{60}^{\bullet}$	10 ⁶	23.6	-32.2
5	$M + R^{\bullet} \rightarrow R^{\prime\prime}$	10 ⁷	18.6	-63.8
6	$\text{C}_{60} + R^{\bullet} \rightarrow \text{C}_{60}R$	10 ⁸	9.5	-46.4
7	$\text{C}_{60}R + R^{\bullet} \rightarrow \text{C}_{60}R_2$	10 ⁶	-	-136.3
8	$\text{C}_{60}R_2 + R^{\bullet} \rightarrow \text{C}_{60}R_3$	10 ⁸	8.0	-57.5
9	$\text{PhC}(\text{O})\text{OC}_{60}^{\bullet} + M \rightarrow \text{PhC}(\text{O})\text{OC}_{60}M^{\bullet}$	10 ⁵	26.7	1.4
10	$(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CN})\text{C}_{60}^{\bullet} + M \rightarrow (\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CN})\text{C}_{60}M^{\bullet}$	10 ⁴	37.1	8.0
11	$\text{C}_{60}R + M \rightarrow \text{RC}_{60}M^{\bullet}$	10 ⁴	38.0	8.2

В условиях полимеризации обычно [C₆₀]=10⁻³, [M]=10, [I]=10⁻², [R[•]]=10⁻⁹ моль/л. Так как константы взаимодействия PhC[•](O)O с C₆₀ и стиролом равны, а концентрация стирола выше на 4 порядка, то быстрее должна протекать реакция инициирования цепи, чем гибель радикалов на фуллере. Константа присоединения (CH₃)₂C[•](CN) к C₆₀ меньше на порядок, чем константа инициирования цепи, значит, в этом случае будет преимущественно протекать инициирование цепи. Оцененные скорости реакции роста цепи и гибели радикалов роста на C₆₀ равны 10⁻¹ и 10⁻⁴. Если допустить, что весь фуллерен прореагировал с образовавшимися радикалами, то суммарная скорость взаимодействия фуллеренильного радикала с мономером составит 10⁻². Таким образом, в условиях реальной полимеризации наиболее вероятны реакции инициирования, роста цепи. Гибель радикалов на C₆₀ происходит медленнее, а образовавшиеся фуллеренильные радикалы активно взаимодействуют с молекулами стирола, образуя новые радикалы роста. © Диниахметова Д.Р., Фризен А.К., 2015 г.

СТРУКТУРА УРАЦИЛА И ЕГО 5,6-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПРИ ДЕПРОТОНИРОВАНИИ

Ильина М.Г., Хамитов Э.М.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Квантово-химические расчеты урацила и его 11 замещенных производных [1] были выполнены в приближении обменного TPSS τ -зависимого градиентно-скорректированного функционала в сочетании с базисным набором тройного валентного расщепления с добавлением диффузных и поляризационных функций 6-311+G(d,p). Все расчеты выполнены для стандартных условий (298.15 К, 1 атм.). Особенности распределения электронной плотности в анионах урацилов лучше иллюстрируются набором резонансных форм:

Как следует из приведенной схемы, вследствие сопряжения анионного центра с соседними кратными связями порядки связей в анионах приобретают значения, промежуточные между 1 и 2, поэтому длины формально двойных связей (C=C в анионе N1, C=O – в обоих анионах) увеличиваются, а формально одинарные C-N связи закономерно укорачиваются, что также показано на рисунке 1.



Рис. 1. Структурные изменения молекулы урацила и ее анионов

Работа выполнена при поддержке проекта №4.299.2014/К, исполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности.

Литература

1. А.Р. Гимадиева, Ю.Н. Чернышенко, И.Б. Абдрахманов, А.Г. Мустафин, Синтез, модификации и биологическая активность урацилов, 2013, Уфа, Гилем, 176 с.

© Ильина М.Г., Хамитов Э.М., 2015 г

**ДЕФОРМАЦИЯ 1-ГЕТЕРО-1,3-ДИЕНОВ МЕТАЛЛОЦЕНТРОМ КАК
МЕРА ИЗМЕНЕНИЯ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ
КООРДИНИРОВАННЫХ ГЕТЕРОДИЕНОВ**

Мирзаянов И.И.

Казанский (Приволжский) Федеральный университет г. Казань, Россия

Проведенные ранее исследования [1] позволили сделать предположение, что роль металлоцентра во внутрисферном региоселективном гидрофосфорилировании гетеродиенов более сложна, чем просто роль защитной группы.

Для изучения причин изменения реакционной способности 1-гетеро-1,3-диенов, вызванных координацией с переходным металлом, мы провели квантово-химические расчеты свойств металлоорганических производных α -енонов с помощью DFT (BHandHLYP/LANL2DZ).

Результаты расчетов показали важность искажения геометрии оксодиена, координированного с металлоцентром. Наблюдалось удлинение связей C=C и C=O, а также искажение валентных и торсионных углов.

Мы предположили, что изменение в геометрии оксо-, аза- и тиосодиенов приводит к утрате молекулой плоскостного строения и, как следствие, к утрате сопряжения между связями C=C и C=X, которое влияет на результат внутрисферной функционализации лиганда.

Для проверки предположений мы оценили значения «энергии деформации лиганда» в соответствии с уравнением:

$$E_{stress} = \Delta H_{SP} - \Delta H_{GO}, \text{ где } E_{stress} - \text{энергия деформации лиганда; } \Delta H_{SP} -$$

энергия лиганда в том геометрическом состоянии, которое он принимает в металлоорганическом соединении. ΔH_{GO} – энергия свободного гетеродиена в наиболее энергетически выгодной конформации.

Наше предположение было подтверждено ПМР – исследованиями металлоорганических производных подгруппы хрома. Величина хим. сдвига 1H некоординированного олефинового фрагмента C=C соответствует атому водорода при изолированной кратной связи

Литература

[1] Курамшин А.И., Курамшина Е.А., Черкасов Р.А. Журн. орг. хим. 2004. Т.40. Вып.9. С.1315-1323

© Мирзаянов И.И., 2015 г

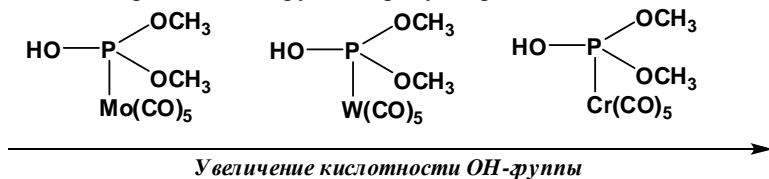
**КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КИСЛОТНОСТИ
ГИДРОКСИТАУТОМЕРНОЙ ФОРМЫ ДИМЕТИЛФОСФИТА,
КООРДИНИРОВАННОГО С МЕТАЛЛКАРБОНИЛЬНЫМ ОСТОВОМ
ЭЛЕМЕНТОВ 6 ГРУППЫ**

Плотникова А.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

В настоящее время использование металлокомплекса для стабилизации гидрокси-формы гидрофосфорильного соединения и участия последней в электрофильном варианте реакции Пудовика для кросс-сочетания связей P–C [1] недооценивалось.

Мы обнаружили, что при взаимодействии диметилфосфита с гексакарбонилметаллами 6 группы в C_6D_6 оцененная с помощью ЯМР кислотность гидроксильной группы продукта реакции зависит от металла.



Для проверки интерпретации наших экспериментальных наблюдений мы решили определить статическую кислотность (относительные заряды на атомах водорода) и константы кислотной диссоциации полученных нами соединений. Для этого мы использовали квантовохимическое моделирование с помощью модели функционала плотности (B3LYP/LANL2DZ). В соответствии с результатами расчета $\sigma^4\text{-}\lambda^4$ - (диметилфосфит)пентакарбонилметаллы отличаются значительной статической кислотностью [заряд на атоме водорода составляет +0.15 (Cr), +0.07 (Mo) и +0.12 (W)]. Константы диссоциации изученных соединений, определенные через свободную энергию их диссоциации, составляют $1.1 \cdot 10$ (Cr), $3 \cdot 10^{-1}$ (Mo) и $7 \cdot 10^{-1}$ (W), что позволяет говорить о весьма кислом характере гидрокситаутомерной формы диметилфосфита. Полученные результаты могут оказаться полезными для дизайна реакций фосфорилирования, протекающих по электрофильному механизму.

Литература

1. Tanaka, M. Recent Progress in Transition Metal-Catalyzed Addition Reactions of H–P(O) Compounds with Unsaturated Carbon Linkages / M. Tanaka // Top Organomet. Chem. – 2013. – N. 43. – P. 167-201.

УДК 544.18: 544.142.6: 544.144.7: 544.144.22

© Плотникова А.В., 2015

**НЕКОВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
В СЕТОЧНЫХ И ЛЕНТОЧНЫХ СТРУКТУРАХ
ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА И ЕГО АНАЛОГОВ**

Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

5-фторурацил (5-FU), 5-нитро-6-метилурацил (5-NO₂-6-MeU), изоциануровая кислоты (CA), 5-гидрокси-6-метилурацил (5-OH-6-MeU) и урацил (U). в кристаллической фазе представляют собой сеточные структуры, а дитиоурацил (DTU) ленточную структуру, данные структуры реализуются за счет нековалентных взаимодействий[1]. Исследование природы межмолекулярных взаимодействий в димерах производных урацила и его аналогов необходимы для понимания процессов их самосборки и кристаллизации

В настоящей работе было проведено RDG [2] исследование димеров U, 5-FU, 5-NO₂-6-MeU, CA, 5-OH-6-MeU, DTU [3].

Квантово-химические расчеты проводили с использованием программного пакета Gaussian09 в приближении TPSSh/TZVP. Для генерирования читаемого файла волновой функции (*.fchk файл), использовали утилиту *formchk*. RDG анализ волновой функции проводили с помощью программы Multiwfn. Для визуализации градиентной изоповерхности использовали программу VMD.

Работа выполнена при поддержке проекта №4.299.2014/К, исполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности и гранта РФФИ 14-04-97035

Литература

- [1] А.Э. Масунов, С.И. Грищенко, П.М. Зоркий, Журнал физической химии, 63 (1993) 221-239.
[2] E.R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sánchez, J. Contreras-García, A.J. Cohen, W. Yang, Journal of the American Chemical Society, 132 (2010) 6498-6506.
[3] А.Р. Гимадиева, В.А. Мышкин, А.Г. Мустафин, Ю.Н. Чернышенко, Н.С. Борисова, Ю.С. Зимин, И.Б. Абдрахманов, Химико-фармацевтический журнал, 48 (2014) 25-28.

© Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М., 2015

АЛКОКСИДЫ ИЗОНИТРОЗИЛА КАК СОЕДИНЕНИЯ С УНИКАЛЬНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ХИМИЧЕСКОЙ ВЯЗИ

Шишкина А.Н.

Башкирский Государственный Университет (г. Уфа)

Проведено квантово-химическое исследование алкоксидов изонитрозила. Простейший аналог – гидроксид изонитрозила – отличается аномально длинной (1.9 Å) и при этом достаточно прочной пероксидной связью.

В связи со значительной ресурсоемкостью высокоуровневых *ab initio* приближений интенсивное исследование строения, стабильности и топологии функции распределения электронной плотности $[\rho(\mathbf{r})]$ соединений класса $R_1-O-O-N \rightarrow R_2$ проводили с использованием методов теории функционала плотности (B3LYP, B97D, M06L) и базисного набора Даннинга (aug-ccPVTZ), которые в раннее проведенных исследованиях дали наиболее точные результаты.

В целях выявления факторов, оказывающих влияние на стабилизацию структуры алкоксидов изонитрозила был проведен отбор функциональных групп, которые оказывают значительное влияние на распределение электронной плотности. Результаты расчетов приведены в табл.

Структура	$r, \text{Å}$	ϵ_{BCP}		$\rho(\mathbf{r})_{\text{BCP}}$		$\nabla^2\rho(\mathbf{r})_{\text{BCP}}$			$D_{\text{O-O}}$ (гомо/ гетеро), кДж/мол
	O ₁ -O ₂	O ₁ -O ₂	O ₂ -N	O ₁ -O ₂	O ₁ -O ₂	O ₁	O ₂	N	
C ₆ H ₅ OON- <i>trans</i>	2.123	0.13	0.10	0.051	0.199	-0.98	-0.32	0.56	-9.4/ 701.6
CH ₃ OON- <i>trans</i>	1.944	0.16	0.11	0.082	0.263	-0.80	-0.31	0.55	26.5/ 791.8
C ₂ H ₅ OON- <i>trans</i>	1,948	0,16	0,11	0,082	0,263	-0,80	-0,31	-0,55	26,5/ 791,8

Было установлено, что ведущим фактором в стабилизации алкоксидов изонитрозила является сильная поляризация пероксидной связи. Одним из немногих путей модификации гидроксида изонитрозила является замена атома водорода на более электроотрицательный фрагмент. Показано, что присоединение кислот Льюиса по неподеленной электронной паре азота не приводит к существенной стабилизации структуры, напротив, значительно снижается энергетический порог диссоциации пероксидной связи по гетеролитическому пути.

© Шишкина А.Н., 2015

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 574.4:1.1

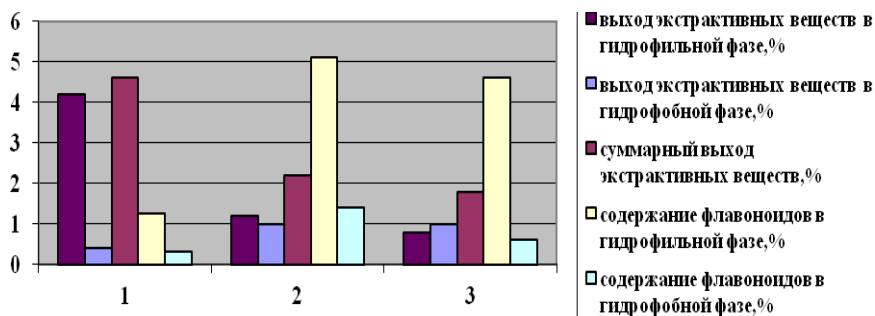
ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ПЛОДОВЫХ ОБОЛОЧЕК ГРЕЧИХИ

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Абдуллин М.И.

Башкирский Государственный Университет, г.Уфа, Россия

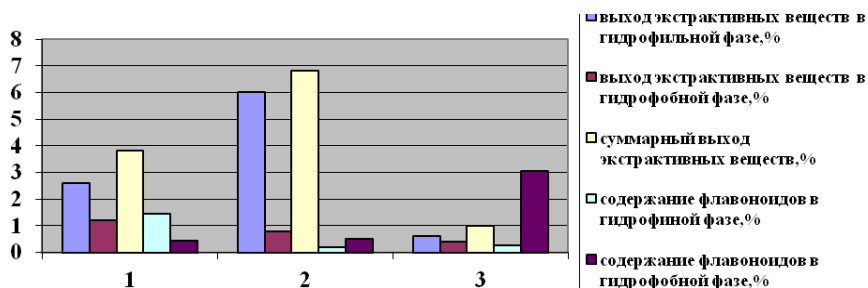
В последнее время получила развитие технология экстрагирования лекарственного растительного сырья смесью гидрофильных и гидрофобных растворителей с одновременным эффективным извлечением гидрофильных и липофильных веществ [1]. Ранее нами был предложен способ экстракции флавоноидов из плодовых оболочек 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.

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СОРБЦИИ
ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ МОДИФИЦИРОВАННЫМ
УРАЦИЛОМ МИКРОПОРИСТЫМ ПОЛИМЕРНЫМ СОРБЕНТОМ**

Билалова Р.В., Ганиева А.Г., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Одной из фундаментальных проблем современной химии является направленное конструирование систем, создание из молекулярных «строительных блоков» высокоупорядоченных супрамолекулярных соединений с заданной структурой и свойствами. Ранее был предложен сорбент на основе супрамолекулярных сетчатых структур урацила. Было установлено, что размерные эффекты проявляются только при нанесении большого количества (10%) урацила на поверхность пористых тел. Поэтому представляет интерес изучить физико-химические закономерности адсорбции органических молекул на модифицированных различным количеством урацила микропористых полимерных сорбентах с целью выяснить, при какой концентрации урацила начинается образование супрамолекулярной структуры. В качестве исходного исследуемого сорбента был выбран пористый полимер Dowex L-285 на основе стирола и дивинилбензола. Для модифицирования поверхности сорбента использовался урацил. Исследование проводилось методом обращённой газовой хроматографии на хроматографе «Chrom-5» с пламенно-ионизационным детектором. В качестве сорбатов были выбраны органические вещества – пентан, гексан. Термодинамические функции адсорбции для пары пентан-гексан, для которой должны проявляться размерные эффекты для урацила приведены в таблице. Как видно из полученных данных, размерные эффекты наблюдаются только в случае самой большой концентрации урацила. Это говорит о том, что супрамолекулярная структура окончательно формируются только при нанесении 5% урацила на поверхность полимера.

Таблица 1. Изменение внутренней энергии и энтропии пары пентан(П)-гексан(Г) на сорбентах с увеличением концентрации урацила.

	-dU, кДж/моль						-dS, кДж/моль *К					
	10 ⁶	10 ⁵	10 ⁴	10 ³	10 ²	5*10 ⁻²	10 ⁶	10 ⁵	10 ⁴	10 ³	10 ²	5*10 ⁻²
П	41	53	63	44	51	44	57	84	110	68	80	67
Г	47	61	78	51	57	47	65	93	133	74	86	65

© Билалова Р.В., Ганиева А.Г., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х., 2015

УДК: 544.165

**КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК ЭФФЕКТИВНЫХ
АНТОГОНИСТОВ АЦЕТИЛХОЛИНОВОГО РЕЦЕПТОРА
СРЕДИ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТАНПИРИДО[1,2-
А][1,5]ДИАЗОЦИНА [(-)-ЦИТИЗИНА]**

Васильев М.Н.¹, Хайруллина В.Р.¹, Герчиков А.Я.¹, Зигангиров А.С.¹,
Цыпышева И.П.², Зарудий Ф.С.³

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Уфимский институт химии РАН, г. Уфа, Россия

Башкирский государственный медицинский университет г. Уфа, Россия

Целью настоящей работы был виртуальный скрининг некоторых производных (-)-цитизина, (рис.1), и изучение их стерической комплементарности с активным центром никотинового ацетилхолинового рецептора человека методом молекулярного докинга. Актуальность детального изучения этих производных обусловлена тем, что все они обладают нейрофармакологической активностью, установленной в *in vivo* и *in vitro* тестах [1-2].

Рис. 1 – Структуры соединений 1-21

Исследования проводились с использованием молекулярного докинга. В качестве модели фермента была выбрана макромолекула с кодом 1UW6 (<http://www.rcsb.org>). При моделировании использовали цепи А и В т.к. активный центр белка-мишени находится на стыке этих двух цепей. Молекулярный докинг структур лигандов в активный центр никотинового ацетилхолинового рецептора [10] проводили с помощью программы Autodock 4.2

На основании данных, полученных путем молекулярного докинга, можно заключить, что структуры **14, 15, 9, 4, 2, 12** могут являться потенциальными ингибиторами никотинового ацетилхолинового рецептора, и перспективны для дальнейших исследований в качестве соединений-лидеров с выраженным ноотропным действием. Их стабилизация положения в активном центре происходит за счет π - π и Т-стэкинговых взаимодействий с TRP 143, водородным связям с остатками ALA 88, GLN 119 и LEU 98. Кроме того, молекула воды W2090 образует с этими лигандами координационную связь и тем самым стабилизирует их положение в активном центре.

Результаты настоящих теоритических исследований подтверждены биологическими испытаниями производных (-)-цитизина на лабораторных мышах и крысах.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта №4.299.2014/К, выполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности (проект 299, 2014 г.) и РФФИ (грант 14-04-97035).

Литература:

1. I.P. Tsypysheva, A.V. Koval'skaya, N.S. Makara, al., *Chemistry of Natural Compounds.*, 48 (4) 629 – 634 (2012).
2. I.P. Tsypysheva, A.V. Koval'skaya, A.N. Lobov, al., *Chemistry of Natural Compounds.*, 49 (4) 707 – 711 (2013).

© Васильев М.Н., Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С.,
Цыпышева И.П., Зарудий Ф.С., 2015

УДК: 544.165

ОЦЕНКА СТЕРИЧЕСКОЙ КОМПЛЕМЕНТАРНОСТИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (-) ЦИТИЗИНА С АКТИВНЫМИ ЦЕНТРАМИ 5-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ И ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ

Васильев М.Н.¹, Хайруллина В.Р.¹, Герчиков А.Я.¹, Зигангиров А.С.¹,
Зарудий Ф.С.²

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа, Россия

5-липоксигеназа (5-ЛОГ) – ключевой фермент биосинтеза лейкотриенов, чрезмерная выработка которых провоцирует такие заболевания, как астма, артриты, псориаз и ишемическая болезнь сердца [1-2]. В живых системах ее активации способствует гиперпродукция арахидоновой и линоленовой кислот на фоне сниженной активности изоформ циклооксигеназ (ЦОГ-1 и ЦОГ-2) при использовании нестероидных противовоспалительных лекарственных средств (НПВЛС)[2-3]. Повышенное потребление арахидоновой кислоты в мозге животных и человека приводит к различным нейродегенеративным заболеваниям [4]. Известно, что арахидоновая кислота является субстратом для изомерных форм циклооксигеназ (ЦОГ-1, ЦОГ-2) и 5-ЛОГ. Продуктами этих взаимодействий являются простагландины и лейкотриены [1-3]. Таким образом поиск ноотропных веществ, способных ингибировать биосинтез метаболитов арахидоновой кислоты, позволит разрабатывать лекарственные препараты комплексного действия.

Целью настоящей работы было исследование соединений (-)-цитизина 2-21 (рис.1), ранее изученных как потенциальные ноотропы [5], в качестве ингибиторов 5-липоксигеназы и изоформ циклооксигеназ.

Молекулярный докинг структур потенциальных ингибиторов проводили в 5-ЛОГ и изоформы ЦОГ с помощью программы Autodock 4.2 по методике, описанной в работе [2]. Шифры моделируемых ферментов представлены в табл. 1. В докинге молекулы белков были жесткими, в то время как молекулы лигандов были подвижными.

Анализ результатов докинга 21 производного (-)-цитизина в активные центры изоформ ЦОГ и 5-ЛОГ показал, что исследуемые структуры, за исключением соединений с кодами 18 и 20, имеют высокие величины оценочной функции, указывающей, что они могут быть эффективными ингибиторами 5-ЛОГ и изоформ ЦОГ конкурентного типа. Среди изученных соединений наиболее перспективными потенциальными ингибиторами биосинтеза простагландинов и лейкотриенов являются соединения под номерами 6, 15 и 17.

Рис. 1 – Структуры соединений 1-21.

Таблица 1. Моделируемые ферменты и соответствующие им коды

Фермент	Код модельной молекулы фермента на сайте http://www.rcsb.org
5-ЛОГ	цепь А макромолекулы 3o8y
ЦОГ-1	цепь В макромолекулы 3n8x
ЦОГ-2	цепь А макромолекулы 1rxx

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта №4.299.2014/К, выполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности (проект 299, 2014 г.) и РФФИ (грант 14-04-97035).

© Васильев М.Н., Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С.,
Зарудий Ф.С., 2015

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ПОЛИМЕРОВ КЛАССА ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ

Габидуллина Г.Г., Гайнетинов В.Р.

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

Органические электроактивные полимеры нашли многочисленные применения в устройствах органической электроники. К настоящему времени разработан широкий круг таких полимеров с различными уникальными свойствами. Один из полимеров с необычными свойствами – полиариленфталид и его производные. Полиариленфталиды: кардовые, линейные, ароматические полимеры, полученные по реакции электрофильного замещения при использовании псевдохлорангидридов орто-кетокарбоновых кислот [1].

Для определения влияния факторов на синтез полиариленфталидов необходимо исследование механизма реакций, протекающих при получении данных полимеров, что сопряжено со значительными трудностями даже при использовании современных экспериментальных физико-химических методов исследования вследствие крайне малого времени жизни образующихся интермедиатов и переходных состояний.

В связи с этим весьма актуально квантово-химическое исследование химической и электронной структуры молекулярных наносистем.

Целью данной работы явилось квантово-химическое исследование структуры и электронных свойств полимеров класса полиариленфталидов.

Для проведения квантово-химических расчетов был выбран метод Хартри-Фока с валентно-расщепленным базисом 3-21G*.

Энергии	3-хлор-3-фенилфталидилен	3-хлор-3-(4'-дибензофуран)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-дибензоксафен)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-лифенил)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-дифенилосенд)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-дифенилсульфид)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-карбонил)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-фуорил)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-N-метилкарбонил)-фталидилен	3-хлор-3-(4'-N-цианил)-фталидилен
Энергия, Хартри	-1138,72	-1440,28	-1761,51	-1366,99	-1441,43	-1762,66	-1420,57	-1404,66	-1459,39	-1595,26
Энергия, 10 ³ кДж/моль	-29,89	-37,81	-46,25	-35,89	-37,84	-46,28	-37,29	-36,88	-38,32	-41,88

Рис. 1. Энергетические характеристики, полученные из результатов квантово-химических расчетов

В дальнейшем были исследованы димер-димерные комплексы.

Энергия, Хартри	Энергия, 10 ⁵ кДж/моль	Энтальпия, кДж
-3638,97	-95,54	-24,04
-4845,19	-127,21	-24,05
-6130,13	-160,94	-24,04
-4552,05	-119,51	-24,05
-4809,79	-127,33	-24,05
-6134,69	-161,06	-24,04
-4766,37	-125,14	-24,04
-4702,71	-123,47	-24,05
-4921,61	-129,21	-24,05
-5465,12	-143,48	-24,04

Рис.2. Результаты квантово-химических расчетов для димер-димерных комплексов

Было проведено квантово-химическое моделирование структуры и электронных свойств электроактивных полимеров. По результатам расчета энтальпии реакций модельных систем можно сказать, что все реакции являются экзотермическими, то есть образование подобных систем является термодинамически выгодным. Таким образом, фталиды являются энергетически устойчивыми структурами и способны участвовать в процессе поликонденсации. Анализ результатов расчета энтальпии реакций модельных систем показывает, что все реакции являются экзотермическими, то есть образование подобных систем является термодинамически выгодным. Исходя из вышесказанного, можно сделать вывод о том, что фталиды являются энергетически устойчивыми структурами и способны участвовать в процессе поликонденсации.

Литература

1. Султанбаева Г. Ш., Калимуллина Л. Р., Жданов Э. Р., Самигуллина З. С. Электронная структура мономеров, димеров и димерных комплексов полиариленфталидов // Нанотехнологии: наука и производство. – 2010. – №1(6) – С. 85-90.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ ФОРМАЛЬДЕГИДА В РАСТВОРЕ АЦЕТОНИТРИЛА

Гайнетдинов В.Р. Янов Д.Ф. Габидуллина Г.Г.

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

Трудно представить прогресс, в какой бы то ни было области хозяйства без химии – в частности, без органической химии. Все сферы хозяйства связаны с современной химической наукой и технологией. Органическая химия изучает вещества, содержащие в своем составе углерод, за исключением окиси углерода, углекислого газа и солей угольной кислоты (эти соединения по свойствам ближе к неорганическим соединениям). Большинство органических реакций протекает в жидкой фазе. Очень часто растворитель изменяет не только выходы конечных продуктов, но и механизм реакции. В газовой фазе многие реакции идут по радикальному механизму, а в растворе - по ионному. Поэтому при квантово-химическом изучении реакционной способности органических соединений необходимо учитывать взаимодействие со средой. Растворители существенно влияют в органической химии на энергетическую характеристику молекул и это влияние необходимо учитывать [1,2].

Целью данной работы является расчет частот колебаний молекулы формальдегида в растворе ацетонитрила, а так же оптимизация молекулы формальдегида, расчет частот ИК-спектра без учета растворителя и расчет частот ИК-спектра с учетом растворителя (ацетонитрил). В работе была рассмотрена следующая модель соединения, молекулы формальдегида в растворе ацетонитрила:

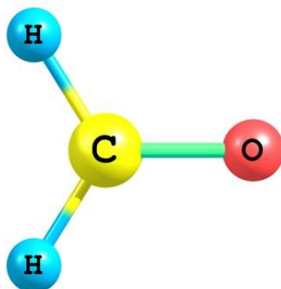


Рис.1. Пространственная структура молекулы формальдегида (CH₂O)

Основной метод исследования - ограниченный метод Хартри-Фока-RHF/6-31+G(d). Полная энергия молекулы формальдегида без учета влияния растворителя после проведения оптимизации: -3098,51 эВ. Полная энергия

молекулы формальдегида в растворе ацетонитрила после проведения оптимизации: -3098,75 эВ.

Частоты ИК-спектра формальдегида без учета влияния растворителя		Частоты ИК-спектра формальдегида в растворе ацетонитрила	
Частота, см ⁻¹	Интенсивность	Частота, см ⁻¹	Интенсивность
1333,09	1,49	1352,82	1,90
1374,49	19,64	1370,85	27,88
1668,26	10,09	1662,59	30,93
2007,55	166,99	1964,79	273,02
3167,97	55,68	3205,95	63,75
3242,52	107,84	3292,69	90,95

Рис.2. Частоты ИК-спектра формальдегида (CH₂O)

В работе был проведен расчет частот колебаний молекулы формальдегида в растворе ацетонитрила, рассчитали полную энергию молекулы формальдегида без учета влияния растворителя после проведения оптимизации, полную энергию молекулы формальдегида в растворе ацетонитрила после проведения оптимизации. Составили таблицу частот ИК - спектра формальдегида в растворе ацетонитрила. В случае учета влияния растворителя значение полной энергии молекулы получилось меньше, чем в случае отсутствия растворителя. Наиболее интенсивный пик в инфракрасном спектре смещается в сторону более низких значений и становится выше по интенсивности.

Литература

1. Крайкин В.А., Мусина З.Н., Седова Э.А., Салазкин С.Н. Новый подход к оценке параметров разветвленности полиарилэфталидов, Москва. 2001.
2. Шейхет Б. Я., Квантовохимическая и статистическая теория растворов. Вычислительные методы и их применение, М., 1989
- 3.

© Гайнетдинов В.Р. Янов Д.Ф. Габидуллина Г.Г., 2015

УДК 544.543

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СОРБЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ НА ПИРИМИДИНОФАНЕ

Гайнуллина Ю.Ю.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Урацилы и его производные растворяются в воде, а полости в супрамолекулярной структуре образуются за счет водородных связей, что делает их недостаточно стабильными. В связи с этим представляют интерес нерастворимые в воде модификаторы, обладающие высокой стабильностью и селективностью по отношению к молекулам изомеров. В настоящей работе в качестве такого модификатора предлагается использовать макроциклическое соединение, содержащее 6-метилурациловые фрагменты, 7,19-диаза-7,19-диэтил^{1,2,1,6,13,13}тетраоксо-1^{4,13}-диметил-1(1,3),13(1,3)-дипиримидинацикло - тетракосафан.

В качестве инертного носителя был выбран Chromaton NAW (размер гранул 0.16—0.25 мм, удельная поверхность 1 м²•г⁻¹). Модификатор пиримидинофан синтезированный В.Е. Семеновым по известной методике. Его температура плавления составляет 100 °С. Модифицирование пиримидинофаном проводили из его разбавленного раствора раствора в ацетоне путем отгона растворителя. Масса наносимого модификатора составляла 10% от массы инертного носителя. Для адсорбента на основе пиримидинофана характерны размерные эффекты по отношению к способным к образованию водородных связей молекулам спиртов. Такая неаддитивность термодинамических функций адсорбции аналогична наблюдаемым размерным эффектам на сорбентах с супрамолекулярными сетчатыми структурами. Отсутствие размерных эффектов для алканов, по всей вероятности, связано с неупорядоченным расположением полостей макроцикла. Наличие размерных эффектов для спиртов связано с взаимодействием гидроксильных групп спиртов с атомами азота пиримидинофана, в результате чего молекула спирта оказывается жестко закрепленной внутри полости. Это приводит к появлению размерного эффекта для пары гептанол-октанол. Таким образом, адсорбция органических молекул на пиримидинофане характеризуется размерными эффектами, схожими с таковыми для сорбентов на основе супрамолекулярных сетчатых структур. Явление различий в значениях теплотах и энтропиях адсорбции проявляется только для гомологического ряда *n*' и изоспиртов, вероятно, за счет образования водородных связей с атомами азота в полости макроцикла. При адсорбции в полости молекулы спиртов взаимодействуют гидроксильными радикалами с атомами азота N(7) и N(19) пиримидинофана. Адсорбция органических молекул

преимущественно делокализованная. Полярность исследуемого образца близка 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.

УДК 621.81

АНТИОКСИДЛИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛОВ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С РАДИКАЛАМИ И ПЕРОКСИДНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

Шарипова Г.М., Любимова К.С., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Урацил и ряд его производных являются физиологически активными лекарствами и широко применяются в лечебной практике. Кроме того, эффективность фармакологического действия многих лекарственных препаратов коррелирует с их эффективностью в качестве антиоксидантов. Поэтому значения количественных характеристик потенциальных лекарств в качестве антиоксидантов приобретает большое значение [1,2].

Была экспериментально изучена антиокислительная активность ряда урацилов при их взаимодействии а) с пероксидом водорода как первичным молекулярным продуктом окисления по реакции их взаимодействия в водных растворах; б) с пероксильными радикалами на примере инициированного АИБН окисления 1,4-диоксана [3]. Антиокислительные активности изученных соединений охарактеризованы константами скорости ингибирования и активационными параметрами в виде энергии активации и предэкспоненциального множителя. Кроме того, для идентификации ключевых стадий указанных реакций, а также для получения полной картины поведения всех участников реакции, в том числе и радикальной природы, нами был использован метод математического моделирования с помощью программного комплекса «ХимКинОптим».

Литература

1. Гимадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г. Синтез, модификация и биологическая активность урацилов: монография. — Уфа: Гелем, 2013. — 176

2. Чернышенко Ю.Н., Мустафин А.Г., Гимадиева А.Р., Абдрахманов И.Б., Герчиков А.Я., Сафарова И.В. Синтез и антиоксидантная активность аминотетраметилураниловых производных 6-метилурацила. // Хим.-фарм. журнал. 2010.- Т. 44. - № 3. - С. 14-16

3. Ахатова Г.Р., Сафарова И.В., Герчиков А.Я. Антиокислительная активность производных урацила // Кинетика и катализ. – 2011. – Т.52. – №1. – С. 3-7.

© Шарипова Г.М., Любимова К.С., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я., 2015

**ПОЛЯРНОСТЬ ПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ ПРИ
РАЗЛИЧНЫХ ЗАПОЛНЕНИЯХ ПОВЕРХНОСТИ**

Ганиева А.Г., Билалова Р.В., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Базовой характеристикой любого сорбента является полярность. Термин «полярность» не имеет строгого определения, но, в общем, он характеризует степень вклада различных межмолекулярных взаимодействий в энергию адсорбции. Чем больше вклад специфических взаимодействий, тем выше полярность поверхности. В работе проведено изучение полярности трёх пористых полимерных сорбентов при различных степенях заполнения поверхности. Использовались пористые полимерные сорбенты Dowex L-285 (Dow Chemicals, USA), Полисорб-1 (Russia) и MN-200 (Purolite, UK). Их удельные поверхности составляли 800, 250 и 900 м²/г. Средние размеры пор равнялись 25 и 130 Å для Dowex L-285 и Полисорб-1. MN-200 представляет собой бипористый сорбент со средним размером микропор 15 Å и средним размером макропор 800 Å. Сорбенты заполнялись в металлическую колонку длиной 0,5 м и внутренним диаметром 4 мм. Исследование проводилось методом обращённой газовой хроматографии в режиме конечной концентрации на хроматографе «Chrom-5» с детектором по теплопроводности. Температура термостата составляла 200 °С. В испаритель хроматографа вводились пробы конечного объёма от 0.02 до 70 мкл. Скорость газа-носителя азота составила 30 мл/мин. Все сорбенты предварительно кондиционировались в токе газа-носителя при 200 °С в течение 10 часов. В качестве сорбатов были выбраны органические вещества различной природы, способные к дисперсионным, индукционным, ориентационным и донорно-акцепторным типам взаимодействий: этанол, пропанол, бутанол, изопропанол, изобутанол, бензол, толуол, этилацетат, гексан, гептан и октан. Было установлено, что полярность сорбента может не быть постоянной величиной. В случае пористых полимеров на основе стирола и дивинилбензола с увеличением степени заполнения поверхности дисперсионная составляющая энергии адсорбции падает, а специфическая – возрастает, что приводит к росту полярности поверхности. Для Dowex L-285 полярность возрастает до $\theta=0.26$, а при больших заполнениях остаётся постоянной, что вероятно связано с началом заполнения макропор. В случае Полисорба-1 при заполнениях до 0.06 наблюдалось заметное снижение полярности поверхности, что вероятно связано с наличием остатков инициатора полимеризации. Для сорбента на основе сверхшитого полистирола с изменением степени заполнения поверхности полярность практически не меняется.

© Ганиева А.Г., Билалова Р.В., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х., 2015

**ДФТ-ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПРИСОЕДИНЕНИЯ
ПЕРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ К ФУЛЛЕРЕНАМ C₆₀ И C₇₀**

Р. Р. Гарипова, Д. Ш. Сабилов

Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, Российская Федерация

Реакции присоединения пероксильных радикалов к фуллеренам используются для селективного синтеза широкого ряда производных фуллеренов C₆₀ и C₇₀, а также лежат в основе их ингибирующего действия на процессы окисления органических соединений [1]. В настоящей работе методом теории функционала плотности РВЕ/3 ζ (программа ПРИРОДА-06) изучены поверхности потенциальной энергии и рассчитаны константы скоростей реакций присоединения радикалов 'BuOO \cdot и Ph(CH₃)₂COO \cdot к фуллеренам C₆₀ и C₇₀, происходящих с образованием соответствующих фуллеренильных радикалов ROOC₆₀ \cdot и ROOC₇₀ \cdot .

Рассчитанные по уравнению Эйринга, константы скорости присоединения 'BuOO \cdot к C₆₀ и C₇₀ равны 100 и 18.9 л моль⁻¹ с⁻¹, соответственно; в случае реакций присоединения Ph(CH₃)₂COO \cdot , они равны 14.5 и 17.7 л моль⁻¹ с⁻¹ (T = 298 К; газовая фаза). Оцененная теоретически ёмкость ингибитора для C₆₀ равна 3.7÷5.3. Исходя из рассчитанных значений констант скоростей можно заключить, что фуллерен C₆₀ более «чувствителен» к природе присоединяющегося пероксильного радикала, чем C₇₀. Реакционная способность фуллеренов по отношению к пероксильным радикалам определяется как природой фуллерена, так и природой присоединяющихся радикалов ROO \cdot .

Литература

- 1) Р. Булгаков, Д. Галимов, У. Джемилев, *Усп. химии*, 83 (2014) 677–717.
- 2) D. Sabirov, R. Garipova, R. Bulgakov, *J. Phys. Chem. A* 117 (2013) 13176–13183.
- 3) D. Sabirov, R. Garipova, R. Bulgakov, *Fullerenes Nanotubes Carbon Nanostruct.* 23 (2015) 1051–1057.

© Р. Р. Гарипова, Д. Ш. Сабилов, 2015

КОМПЛЕКСЫ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНА С 4- И 5-АМИНОСАЛИЦИЛОВЫМИ КИСЛОТАМИ: СОСТАВ, УСТОЙЧИВОСТЬ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ

Мурзакова Л.И., Зимин Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Циклодекстрины находят широкое применение в медицине, пищевой промышленности, косметологии благодаря своей способности образовывать комплексы включения типа «гость-хозяин» и менять некоторые свойства «гостя», а именно: повышать растворимость в воде, улучшать биологическую доступность, снижать токсичность и т.д. В настоящее время одной из наиболее важных и быстро прогрессирующих областей применения циклодекстринов и их производных является разработка адресных систем доставки лекарств в организме, поскольку активные субстанции в молекулярных комплексах с циклодекстринами (по сравнению с исходными) обладают не только улучшенными фармакокинетическими параметрами, но и приобретают новые полезные свойства, повышающие их фармакотерапевтическую ценность [1]. В связи с изложенным целью настоящей работы явилось изучение комплексообразования β -циклодекстрина (β -ЦД) с 4- и 5-аминосалициловыми кислотами (4- и 5-АСК). Установлено, что добавление β -ЦД к водным растворам 4-АСК (или 5-АСК) приводит к следующим изменениям в УФ спектрах кислот:

- 1) сдвигу максимумов поглощения 4- и 5-АСК в длинноволновую область,
- 2) уменьшению интенсивностей пиков полос поглощения.

Эти данные можно рассматривать как результат межмолекулярных взаимодействий, происходящих в реакционных системах « β -ЦД + 4-АСК (5-АСК) + H_2O » и приводящих к образованию комплексных соединений.

В настоящей работе спектрофотометрически с использованием методов изомольярных серий и молярных отношений: 1) установлен состав комплексов β -циклодекстрина с 4- и 5-аминосалициловыми кислотами, 2) рассчитаны константы устойчивости образующихся комплексов, 3) изучена температурная зависимость констант устойчивости и определены термодинамические параметры комплексообразования.

Работа выполнена при поддержке проекта № 4.299.2014/К, исполняемого в рамках проектной части госзадания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности, и гранта РФФИ (проект 14-03-97026 р_поволжье_а).

Литература

1. Федорова П.Ю. и др. Природные циклические олигосахариды – циклодекстрины, в системах доставки лекарств // Медич. вестн. Башкортостана, 2011, Т. 6, № 4. с. 125-131.

© Мурзакова Л.И., Зимин Ю.С., 2015 г.

КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ОЗОНА С УРАЦИЛАМИ

Панкратова А.П., Зимин Ю.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Пиримидиновые основания чрезвычайно широко распространены в природе. Они играют важную роль в клетках живых организмов (животных, растений, микроорганизмов, вирусов), входя в состав нуклеиновых кислот, нуклеотидов, некоторых коферментов, витаминов и др. [1]. В последние десятилетия существенно вырос интерес исследователей к окислению пиримидиновых оснований в связи с необходимостью понимания процессов разрушения и восстановления ДНК. При этом в качестве окислителей рассматривались O_2 , H_2O_2 , различные радикалы и др. Весьма интересным представляется изучение окислительных превращений производных пиримидина под действием озон-кислородной смеси, чему и посвящена настоящая работа. В качестве объектов исследования были выбраны производные урацила (ПУ) – 6-метилурацил и 5-бром-6-метилурацил. Растворителем служила свежеперегнанная бидистиллированная вода.

В настоящей работе:

- 1) Обнаружена хемилюминесценция в видимой области спектра при озонированном окислении ПУ в водных растворах.
- 2) Методом хемилюминесценции изучена кинетика изменения интенсивности свечения в реакции ПУ с озоном. Установлено, что интенсивность свечения уменьшается во времени по закону реакции первого порядка. Значения эффективных констант скоростей линейно возрастают с увеличением начальных концентраций ПУ.
- 3) В интервале 287÷333 К изучена температурная зависимость константы скорости второго порядка и определены активационные параметры уменьшения хемилюминесценции в исследованной нами реакции.
- 4) Кинетика реакции озона с ПУ изучена методом УФ-спектроскопии. Установлено, что при сопоставимых концентрациях реагентов кинетические кривые расхождения производных урацила описываются уравнением суммарного второго порядка.
- 5) Проведено сопоставление данных, полученных разными методами.

Работа выполнена при поддержке проекта № 4.299.2014/К, исполняемого в рамках проектной части госзадания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности, и гранта РФФИ (проект 14-03-97026 p_поволжье_a).

Литература

1. Гимадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г. Синтез, модификации и биологическая активность урацилов. – Уфа: Гилем, 2013. – 176 с.

© Панкратова А.П., Зимин Ю.С., 2015 г.

ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ФЕНОЛОВ НА ИНИЦИИРОВАННОЕ ОКИСЛЕНИЕ 1,4-ДИОКСАНА

Петрова А.В., Гарифуллина Г.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Замещенные фенолы нашли широкое применение в качестве ингибиторов для предотвращения нежелательных реакций окисления, окислительной деструкции. Известно, что эти процессы протекают по радикально - цепному механизму. Производные фенола являются эффективными ингибиторами по отношению к пероксильным радикалам, ведущими цепи окисления в кинетическом режиме окисления, например, ионол[1]. Нами исследовано влияние 3-х замещенных фенолов (заместители в 2,4,6 положениях) на окисление 1,4-диоксана. Окисление 1,4-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 1,4 - диоксаном имеет линейный вид, порядок реакции по кислороду нулевой, что подтверждает наличие кинетического режима окисления модельного субстрата. По результатам данных опытов доказано, что параметр окисляемости субстрата совпадает с литературными данными.

Добавки в окисляющийся 1,4 - диоксан замещенного фенола приводят к появлению четкого периода индукции на кинетических кривых поглощения кислорода. Таким образом, исследованные замещенные фенолы являются акцепторами свободных радикалов, образующихся при окислении модельного субстрата. Установлено, что величина периода индукции линейно зависит от концентрации добавленного ингибитора. Наличие данной зависимости позволило вычислить стехиометрический коэффициент ингибирования, который равен двум. Следует отметить, что для данного класса ингибиторов характерна гибель двух радикалов на одной молекуле ингибитора. После периода индукции скорость поглощения кислорода 1,4-диоксаном намного (в 5-8 раз) меньше, чем в отсутствие ингибирующих добавок. По-видимому, продукты превращения замещенных фенолов также тормозят процесс окисления модельного субстрата.

Литература

1/ Е.Т. Денисов, В.В. Азатян. Ингибирование цепных реакций.

Черноголовка, Типография ИХФЧ РАН. 1997, 266 с.

© Петрова А.В., Гарифуллина Г.Г., 2015 г.

ПРЕВРАЩЕНИЕ КАРБАМИДА В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА КАРБОАММОФOSФАТА

Раянова Ю.Р., Кинзябулатова Г.С.

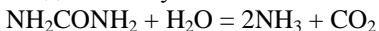
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для поддержания плодородия полей и получения стабильно высокого урожая в почву необходимо вносить комплексные минеральные удобрения. Данные удобрения имеют различные оптимальные соотношения питательных макро- и микроэлементов, не содержат тяжелых металлов, фтора и других вредных примесей.

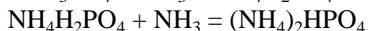
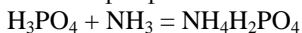
Данным требованиям в полной мере отвечают жидкие комплексные удобрения (ЖКУ), содержащие два или три основных питательных вещества – азот, фосфор и калий, а также микроэлементы.

Нами исследован процесс получения жидких комплексных удобрений - карбоаммофосфатов (КАФ) на основе фосфорной кислоты и водного раствора карбамида при температуре до 96-99°C.

При повышенной температуре в кислой водной среде, обусловленной присутствием фосфорной кислоты, происходит разложение карбамида с образованием аммиака и выделением углекислого газа:



Аммиак нейтрализует фосфорную кислоту с образованием моноаммонийфосфата и диаммонийфосфата.



При этом имеет место увеличение показателя pH реакционной среды до нейтрального и образование комплексных соединений – карбоаммофосфатов с общей формулой $\text{H}_3\text{PO}_4 \cdot n\text{NH}_3 \cdot (3-n)\text{NH}_2\text{CONH}_2$.

Зависимость массового отношения содержания амидного азота к P_2O_5 от продолжительности синтеза представлена на рисунке 1.

В результате исследования подтверждено, что в процессе синтеза имеет место снижение содержания амидного азота (рис.1) вследствие перехода некоторой части амидной формы азота в аммонийную. При этом, степень перехода амидной формы азота в аммонийную зависит от исходного соотношения реагентов, а именно, от мольного соотношения карбамида к фосфорной кислоте.

Содержание P_2O_5 в жидком удобрении регулируется плотностью раствора карбоаммофосфатов, а содержание общего азота – мольным соотношением $\text{NH}_2\text{CONH}_2 / \text{H}_3\text{PO}_4$.

Установлено, что количество образованного аммиака при разложении карбамида в ходе процесса синтеза составляет от 1,7 до 2,0 моль на 1 моль фосфорной кислоты.

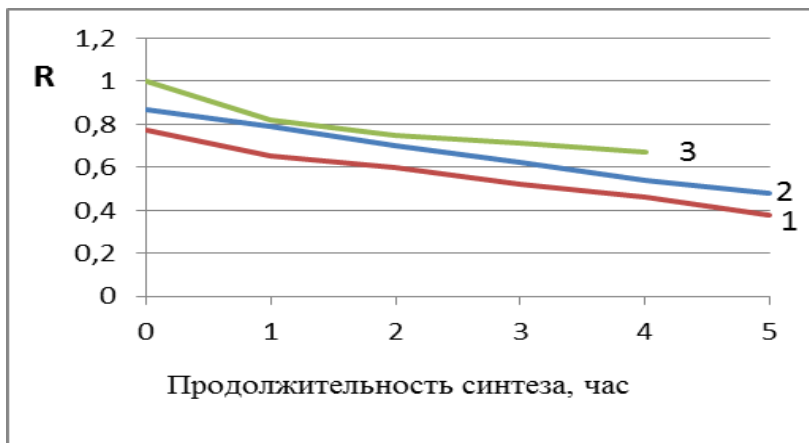


Рис. 1. Зависимость массового отношения содержания амидного азота к P_2O_5 (R) от продолжительности синтеза при мольном соотношении карбамида к фосфорной кислоте, равном: 2,0:1 (кривая 1), 2,25:1 (кривая 2) и 2,5:1 (кривая 3)

Найдено, что при синтезе карбоаммофосфатов степень разложения карбамида снижается с увеличением расхода карбамида: при мольном соотношении NH_2CONH_2/H_3PO_4 , равным 2,0, степень разложения карбамида составляет 50%; при мольном отношении, равным 2,25 – 45%, а при мольном отношении, равным 2,5 – 33%.

Подтверждено, что взаимодействие раствора карбамида и фосфорной кислоты сопровождается разложением карбамида и образованием преимущественно карбодиаммофосфатов $H_3PO_4 \cdot 2NH_3 \cdot NH_2CONH_2$.

Литература

1. Карелин Г.А. Справочник агронома нечерноземной зоны / М.: Колос, 1973.– 536 с.
2. Патент РФ № 2510626. Способ получения жидких комплексных удобрений. Шарипов Т.В., Мустафин А.Г., Кинзябулатова Г.С., Акбулатов А.Ф. Оpubл. 10.04. 2014. Бюл. № 9.
3. Эффективность нового гранулированного комплексного минерального удобрения в посевах сахарной свеклы. Юхин И.П., Серeda А.Н, Шарипов Т.В. // Агрoхимия, 2015, №7. – С. 25-28.

© Раянова Ю.Р., Кинзябулатова Г.С., 2015

ПОЛУЧЕНИЕ ФТОРОСИЛИКАТА НАТРИЯ НА ОСНОВЕ СУЛЬФАТНО-СОДОВОЙ СМЕСИ И СУЛЬФАТНОГО РАССОЛА

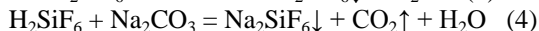
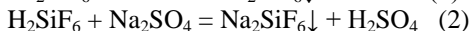
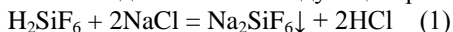
Сафарьянова Э.Р., Кинзябулатова Г.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рациональное использование сырьевых ресурсов является в настоящее время актуальной экономической и экологической задачей

В процессе производства экстракционной фосфорной кислоты (ЭФК) путем сернокислотного разложения фторофосфатного сырья образуется побочный продукт – фторокремниевая кислота 16-20% H_2SiF_6 (кремнефтористоводородная кислота, fluorosilicic acid) Учитывая многотоннажность производства фосфорсодержащих минеральных удобрений, а также необходимость защиты окружающей среды от техногенного воздействия фтора, утилизация фторсодержащих отходов является весьма актуальной задачей [1].

В настоящее время, в основном, фторокремниевая кислота (ФКК) перерабатывается во фтористый алюминий и фторосиликат натрия (ФСН). Существуют хлоридный, сульфатный, гидроксидный и содовый методы получения ФСН из ФКК. Вышеуказанные методы характеризуются протеканием процессов взаимодействия кислоты с натрийсодержащими реагентами с образованием осадка ФСН по следующим реакциям:



В промышленности внедрен содовый метод производства фторосиликата натрия [2,3]. Технический продукт выпускается ТУ 113-08-587-86 в виде мелкокристаллического порошка белого цвета. Продукт высшего сорта содержит не менее 98%, первого сорта – не менее 95% Na_2SiF_6 . Учитывая дороговизну кальцинированной соды, является актуальным поиск новых альтернативных видов натрийсодержащего сырья.

При производстве каустической соды электролизом водного раствора поваренной соли имеет место образование отхода - сульфатного рассола, содержащего хлорид, сульфат и гидроксид натрия [7]. В процессе упаривания раствора гидроксида натрия, примесь сульфата натрия выпадает в осадок и выводится из технологического процесса в виде сульфатного рассола. При производстве глинозема для алюминиевой промышленности имеет место образование отхода – сульфатно-содовой смеси (ССС), содержащего сульфат и карбонат натрия.

Данные отходы в настоящее время не находят квалифицированного применения и являются источниками загрязнения окружающей среды.

Авторами статьи была разработана технология получения ФСН на основе ФКК и вышеуказанных отходов. Для исследований использовали сульфатный рассол – отход ОАО «Каустик» г. Стерлитамака, содержащий 257 г/л NaCl, 22 г/л Na₂SO₄ и 32 г/л NaOH. Во втором случае применяли сульфатно – содовую смесь (ССС) – отход глиноземного производства, содержащий 76,8% Na₂SO₄, 21% Na₂CO₃, 1,9% Al₂O₃, 0,0013% Fe₂O₃, 7,1% влаги.

Необходимыми условиями технологического процесса, обеспечивающими получение ФСН высшего сорта на основе СССР, являются:

- отделение нерастворимого осадка при приготовлении раствора СССР,
- концентрация раствора СССР 15-20%,
- декантация реакционной смеси с отделением маточника и получением пульпы продукта,
- разбавление пульпы ФСН водой в соотношении 1:1, и ее фильтрация,
- температурой 0-35°С.

Оптимальными условиями процесса, обеспечивающими получение ФСН высшего сорта на основе сульфатного рассола, являются:

- предварительное разбавление сульфатного рассола водой в объемном соотношении 1:1 и - поддержание 10-20%-ного избытка сульфатного рассола,
- температура – 45-55°С, - продолжительность перемешивания – 20-30 мин,
- декантация полученной реакционной смеси с отделением маточного раствора и пульпы ФСН,
- разбавление пульпы водой в соотношении 1:1,
- фильтрация разбавленной пульпы, промывка водой осадка ФСН.

Для получения 1 т ФСН расходуется: 2,85-2,9 т сульфатного рассола или 0,92 т сульфатно-содовой смеси (для сравнения: 0,663 т кальцинированной соды).

Таким образом, применение сульфатно-содовой смеси или сульфатного рассола в качестве натрийсодержащего сырья позволит выпускать ФСН высшего сорта, при этом значительно снизить себестоимость выпускаемой продукции.

Литература

1. Зайцев В.А., Новиков А.А., Родин В.И. Производство фтористых соединений при переработке фосфатного сырья. – М.: Химия. 1982. 248с.

2. Патент РФ 2356835. Шарипов Т.В., Мустафин А.Г. Способ получения кремнефторида натрия. Оpubл. 27.05.2009. Бюл. 15.

3. Патент РФ 2492142. Шарипов Т.В., Мустафин А.Г., Шаяхметов Д.И. Способ получения кремнефторида натрия. Оpubл. 10.09.2013. Бюл. 25.

© Сафарьянова Э.Р., Кинзябулатова Г.С., 2015

УДК 541.64.11

ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ CHEMICAL_DIF_SOLUTION

Смирнов П.С., Гиззатова Э.Р.

Башкирский государственный университет, г.Стерлитамак, Россия

Модернизация производства синтетического каучука невозможна без разработки и применения методов математического моделирования, поскольку именно они позволяют перейти от химических процессов к математическому описанию и, в дальнейшем, к решению прямой и обратной кинетических задач.

В связи с этим, возникает задача создания собственного программного обеспечения, автоматизирующего переход от схем сложных реакций к математическим выражениям.

Переходя от кинетической модели процесса полимеризации к математическому описанию, необходимо выявить все возможные законы, которым подчиняются реагенты, присутствующие в каталитической системе. Эти законы, представляющие собой набор элементарных стадий, есть кинетическая схема процесса[1].

Программное обеспечение ChemicalDifSolution предназначено для проведения вычислительных экспериментов по решению прямой кинетической задач процессов ионно-координационной полимеризации вещественных, однако оно также может быть использовано не только для рассмотренного процесса, но и для произвольных процессов, проходящих в изотермическом режиме, в том числе процессов обрывной, радикальной полимеризации, а также процессов сополимеризации мономеров.

В работе был создан алгоритм и программное обеспечение, решающее задачу определения концентраций полимерных цепей с большим числом звеньев. При этом количество уравнений в системе, описывающей процесс, ограничивается лишь доступной оперативной памятью. Результатами вычислительного эксперимента являются концентрации всех участвующих в процессе реагентов, распределенные по времени.

Литература

[1] Смирнов П.С. Алгоритм ограничения длины цепи в процессах безобрывной полимеризации // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2015» / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов. [Электронный ресурс] — М.: МАКС Пресс, 2015. — 1 электрон. опт. диск (DVD-ROM); 12 см.

© Смирнов П.С., Гиззатова Э.Р., 2015

АНИЗОТРОПИЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ БИСАДДУКТОВ ФУЛЛЕРЕНОВ C_{60} И C_{70} , ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

Терентьев А.О., Сабиров Д.Ш.

Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, Российская Федерация

С развитием синтетических методов в химии фуллеренов бис- и мультиаддукты $C_{60}X_n$ и $C_{70}X_n$ ($n \geq 2$) стали более доступны, что обусловило возможность их применения в различных приложениях. К примеру, bis-PCBM, bisdihydrohaphtho- C_{60} и др. бисаддукты успешно протестированы в качестве электроноакцепторных материалов органических солнечных батарей (ОСБ). Такие соединения могут существовать в виде разных изомеров. Ранее было показано, что использование наиболее изотропных бисаддуктов, т.е. обладающих наименьшей анизотропией поляризуемости a^2 , позволяет достигать больших значений выходных параметров ОСБ (напряжения холостого хода и эффективности преобразования энергии) [1]. В связи с этим в работе методом теории функционала плотности PBE/3 ζ были рассчитаны значения a^2 следующих бисаддуктов C_{60} и C_{70} : bis-[60]PCBM, [60]OQMF, bis-[70]PCBM, and [70]OQMF (18, 16, 41 и 42 региоизомера соответственно).

Были обнаружены квадратичные корреляции между значениями a^2 и расстоянием между аддендами в молекулах $C_{60}X_2$ и $C_{70}X_2$ [2]. В каждой из серий изомеров наименьшими значениями анизотропии характеризуются следующие бисаддукты bis-[60]PCBM-*ee*-1, [60]OQMF-*cis*-3.2, [60]OQMF-*trans*-4.2, *cc*_{1,1}*cc*_{2,1}-bis-[70]PCBM и *cc*₁*cc*_{2,1}-[70]OQMF. Эти соединения могут быть использованы в ОСБ с улучшенными выходными параметрами.

Литература

1. D. Sabirov, *J. Phys. Chem. C* 117 (2013) 44996–45028.
2. D. Sabirov, A. Terentyev, R. Bulgakov, *J. Phys. Chem. A* 119 (2015); DOI: 10.1021/acs.jpca.5b07334.

© А. О. Терентьев, Д. Ш. Сабиров, 2015

ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ [2+1]-ЦИКЛОАДДУКТОВ ФУЛЛЕРЕНА $C_{60}X_n$

Тухбатуллина А.А., Сабиров Д.Ш.

Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа, Россия

В настоящее время вопрос о связи химического строения и физических свойств часто возникает при конструировании органических производных фуллерена с заданными физико-химическими характеристиками, необходимыми для создания наноматериалов, лекарственных препаратов и молекулярных устройств [1]. Целью данной работы является исследование зависимости средней поляризуемости циклопропановых и азиридиновых полиаддуктов фуллерена C_{60} от их строения.

Поляризуемость (α) циклоаддуктов C_{60} была рассчитана методами теории функционала плотности PBE/3 ζ и V3LYP/А1 (программа ПРИРОДА-06). Установлено, что α не зависит от взаимного расположения аддендов. Сравнение полученных результатов с оценками α по аддитивной схеме указало на наличие неаддитивности, т.е. депрессию поляризуемости [1, 2]. Была предложена формула, связывающая $\alpha(C_{60}X_n)$ с числом аддендов в молекуле n :

$$\alpha(C_{60}X_n) = \alpha(C_{60}) + n\alpha(X) - \frac{n(n-1)}{n_{\max}(n_{\max}-1)} \Delta\alpha(C_{60}X_{n_{\max}}) \quad (1)$$

где $\alpha(C_{60})$ – средняя поляризуемость фуллерена C_{60} , $\alpha(X)$ – инкремент, учитывающий изменение поляризуемости при присоединении одного адденда X , $\Delta\alpha(C_{60}X_{n_{\max}})$ – депрессия поляризуемости максимально функционализированного аддукта ($n_{\max} = 30$). Формула (1) применительно к $C_{60}(CH_2)_n$ и $C_{60}(NH)_n$ имеет вид:

$$\alpha(C_{60}(CH_2)_n) = 82.7 + 2.27n - 0.037n^2 \quad (2)$$

$$\alpha(C_{60}(NH)_n) = 82.7 + 1.52n - 0.029n^2 \quad (3)$$

Показано, что предложенная формула корректно описывает поляризуемость других циклоаддуктов фуллерена (например, $C_{60}O_n$ [3]).

Литература

1. D. Sabirov, *RSC Adv.* 4 (2014) 44996–45028.
2. D. Sabirov, A. Tukhbatullina, R. Bulgakov, *Comput. Theor. Chem.* 989 (2012) 18–22.
3. D. Sabirov, R. Bulgakov, *Chem. Phys. Lett.* 56 (2011) 52–56.

© Тухбатуллина А.А., Сабиров Д.Ш., 2015

ОСОБЕННОСТИ КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ СВИНЦА В СУЛЬФАТСОДЕРЖАЩИХ СРЕДАХ

А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, Н. Н. Агапкина
ФГБОУ ВПО «ЧелГУ», г. Челябинск, Россия

Целью работы являлось исследование особенностей коррозионно-электрохимического поведения свинца в сернокислых растворах. Изучение проводили методом построения циклических вольтамперометрических кривых свинца в растворах серной кислоты различных концентраций. Также в работе проведен термодинамический анализ исследуемых систем с помощью построения и анализа диаграммы электрохимического равновесия E-pH системы $Pb - H_2SO_4 - H_2O$.

Циклические вольтамперометрические кривые получали в растворах серной кислоты с концентрациями 10 и 40%. По данным кривым определили области пассивации, максимальные токи окисления, установлено, что ток максимума окисления свинца в серной кислоте линейно зависит от корня квадратного из скорости развертки потенциала, процессы происходят с большой долей вероятности в диффузионном режиме, при этом в системе присутствуют также и не электрохимические стадии.

В работе проанализированы диаграмма электрохимического равновесия E-pH систем $Pb - H_2SO_4 - H_2O$. Согласно уточненной диаграмме $Pb - H_2SO_4 - H_2O$ при низких значениях pH по мере возрастания потенциала происходит последовательная смена областей термодинамического преобладания от области иммунности свинца и существования молекул сероводорода до образования сульфида свинца PbS совместно с различными формами существования серы. При pH меньше 0 и относительно высоких потенциалах на диаграмме присутствует область существования $PbSO_3$, при более высоких значениях pH (1-2) область растворения с образованием Pb^{2+} . Далее, при потенциалах ниже выделения кислорода существуют области как растворения (pH < 1), так и область термодинамической устойчивости сульфата свинца совместно с гидросульфат ионами.

При изучении коррозионно-электрохимического поведения свинца в растворах серной кислоты необходимо учитывать, кроме образования сульфата свинца, существование соединений с различной степенью окисления серы – сульфидов и сульфитов свинца, термодинамически возможных в системе $Pb - H_2SO_4 - H_2O$.

© А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, Н. Н. Агапкина, 2015

**ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СУЛЬФАТ-ИОНОВ
НА КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ
СТАЛЕЙ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ ХРОМА**

А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, В. С. Мухаметьянов
ФГБОУ ВПО «ЧелГУ», г. Челябинск, Россия

В настоящее время в различных отраслях промышленности применяются легированные стали с содержанием хрома от 1 до 18%. Примерами данных сталей могут служить 26ХМФА-2 (до 1% Cr), 15Х5М (5% Cr), 20Х13 (13% Cr). Целью работы являлось изучение коррозионно-электрохимическое поведение сталей с различным содержанием хрома в сернокислых средах.

Коррозионно-электрохимическое поведение сталей изучали с помощью построения поляризационных кривых в растворах серной кислоты. При этом варьировали концентрацию кислоты (10, 20 и 40%), скорость развертки потенциала (от 10 до 100 мВ\с). Проведена обработка полученных кривых, определены стационарные потенциалы, потенциалы начала пассивации, токи максимума и пассивации. Зависимости тока максимума окисления от корня квадратного развертки потенциала имеют линейный характер, что свидетельствует о диффузионном режиме протекания процесса для всех трех материалов.

Из полученных данных можно сделать вывод, что сталь с содержанием хрома 1% (26ХМФА-2) по своему коррозионно-электрохимическому поведению в сернокислых растворах незначительно отличается от стали с содержанием хрома 5% (15Х5М). Отличие в коррозионном поведении данных материалов состоит в основном в различных условиях начала пассивации при высокой положительной поляризации.

На пассивацию стали 15Х5М в сернокислых растворах влияет концентрация кислоты, скорость развертки потенциала. Очевидно, что пассивное состояние стали 15Х5М не стабильно и реализуются как в результате электрохимических процессов, так и в результате различных не электрохимических процессов. Сильное депассивирующее влияние на сталь 15Х5М в кислых растворах оказывают хлорид-ионы при концентрации выше 0,1 моль/л.

© А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, В. С. Мухаметьянов, 2015

УДК: 544.165

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» В РЯДУ
РАЗНЫХ КЛАССОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С
ВЫРАЖЕННОЙ НООТРОПНОЙ АКТИВНОСТЬЮ**

Хайруллина В.Р.¹, Васильев М.Н.¹, Герчиков А.Я.¹, Зигангиров А.С.¹,
Насртдинова Т.Р.¹, Зарудий Ф.С.²

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Башкирский государственный медицинский университет, г. Уфа, Россия

Методы QSAR широко используются для моделирования взаимосвязи «структура-свойство». Важная задача QSAR заключается в идентификации и количественном выражении структурных параметров или физико-химических свойств молекул с целью выявления факта влияния каждого из них на биологическую активность. Если такое влияние имеет место, то возможно составление регрессионных уравнений, позволяющих просчитать заранее активность новых соединений и сократить количество синтезируемых веществ [1]. Целью настоящей работы было построение QSAR-моделей для изучения взаимосвязи «структура-свойство» в ряду органических соединений с выраженной ингибирующей активностью в отношении ацетилхолинэстеразы (АХЭ). В задачи исследования входило: 1) формирование обучающих и тестовых выборок на основе ряда биологически активных веществ с разной степенью ингибирующей активности в отношении АХЭ; 2) построение QSAR-моделей прогноза численных значений IC₅₀ для ингибиторов АХЭ; 3) валидация построенных QSAR-моделей на структурах обучающего и тестового массивов.

Построение QSAR-моделей проводили на основе структурных формул производных моно- и дизамещенных пирролидина, морфолина, тиоморфолина, пиперидина с использованием компьютерной программы GUSAR [2-4]. Исследование выполняли по методике, описанной в [5]. В этой программе построения (Q)SAR моделей основано на использовании двух типов подструктурных дескрипторов атомных окрестностей: MNA (Multilevel Neighbourhoods of Atoms) и QNA (Quantitative Neighbourhoods of Atoms) [2-5]. Их расчет осуществляется программой GUSAR автоматически из структурных формул химических соединений с учетом валентности и парциальных зарядов содержащихся в них атомов, но без указания специфики типов связи. Итоговые регрессионные модели представляли собой консенсус QSAR-моделей, построенных независимо друг от друга по каждому из этих типов дескрипторов и характеризующихся высокой прогностической способностью. Статистические параметры консенсус моделей, а также характеристики точности предсказанных по ним значений pIC₅₀ для ингибиторов АХЭ представлены в табл. 1. Как следует из результатов, представленных в табл. 1, для построения QSAR-моделей с

приемлемыми статистическими характеристиками ($R^2 > 0.6$, $Q^2 > 0.5$) [2-4] можно использовать консенсус модели, объединяющие QSAR-модели, построенные как на одном определенном типе, так и на обоих типах дескрипторов (QNA или MNA). При этом незначительная разница между статистическими характеристиками моделей прогноза параметров pIC_{50} для обучающих выборок, построенных с использованием разных типов дескрипторов, свидетельствует об устойчивости создания данных моделей, табл.1. Как видно из данных табл. 1, применение консенсусного подхода к построению регрессионных уравнений, основанного на сочетании MNA- и QNA-дескрипторов, позволило получить модели M3 и M6, характеризующиеся высокими статистическими показателями и высокой точностью прогноза IC_{50} для структур ТВ. В пользу данного заключения свидетельствуют результаты, предсказанные консенсус моделью, в сравнении с экспериментальными величинами, которые приведены в табл. 1.

Дополнительно с помощью программы GUSAR проанализировано влияние природы атомов и содержащих их функциональных групп в соединениях выборки OB10 на эффективность ингибирования ими АХЭ. Анализ выполнен по модели M3, содержащей 36 ингибиторов АХЭ. Установлено, что на эффективность ингибирования АХЭ существенно влияет стерический фактор. Соединения с линейно конденсированными гетероароматическими циклами проявляют наибольшую ингибирующую активность в отношении АХЭ по сравнению с соединениями, которые содержат несколько моноциклических фрагментов.

Таблица 1. Статистические характеристики консенсусных моделей прогноза численных значений IC_{50} (моль/л) для ингибиторов ацетилхолинэстеразы

№ OB	№ модели	N	R^2_{OB}	$R^2_{ТВ}$	F	SD	Q^2	V	Диапазон активности в виде $lgIC_{50}$
OB1	M1*	36	0.888	-	29.540	0.282	0.793	7	0.60-4.46
OB1	M2**	36	0.977	-	114.445	0.130	0.950	9	0.60-4.46
OB1	M3***	36	0.963	-	66.652	0.173	0.913	8	0.60-4.46
OB2	M4*	24	0.912	0.314	27.362	0.218	0.785	5	1.51-4.46
OB2	M5**	24	0.980	0.626	91.721	0.109	0.959	7	1.51-4.46
OB2	M6***	24	0.975	0.559	73.815	0.125	0.938	6	1.51-4.46

N – число структур в обучающей выборке; R^2_{OB} – квадрат коэффициента регрессии, оцененный по результатам прогноза консенсус QSAR- моделью активности структур тех обучающих выборок, по которым построена данная модель;

$R_{\text{ТВ}}^2$ – квадрат коэффициента регрессии, оцененный по результатам прогноза консенсус QSAR- моделью активности структур тестовой выборки; Q^2 – коэффициент регрессии при скользящем контроле; F – критерий Фишера; SD- стандартное отклонение; V- число переменных в конечном регрессионном уравнении

* - построены на основе QNA-дескрипторов;

** - построены на основе MNA-дескрипторов;

*** - построены на основе сочетания QNA и MNA-дескрипторов.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта №4.299.2014/К, выполняемого в рамках проектной части государственного задания Минобрнауки РФ в сфере научной деятельности (проект 299, 2014 г.) и РФФИ (грант 14-04-97035).

Литература:

1. Khan M.S., Khan, Z.H. Molecular Modeling for Generation of Structural and Molecular Electronic Descriptors for QSAR Using Quantum Mechanical Semiempirical and ab initio Methods // Genome Informatics. 2003. Vol. 14. P. 486–487.

2. Филимонов Д.А., Поройков В.В. Прогноз спектра биологической активности органических соединений // Российский химический журнал. 2006. Т. 50. №2. С. 66–75.

3. Лагунин А.А., Глориозова Т.А., Дмитриев А.В., Волгина Н.Е., Поройков В.В. Компьютерная оценка взаимодействия фармакологических веществ с Р-гликопротеином // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. 2012. Т. 154. №10. С. 520–524.

4. Zakharov A.V., Lagunin A.A., Filimonov D.A., Poroikov V.V. Quantitative prediction of antitarget interaction profiles for chemical compounds // Chemical Research in Toxicology. 2012. Vol. 25. No. 11. P. 2378–2385.

5. Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я., Зарудий Ф.С. Анализ взаимосвязи «структура-ингибирующая активность циклооксигеназы-2» в ряду производных дитрет-бутилфенола, тиазолон и оксазолон // Вестник Башкирского университета. 2014. Т. 19. №2. С. 417-421.

© Хайруллина В.Р., Васильев М.Н., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С., Насртдинова Т.Р.¹, Зарудий Ф.С., 2015

ИК-ХАРАКТЕРИСТИКИ БИС- И РАЗНОЛИГАНДНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Ni(II)

Шагиева Л.С., Берестова Т.В.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

В настоящее время возрос интерес к хелатным соединениям биогенных элементов с органическими лигандами, проявляющим разные виды биологической активности. Особый интерес из таких комплексов представляют смешаннолигандные соединения металлов с витаминами и аминокислотами, которые представляют собой новые классы биологически активных соединений [1].

В данной работе приводятся ИК-характеристики полученных бис- и разнолигандных аминокислотных комплексов состава $[Ni(bL_1bL_2)]$ **1-4** (где bL — бидентантный лиганд, $bL_1, bL_2 = gly, L\text{-}ala, DL\text{-}val$) (Таблица).

Таблица Полосы поглощения функциональных групп **1-4**
в ИК-спектрах (cm^{-1})

Комплекс	Выход , %	Полосы поглощения функциональных групп			
		$\nu_{as}(COO^-)$	$\nu_s(COO^-)$	$\Delta\nu_{as,s}(COO^-)$	$\nu(-NH_2)$
глицин (glyH)	-	1608	1412	196	3125, 3180
валин ((DL)-valH)	-	1595	1418	177	3126
аланин ((L)-alaH)	-	1593	1410	183	3078
[Ni(L-ala) ₂] (1)	83	1574	1420	154	3186, 3209
[Ni(gly) ₂] (2)	74	1574	1404	170	3136, 3209
[Ni(gly)(DL-val)] (3)	88	1589	1408	181	3171, 3266
[Ni(gly)(L-ala)] (4)	79	1589	1412	177	3176, 3275

Установлено, что характеристические асимметричные валентные колебания $\nu_{as}(COO^-)$ аминокислотных комплексов $[Ni(bL_1bL_2)]$ **1-4** сдвинуты в более длинноволновую область, а симметричные $\nu_s(COO^-)$ - в коротковолновую по сравнению с аналогичными комплексами Cu(II) [2]. Пободные смещения полос поглощения комплексов **1-4** могут быть обусловлены как природой металла - комплексообразователя, так и структурой образующихся соединений.

Литература

- <http://earthpapers.net/sintez-smeshannoligandnyh/>
- Берестова Т.В., Амантаева Г.Ю., Кузина Л.Г., Аминова Н.А., Массалимов И.А. // *Вестник Башкирск. ун-та*, 2014, 19, № 4. С.1182.

© Шагиева Л.С., Берестова Т.В., 2015 г.

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА
ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА С МАЛЕИНОВЫМ
АНГИДРИДОМ**

Григорьев Игорь Владимирович, Мифтахов Эльдар Наилевич, Мустафина
Светлана Анатольевна
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г.Стерлитамак, Россия

В настоящее время одной из наиболее актуальных проблем при проведении экспериментальных исследований является проблема извлечения максимального количества полезной информации об исследуемом процессе при минимальных затратах. При решении производственных задач и недостаточном знании механизмов протекания процессов не всегда существует возможность выполнять достаточное количество требуемых экспериментов. Поэтому становится целесообразным построение математических моделей с использованием методов планирования эксперимента.

В работе построена математическая модель, основанная на кинетической схеме процесса полимеризации стирола с малеиновым ангидридом. Математическая модель представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, размерность которой стремится к бесконечности, ввиду бесконечного числа реакционных компонентов. Применяя метод статистических моментов, бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений сводится к системе с конечным числом уравнений и становится разрешимой. Численное решение конечной системы позволяет определить усредненные молекулярные характеристики, такие как среднечисленная и среднемассовая молекулярные массы и коэффициент полидисперсности.

Литература

1. Михайлова Т.А., Григорьев И.В., Мустафина С.А. Исследование синтеза бутадиен-стирольного сополимера на основе метода Монте-Карло с учетом распределения по времени пребывания // *Фундаментальные исследования*. 2015. № 5-3. С. 517-520.

© Григорьев И.В., Мифтахов Э.Н., Мустафина С.А., 2015 г.

УТОЧНЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ ОРЕГОНАТОРА

Икрамов Рустам Джамолович, Мустафина Светлана Анатольевна
Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г.Стерлитамак, Россия

Реакция Белоусова-Жаботинского является типичным примером колебательных реакций, моделированием и численным исследованием которой занимаются многие ученые, но до настоящего времени остается открытым вопрос разработки методов и алгоритмов решения обратных задач поиска и уточнения кинетических параметров реакции. Ее математический вид представляет собой жесткую систему дифференциальных уравнений с большим числом обусловленности.

Обратная задача состоит в определении параметров k_i на основе экспериментальных данных концентраций, участвующих в реакции веществ. Тогда функционал критерия поиска кинетических констант примет вид:

$$\sum_{k=1}^W \sum_{i=1}^N \left(\frac{x_{ki}^p - x_{ki}^e}{x_{ki}^e} \right) \rightarrow \min, \quad (1)$$

где W – количество экспериментов, N – количество наблюдаемых веществ.

При решении обратной задачи поиска кинетических параметров в модели Орегонатора были найдены значения констант скоростей k_1, k_3, k_5 . Результаты численного поиска представлены в таблице 1. Эталонные значения кинетических констант приведены в работе [1].

Таблица 1. Результаты численного поиска кинетических констант

	k_1	k_3	k_5
Эталон	1.34	8000	0.5
Численный поиск	1.3	8130	0.57

Литература

[1] Икрамов Р.Д., Мустафина С.А. Численное исследование моделей Орегонатора с использованием двухстадийного метода Розенброка с комплексными коэффициентами // Информационные технологии моделирования и управления, 2014. №3, 87. С. 211-217.

СЕКЦИЯ «ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»

УДК 661.183. 544.732.212

ОСОБЕННОСТИ РЕОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ РАСТВОРОВ СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В СМЕСЯХ ЭТАНОЛ-ВОДА

Аллаяров И.Р., Тухватуллин Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Биосовместимые полимерные гидрогели с заданным комплексом свойств на основе полимеров природного происхождения (например, хитина, ХТЗ и его производных), обладающие биоразлагаемостью и отсутствием токсичности, могут быть использованы в качестве полимерных форм лекарственных средств с пролонгированным выходом фармакологически-активных веществ, ранозаживляющих покрытий и др.

О формировании геля в растворах полимеров можно судить по реологическим данным, например, по появлению предела текучести, или по наличию упругих характеристик у раствора полимера.

Известно, что ухудшение термодинамического качества растворителя по отношению к полимеру, вызванное различными причинами, должно приводить к возрастанию степени ассоциации макромолекул в растворе, так как контакты полимер–полимер становятся более вероятными, чем контакты полимер-растворитель. Следовательно, от водных и водно-этанольных растворов производного ХТЗ – натриевой соли сукцинамида хитозана (СХТЗ) - можно ожидать различную структурную организацию и вид флуктуационной сетки зацеплений макромолекул полимера, что не может ни сказаться на ряде свойств формируемых систем.

Установлено, что растворы СХТЗ в смешанном растворителе этанол:вода характеризуются существенным повышением динамической вязкости полимеров во всём диапазоне изученных концентраций, которое тем большее, чем выше содержание в них спирта и полимера. Причинами пророста вязкости могут быть, во-первых, процессы структурообразования полимера в растворе, а во-вторых, повышение вязкости спиртосодержащих растворов СХТЗ и, в-третьих, обусловлено и свойствами самого растворителя, структурные ассоциаты которого в концентрированных растворах полимера образуют макрокластеры, существенно повышающие начальную вязкость системы, тем более динамическая вязкость смешанного растворителя этанол:вода в два раза - от 1.0 до 2.0 мПа•с - повышается при увеличении содержания спирта до 30%. Но, оказалось, что относительная вязкость растворов, отражающая вклад полимера в суммарную вязкость, повышается при введении спирта. Следовательно, повышение вязкости спиртосодержащих растворов СХТЗ обусловлено как свойствами самого растворителя, так и образованием флуктуационной сетки зацеплений макромолекул полимера.

© Аллаяров И.Р., 2015

УДК 54.057

СИНТЕЗ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА С УЧАСТИЕМ *O*-ИМИНОХИНОНОВ И *O*-ИМИНОСЕМИХИНОНОВ ОЛОВА(IV)*

Ваганова Л.Б.¹, Лизякина О.С.¹, Чегерев М.Г.²,
Пискунов А.В.^{1,2}, Гришин Д.Ф.¹

¹ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

² ИМХ РАН им. Г.А. Разуваева, Нижний Новгород

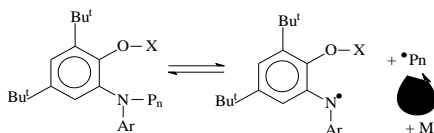
Цель работы - изучение и сравнительный анализ процессов радикальной полимеризации метилметакрилата (ММА) с участием комплексов олова(IV) **1-2**, и соответствующих редокс-активных лигандов в свободном состоянии *o*-иминохинонов **3а-в**.

Показано, что при 70-90°C введение соединений **1-2** позволяет пофрагментарно наращивать молекулярную массу (ММ) полиММА. В случае **1а-в** коэффициенты полидисперсности (КП) увеличиваются от 1.5 до 3.5, а для **2а-в** сохраняются в пределах 1.4-2.0.

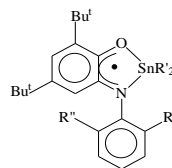
Согласно квантово-химическим расчетам, наиболее выгодным является присоединение макрорадикалов к комплексам **1-2** с разрывом связи олово-азот. Аналогичные диэфиры могут быть получены *in situ* и при использовании соединений **3а-в**. Действительно, при введении **3а-в** наблюдаются те же закономерности, что и при использовании **1-2**: пропорциональный рост ММ полимера и достаточно низкие значения КП (например, 1.4-1.7 для **3б**).

Подтверждено также, что полиММА, полученный при участии **1-3**, способен выступать макроинициатором. При добавлении новой порции мономера (ММА или стирола) наблюдается продолжение процесса полимеризации.

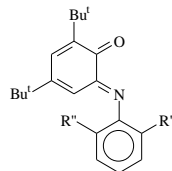
Общую схему обратимого взаимодействия **1-3** и макрорадикалов можно представить как:



где X = фрагмент SnR'₂Cl или олигомерный радикал,
Pn – растущий радикал,
Ar – арильный фрагмент, соответствующий **а-в**



R' = Bu^t (1),
Et (2);



3
R'' = Me (a),
Et (б), Prⁱ (в).

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14-03-31032мол_а)УДК 538.7 © Ваганова Л.Б., Лизякина О.С., Чегерев М.Г.,

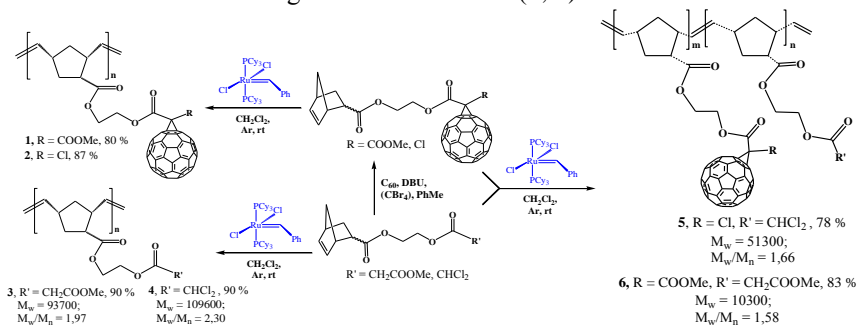
Пискунов А.В., Гришин Д.Ф., 2015

METATHESIS POLYMERIZATION OF NEW FULLERENE-CONTAINING NORBORNENES BY CATALYST GRUBBS 1'ST GENERATION

Biglova Yu.N., Zagitov V.V.

Bashkir State University, Ufa, Russia

The fullerene monomers was prepared by cycloaddition of malonic and dichloroacetic acid derivatives to C₆₀, purified by column chromatography, and characterized by ¹H, ¹³C - NMR, IR, UF- spectrum, mass spectrometry (MALDI-TOF). It is known that the metathesis of olefins, acetylenes, polyenes, etc. in intermolecular and intramolecular variants is widely applied in organic synthesis as well as polymer chemistry. New norbornenes with the covalently bonded fullerene C₆₀ have been prepared as monomers for ring-opening metathesis polymerization. Under the Grubbs 1'st generation catalyst these monomers smoothly enter homopolymerization as well as copolymerization reactions with the parent 'non-fullerene' monomers. The fullerene-containing polymers (**1**, **2**) are insoluble in typical organic solvents and are partially plumped at keeping in DMSO, so their the molecular weights were impossible to estimate. Whereas copolymers obtained by copolymerization in the ratio 1:1 of the norbornenes with their 'non-fullerene' analogues are well soluble (**5**, **6**).



References

1. Miftakhov M.S., Mikheev V.V., Torosyan S.A., Biglova Y.N., Gimalova F.A., Mustafin A.G. Fullerene containing norbornenes: synthesis and ring-opening metathesis polymerization // *Tetrahedron.*, 2014, V. 70, pp. 8040-8046.
2. Biglova Y.N., Mikheev V.V., Torosyan S.A., Biglova R.Z., Miftakhov M.S. Synthesis and ring-opening metathesis polymerization of fullerene-containing α , ω -bis-norbornenes // *Mendeleev Commun.*, 2015, V. 25, pp. 202-203.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant № 14-03-31610).

© Biglova Yu.N., 2015 г.

ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА С МИЦЕЛЛАМИ ЛИОФОБНЫХ ЗОЛЕЙ

Валиев Д.Р., Шарипова Э.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Сочетание уникальных свойств гидрофобных коллоидных неорганических частиц с комплексом свойств гидрофильной полимерной матрицы часто приводит к появлению новых характеристик и свойств материалов. Такие гибридные композиты могут быть использованы как в виде твердых объемных материалов и пленок, так и в виде растворов, которые могут быть применены для решения многих задач, в том числе косметологии и медицине. Для получения полимерных гибридных нанокомпозитных материалов с заданными свойствами все чаще используют способность макромолекул к самосборке, которая определяется как спонтанная межмолекулярная ассоциация через нековалентные связи (электростатические, водородные и др.), в результате чего образуются супрамолекулярные структуры с размерами от 10 нм до 10 мкм. Целью данной работы являлось изучение процесса самоорганизации водорастворимого производного хитозана – натриевой соли сукцинамида хитозана (СХТЗ) - в присутствии коллоидных частиц золя иодида серебра с применением реологических испытаний.

В работе использованы СХТЗ с $M_w = 207$ кДа и степенью замещения 75 % производства ЗАО «Биопрогресс» (Россия, г. Щёлково). Положительно заряженные мицеллы золя AgI получали по стандартной методике. смешением 0,01Н раствора нитрата серебра и 0,01Н раствора йодида калия в объемном соотношении 10:7 ($AgI-1$), отрицательно заряженные мицеллы золя - в объёмном соотношении 7:10 ($AgI-2$). Выбор полимера обусловлен комплексом его уникальных свойств, включающих антимикробную активность, совместимость с тканями организма и способность к биодеструкции [1,2]. Выбор золя иодида серебра связан с его бактерицидными свойствами [3].

Для получения дисперсий полимер-коллоидных комплексов СХТЗ с золем AgI использовали два способа. В первом, к раствору СХТЗ исходной концентрации добавляли золь AgI в различном объемном соотношении компонентов. При использовании второго способа навеска СХТЗ растворялась в заранее синтезированном золе в течении 24 часов.

Относительную и характеристическую вязкости разбавленных растворов СХТЗ и систем СХТЗ-золь AgI определяли помощью вискозиметра Уббелодде при температуре $T=25\pm 1^\circ$. С целью минимизации механического воздействия на образцы и сохранения их внутренней структура, реологические испытания более концентрированных растворов

СХТЗ и систем СХТЗ-золя AgI проводили на модульном динамическом реометре HaakeMarsIII в осцилляционном режиме при частоте 0,1-100 Гц при 25⁰С. Количественные исследования комплексов СХТЗ с мицеллами AgI проведены путём турбидиметрического титрования. Отметим, что при добавлении СХТЗ к AgI-1 происходит резкий рост оптической плотности, что свидетельствует об образовании нерастворимых комплексов. При добавлении золя AgI-2, визуальную мутность раствора не увеличивает, но имеет место некоторый рост значений оптической плотности полимер-коллоидной дисперсии. Это может свидетельствовать о наличии взаимодействия между полимером и неорганическими частицами золя.

Исследованы реологические свойства системы СХТЗ-золя AgI-2 и выявлено наличие неструктурированной области в разбавленных растворах. Увеличение концентрации полимера сопровождается структурированием раствора, вследствие появления дополнительной сетки, образованной полиэлектролитным комплексом между полимером и коллоидными частицами. Прочность этой системы несколько больше прочности сетки зацеплений исходного полимера, о чем свидетельствуют чуть большие значения энергии активации вязкого течения полимер-коллоидных дисперсий.

Таким образом, взаимодействие компонентов в системе СХТЗ-золя AgI-2 приводит к самоорганизации полимер-неорганической системы с формированием двойной сетки, узлами которой служат как коллоидные частицы золя иодида серебра, так и зацепления макромолекул. Сформированная полимер-коллоидная дисперсная система на основе мицелл иодида серебра и макромолекул СХТЗ, является, по сути, полимер-неорганическим нанокомпозитом, в котором макромолекулы СХТЗ образуют защитные экраны вокруг неорганических наночастиц.

Литература

1. Ильина А.В., Варламов В.П., Ермаков Ю.А., Орлов В.Н., Скрыбин К.Г. // Доклады академии наук. 2008. Т. 421. № 2. С. 199-201.
2. Сливкин А.И., Лапенко В.Л., Арзамасцев А.П. и др. // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2005. №2. С. 73.
3. Reynolds, J.E.F., Prasad, A.V. (eds.) Martindale -The Extra Pharmacopoeia. 28th ed. London: ThePharmaceuticalPress, 1982.p. 941
4. Литманович О.Е. // Высокомолекулярные соединения, Серия С. 2008. Т. 50. № 7. С.

©Валиев Д.Р., Шарипова Э.А., 2015

ГИДРОЛИЗ ХИТОЗАНА В АЦЕТАТНОМ БУФЕРЕ

Валиуллина И.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В качестве полимера-основы для медицинских материалов с низкой скоростью деструкции может быть использован хитозан (ХТЗ), получаемый путем частичного деацетилирования полимера природного происхождения хитина. Для биорезорбции данного полисахарида в организме человека нет специфических ферментов, и поэтому, скорость деструкции материалов на основе этого полимера в организме человека будет невысока. Ранее в работах [1, 2] был рассмотрен процесс ферментативной деструкции ХТЗ в растворе уксусной кислоты. Уксусная кислота часто используется, как, термодинамически хороший растворитель для ХТЗ, но, к сожалению, не отражает полностью реальные условия эксплуатации защитного пленочного материала на раневой поверхности. Поэтому очень важно изучить процесс ферментативной деструкции ХТЗ в растворе при рН близким к рН тех сред, при которых он потенциально может использоваться. В связи с этим, в данной работе был изучен процесс ферментативного гидролиза в ацетатном буфере с рН=4,8, в котором растворяется используемый нами образец ХТЗ.

В качестве объектов исследования использовали ХТЗ производства ЗАО «Биопрогресс» (Шелково, Россия) с молекулярной массой $M_{sd}=113000$, ферментный препарат – гиалуронидаза (торговое название «Лириза», производство ЗАО «Микроген», Москва, Россия). Величину рН растворов контролировали с помощью рН – метра АНИОН 4100. Концентрация ХТЗ в растворе при проведении процесса ферментативного гидролиза ($C_{фг}$) варьировалась от 0,1 до 5 г/дл. Характеристическую вязкость ХТЗ $[\eta]$ в растворе ацетатного буфера определяли в вискозиметре Уббелоде при $T=25\pm 0,1$ С. Значение начальной скорости ферментативного гидролиза V_0 , рассчитывали согласно формуле в [1].

Как показали результаты исследования проведение ферментативного гидролиза ХТЗ в растворе ацетатного буфера с рН=4,8 характеризуется более быстрым распадом ХТЗ, чем при проведении гидролиза в растворе уксусной кислоты. Полученный результат связан с повышением активности ферментного препарата при рН раствора, более близком к рН-оптимуму гиалуронидазы.

Литература

1. Е.И. Кулиш, И.Ф. Туктарова, В.В. Чернова // Перспективные материалы 2014 №6 с. 25-30
 2. Кулиш Е.И., Чернова В.В., Вильданова Р.Ф., Володина В.П., Колесов С.В. // Вестн. Башкир.универ. 2011.Т.16. № 2. С. 339.
- © Валиуллина И.И., 2015

ГИДРОГЕЛЕВЫЙ ДРЕНАЖ НА ОСНОВЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ И ХИТОЗАНА ДЛЯ КОНТРОЛИРУЕМОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Вильданова Р.Р.¹, Сигаева Н.Н.¹, Валиев Д.Р.²

¹*Уфимский институт химии РАН, г. Уфа, gip@anrb.ru*

²*Башкирский государственный университет, г. Уфа*

Создание биодegradуемого дренажа для контролируемой направленной доставки цитостатика митомицина С (ММС) в офтальмологии при антиглаукоматозных операциях является актуальной задачей на сегодняшний день. Особый интерес в этом смысле представляют гидрогели на основе природных полимеров – гиалуроновой кислоты и хитозана, обладающие широким спектром биологической активности и проявляющие высокую биосовместимость.

Для получения гидрогеля использовали диальдегид гиалуроновой кислоты и хитозан, модифицированный янтарным ангидридом, которые взаимодействуют с образованием связей в виде основания Шиффа.

Подобраны оптимальные условия для получения гидрогелей (ММ, степени модификации, концентрации, соотношения биополимеров). С помощью реологических исследований оценены вязкоупругие свойства полученных систем. Установлено, что с ростом ММ и концентрации модифицированного хитозана значения плотностей шивок увеличиваются, а размер ячеек полученных сеток уменьшаются.

Оценены гидродинамические свойства полученных гидрогелей путем исследования набухания их лиофилизированных образцов в дистиллированной воде. При введении ММС в гидрогель степень набухания уменьшается с ростом концентрации цитостатика.

При разработке лекарственной формы в виде гелей важным показателем является скорость выделения лекарственного препарата из геля, что моделируется его диффузией в физиологический раствор. Показано, что на кинетику выделения цитостатика оказывает влияние начальная концентрация ММС в гидрогеле, ММ модифицированного хитозана, порядок введения компонентов.

Таким образом, в результате проведенных исследований получены гидрогели на основе диальдегида гиалуроновой кислоты и модифицированного янтарным ангидридом хитозана. Гидрогели отличаются своими реологическими и транспортными свойствами, что позволяет использовать их в различных ситуациях, в соответствии с предъявляемыми требованиями.

© Вильданова Р.Р., Сигаева Н.Н., Валиев Д.Р., 2015

**ФЕРМЕНТАТИВНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ
СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В ПРИСУТСТВИИ
НЕОРГАНИЧЕСКОГО ЗОЛЯ ЙОДИДА СЕРЕБРА**

Гарифуллина М.Р.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Одним из наиболее перспективным и быстро развивающимся направлением в современной медицине является разработка систем с контролируемой доставкой лекарственных средств. В качестве полимерной основы в таких системах можно использовать водорастворимое производное хитозана – сукцинамид хитозана (СХТЗ), а в качестве коллоидного раствора – золь йодида серебра, обладающего бактерицидным действием. При этом необходимо учесть, что введение золя может сказаться на важнейшей характеристике полимера – его биодеструкции. Целью настоящей работы стало изучение ферментативной деструкции СХТЗ в растворе в присутствии отрицательно заряженного золя йодида серебра.

В качестве объектов исследования использовали: СХТЗ степень замещения 75 %, производства ЗАО «Биопрогресс» (Щелково, Россия), ферментный препарат – гиалуронидаза (производство ЗАО «Микроген», Москва, Россия). Раствор полимера с ферментативным препаратом выдерживали в течение определенного времени при температуре $36 \pm 0.1^\circ\text{C}$, после чего процесс останавливали кипячением исходного раствора в течение 30 минут на водяной бане. Характеристическую вязкость полимеров определяли с помощью вискозиметра Убеллоде при температуре $T = 25 \pm 1^\circ\text{C}$ и рассчитывали, используя метод Баранова. Отрицательно заряженные мицеллы золя AgI получали по стандартной методике смешением 0,01N раствора нитрата серебра и 0,01N раствора йодида калия. Степень агрегации определяли как тангенс угла наклона в зависимости удельной вязкости от концентрации полимера в двойных логарифмических координатах.

Как показала проведенная работа, введение в раствор полимера неорганического золя приводит к уменьшению значений характеристической вязкости и увеличению степени агрегации полимера в растворе. При этом под действием гиалуронидазы вязкость СХТЗ в растворе без золя AgI за 120 мин действия фермента падает на 33%, а в присутствии мицелл – на 22%. Данный факт можно объяснить уменьшением доступности звеньев СХТЗ для взаимодействия с ферментом при введении в раствор заряженных коллоидных частиц, поскольку имеет место увеличение степени агрегации полимера.

© Гарифуллина М.Р., 2015 г.

УДК 661.183.544.732.212

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОГЕННЫХ И НЕИОНОГЕННЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ С МИЦЕЛЛАМИ ЗОЛЯ ЙОДИДА СЕРЕБРА

Гимаева Ф.Р., Мустакимов Р.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В качестве средств направленной доставки лекарственных веществ пролонгированного действия часто используются наноразмерные системы на основе природных и синтетических биodeградируемых биосовместимых полимеров, в том числе хитозана (ХТЗ) и его производных, поливинилпирролидона (ПВП), поливинилового спирта (ПВС) и др.

Одним из подходов при создании стабильных наноструктурированных систем с регулируемыми размерами является использование способности макромолекул к самосборке путем межмолекулярной ассоциации через нековалентные связи – на примере полимер-коллоидных комплексов (ПКК) ХТЗ и его водорастворимого производного - натриевой соли сукцинамида хитозана (СХТЗ), ПВП, ПВС с неорганическими коллоидными частицами лиофобных зольей. В связи с этим, представляется целесообразным определение влияния природы полимерного протектора (полиэлектролитов ХТЗ и СХТЗ, неионогенных ПВП и ПВС) на механизм взаимодействия с отрицательно и положительно заряженными мицеллами зольей йодида серебра при получении полимер-коллоидных дисперсий в водных средах. Установлено, что в случае полиэлектролитов, наряду со специфической адсорбцией, значительный вклад в образование ПКК вносит электростатическое взаимодействие ионизированных функциональных групп полимера (ХТЗ, СХТЗ) с противоположно-заряженными частицами зольей йодида серебра. В случае неионогенных полимеров (ПВП, ПВС) стабилизация мицелл зольей происходит, в основном, за счёт специфической адсорбции, и, возможно, гидрофобного взаимодействия, и, в случае наличия электронодонорных заместителей в основной цепи полимера – слабое электростатическое или донорно-акцепторное взаимодействие полимера с мицеллами AgI-1.

Предложенный подход получения ПКК на основе водорастворимых полимеров и заряженных частиц зольей йодида серебра интересен тем, что сочетание уникальных свойств гидрофобных коллоидных неорганических частиц с комплексом свойств гидрофильной полимерной матрицы часто приводит к появлению новых характеристик и свойств материалов. Такие гибридные композиционные материалы могут быть использованы как в виде твердых материалов или пленок, так и в виде растворов, которые могут быть с успехом применены для решения многих задач, в том числе, задач косметологии и медицины.

© Гимаева Ф.Р., 2015

МАТЕРИАЛЫ ИЗ ВТОРИЧНОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ДЛЯ УДАЛЕНИЯ ИОНОВ СВИНЦА ИЗ ВОДЫ

Громько Н.В., Ямансарова Э.Т., Зворыгина О.Б., Куковинец О.С.,
Абдуллин М.И.,

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Продукты переработки возобновляемого сырья могут служить основой для получения сорбционных материалов по отношению к различным экотоксикантам. Ранее нами было изучены свойства материалов, полученных из подсолнечной лузги и шелухи гречихи, по отношению к ионам железа (II, III), марганца (II) и меди (II). Целью настоящей работы являлось изучение сорбционной способности материалов по отношению к ионам свинца, которые попадают в водоемы и грунтовые воды вместе с промышленными стоками, из атмосферы и в результате хозяйственной деятельности. Материалы получали на основе лузги подсолнечника и шелухи гречихи, как описано в [1]. Сорбционную активность образцов по отношению к ионам свинца определяли фотоколориметрически по реакции с диэтилдитиокарбаматом натрия (табл.).

Таблица.

Эффективность сорбции ионов свинца различными сорбентами

Сорбент		Эффективность сорбции E, %
Лузга подсолнечника	Кислотно-щелочная обработка	75,7
	Низкотемпературная обработка	51,6
Шелуха гречихи	Кислотно-щелочная обработка	62,1
	Низкотемпературная обработка	54,4
Фильтр марки «Аквафор» *		72,5
Уголь активированный марки БАУ *		57,3

*товарные материалы взяты для сравнения сорбционной способности

Установлено, что все материалы обладают удовлетворительной поглотительной способностью по отношению к ионам свинца. Наиболее эффективным сорбентом в данном ряду является кислотно-щелочная лузга подсолнечника, имеющая характеристики, сравнимые с активированным углем марки БАУ.

Литература:

1. Ямансарова Э.Т., Громько Н.В., Хасанова Д.Н., Абдуллин М.И. Перспектива применения сорбционных материалов для улучшения экологического состояния водных ресурсов//Научный журнал НИУ ИТМО Экономика и экологический менеджмент, №1, 2015, С. 325-334

© Громько Н.В., 2015 г.

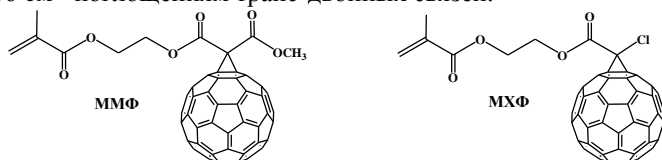
РАДИКАЛЬНАЯ ГОМОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ФУЛЛЕРЕНСОДЕРЖАЩИХ МЕТАКРИЛАТОВ С ВИНИЛОВЫМИ МОНОМЕРАМИ

Загитов В.В., Биглова Ю.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Научная литература достаточно полно представлена примерами синтеза низкомолекулярных функционализированных производных C_{60} . Сведения об участии фуллеренсодержащих мономеров (мет)акрилового ряда в процессах радикальной полимеризации практически отсутствуют.

Максимальное содержание молекул C_{60} в каждом полимерном звене достигается в случае полимеризации заранее синтезированных фуллеренсодержащих мономеров. Поэтому предварительно синтезированные нами мономеры были вовлечены в реакции гомополимеризации. Согласно экспериментальным данным, за 50 часов конверсия метакриловых мономеров составила 35-45 %. Вследствие высокой реакционной способности ядра C_{60} по отношению к радикалам, свободно-радикальная полимеризация ММФ и МХФ привела к нерастворимым в типовых органических растворителях продуктам. Наблюдаемое следует объяснить формированием сетчатых структур из-за вовлечения в радикальный каскад фуллеренового кора. ИК-спектры полученных полимеров ММФ и МХФ содержат сигналы в области 528, 574, 1167 cm^{-1} соответствующие фуллереновому ядру, 1741 cm^{-1} – карбонильной группе и 966 cm^{-1} поглощениям транс-двойных связей.



Доказано, что включение молекулы C_{60} в состав полимеров существенно ухудшает их растворимость. Тем не менее именно «сшитые» фуллеренсодержащие высокомолекулярные соединения зачастую обладают уникальным комплексом физико-механических свойств и находят все большее применение в качестве буферных слоев в органической фотовольтаике, как, например, это было нами показано в работах [1, 2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-03-31610 мол_а).

Литература

1. Yulia N. Biglova, Azat F. Akbulatov, Seda A. Torosyan, Diana K. Susarova, Akhat G. Mustafin, Mansur S. Miftakhov // *Physica B*, 458 (2015) 114–116.
2. Yuliya N. Biglova, Diana K. Susarova, Azat F. Akbulatov, Akhat G. Mustafin, Pavel A. Troshin, Mansur S. Miftakhov // *Mendeleev Communications*, 2015, vol. 25, № 5, p. 348-349.

© Загитов В.В., 2015 г.

УДК 665.765 519.673

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОТОРНОГО МАСЛА НА ОСНОВЕ СВОЙСТВ БАЗОВЫХ МАСЕЛ

Загитов В.В., Базунов А.А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время все большее число прикладных задач можно решить средствами программирования и моделирования.

Технологический процесс смешивания базовых масел для получения моторного масла с заданными физико-химическими свойствами (процесс компаундирования) был затронут нами для моделирования.

Практически все физико-химические свойства базовых масел являются аддитивными величинами, либо их можно свести к таковым после математических преобразований. Главная трудность заключается в подборе необходимого состава базовых масел. Количество комбинаций, необходимых для перебора составляет значительное число. И, хотя, для персонального компьютера, а тем более кластера, это не составит больших затруднений, расчет может потребовать значительных временных ресурсов.

Наиболее точным вариантом решения поставленной задачи был выбран метод на основе вложенных циклов. Реализован был с помощью языка программирования C++, в среде разработки Microsoft Visual 2013. Программа перебирала все возможные комбинации смешения семи базовых масел и загустителя (комбинации составлялись на основе процентного состава, с точностью в 1 %; для простоты было введено допущение, что содержание загустителя влияет лишь на вязкость). Целью работы программы было обнаружение составов, удовлетворяющих поставленным условиям.

Программой было перебрано 17981982356 комбинаций (определено программными средствами для поставленных целей, при условии содержания загустителя не более 15%). Персональным компьютером на основе центрального процессора Intel Core i7 4820K, данная задача решалась 19 мин 21,132 сек, при использовании процессора на 13%.

В результате работы было отмечено, что избранный метод решения поставленной задачи является достаточно точным, просто реализуемым, однако имеет ряд минусов, таких как значительное время выполнения. Однако он может служить проверочным этапом для работы более прогрессивных алгоритмов.

Литература

Лафоре Р. Объектно-ориентированное программирование в C++. Классика Computer Science. 40-е изд. – СПб.: Питер, 2012. – 928с.: ил.

© Загитов В.В., 2015

УДК 541.64:536

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЕКТИНА С НЕКОТОРЫМИ АНТИБИОТИКАМИ

Курзова В.В., Шуршина А.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Перспективными биополимерами являются пектины. Пектиновые вещества способны сорбировать и прочно удерживать различные соединения. Это свойство пектина наряду с биоактивными возможностями обуславливает применение пектина в комбинации со многими лекарственными препаратами в качестве вспомогательного, гелеобразующего и стабилизирующего вещества. Это послужило основанием для применения пектина в качестве носителя для лекарственных форм с пролонгированным действием. При создании таких систем немаловажным является изучение взаимодействия между полимером и лекарственным веществом. Поэтому целью данной работы явилось изучение взаимодействия между пектином (ПК) и антибиотиками – амикацином (АМС) и цефазолином (ЦФЗ). Для изучения взаимодействия ПК с АМС и ЦФЗ были исследованы УФ-спектры индивидуальных соединений, а также их смесей на спектрофотометре "UV- VIS Specord M - 40" в области 220-350 нм. Согласно данным УФ-спектрофотометрии при добавлении в водные растворы АМС и ЦФЗ пектина интенсивность полос поглощения АМС и ЦФЗ изменяется и незначительно сдвигается в длинноволновую область, что свидетельствует о равновесном образовании аддуктов. Вычисленные методом мольных отношений значения констант устойчивости показывают, что ПК с АМС и ЦФЗ образует аддукты средней устойчивости. Из полученных результатов следует, что наиболее устойчивые аддукты наблюдаются для соединений на основе ПК и ЦФЗ. Были рассчитаны термодинамические характеристики процесса. Согласно полученным данным, во-первых, процесс взаимодействия пектина с АМС и ЦФЗ протекает самопроизвольно, происходит с выделением тепла и идет в направлении образования продуктов реакции, поскольку значения ΔH и $\Delta G < 0$. Во-вторых, из значений изменения энтальпии реакции следует, что наиболее прочная связь между компонентами системы наблюдается в случае аддукта ПК-ЦФЗ, что коррелирует с вычисленными константами устойчивости. В-третьих, для аддукта ПК-АМС значение $\Delta S > 0$, что свидетельствует о том, что процесс идет в направлении увеличения неупорядоченности системы (а повседневный опыт показывает, что это наиболее вероятный процесс). В случае же аддукта ПК-ЦФЗ $\Delta S < 0$, что, вероятно, связано со значительным упорядочиванием в результате организации молекул ПК и ЦФЗ в аддукте.

© Курзова В.В., Шуршина А.С., 2015

УДК 54.057

ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫЕ *o*-ИМИНОХИНОНЫ В КАЧЕСТВЕ РЕГУЛЯТОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ В СИНТЕЗЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА*

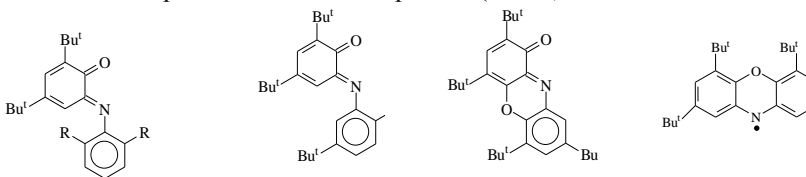
Лизякина О.С.¹, Ваганова Л.Б.¹, Черевев М.Г.²,

Пискунов А.В.^{1,2}, Гришин Д.Ф.¹.

¹ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород

² ИМХ РАН им. Г.А. Разуваева, Нижний Новгород *oksana.94.02@mail.ru*

Целью работы явилось изучение влияния состава и структуры *o*-иминохинонов **1-5** на их регулируемую способность в процессах радикальной полимеризации метилметакрилата (*ММА*).



R=Me (**1**), Et (**2**), Prⁱ (**3**)

4

5

6

Установлено, что **1-3** позволяют провести синтез полиММА в режиме обратимого ингибирования. В случае **2-3** удается не только пофрагментарно наращивать молекулярную массу (*ММ*), но и сохранять коэффициенты полидисперсности ~ 1.4-1.8. Малая эффективность **1** и снижение выходов полиММА с ростом концентрации **2-3** связаны, очевидно, с побочными реакциями циклизации и дальнейшей конденсации *o*-иминохинонов [1] с промежуточным образованием феноксазинильных производных. Синтез полиММА с участием соединений **4-6** это подтверждает.

Так, для **4** характерен период индукции, наличие гель-эффекта и снижение выхода полиММА до 70%. Кривые молекулярно-массового распределения полиММА бимодальны, а вклад высокомолекулярной моды по ходу процесса увеличивается. Высокая ингибирующая способность **5** (предельная конверсия ММА ~ 25-30%), и пофрагментарный рост ММ полиММА при введении свободного радикала **6** указывают на протекание нескольких реакций обратимого и необратимого акцептирования макрорадикалов с участием **4** и его производных. Таким образом, эффективность *o*-иминохинонов в роли регуляторов роста макромолекул определяется не только их составом, но и структурой.

Литература:

[1] Мищенко О.Г. и др. // Журн. общ. хим., 2014, Т.84, №4, С.562-566.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №14-03-31032мол_а)

ИЗУЧЕНИЕ РАСТВОРОВ ХИТОЗАНА И СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В ПРИСУТСТВИИ ЗОЛЕЙ ЙОДИДА СЕРЕБРА

Миниахметова С.Р., Чернова В.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В настоящее время одним из перспективных направлений в области поиска новых материалов для медицины становится изучение и внедрение в практику гибридных полимер-неорганических материалов. В качестве полимерной основы можно предложить аминополисахарид хитозан (ХТЗ) и его производное сукцинамид хитозана (СХТЗ), а в качестве внедренной неорганической составляющей – отрицательно заряженные золи AgI, потенциалопределяющие ионы которого обладают антибактериальными свойствами. Однако, введение в раствор полиэлектролитов, к коим относятся ХТЗ и СХТЗ, заряженных неорганических частиц, может привести к изменению его характеристик, например, вязкостных, вызванных изменением в структуре раствора, что, в свою очередь, может отразиться на физико-механических характеристиках изделия. Таким образом, целью наших исследований стало вискозиметрическое изучение растворов индивидуальных ХТЗ и СХТЗ, а также их полимер-коллоидных золей (ПКЗ).

В качестве объектов исследования использовали ХТЗ со степенью деацетилирования 82% (растворитель – 1% уксусная кислота), СХТЗ со степенью замещения 75 % (растворитель – дистиллированная вода), а так же отрицательно заряженный золь, полученный по стандартной методике смешением 0,01Н раствора AgNO₃ и 0,01Н раствора KI в объёмном соотношении 7:10, 5:10 и 3:10. Для ПКЗ СХТЗ, навеску полимера растворяли в течение суток в предварительно приготовленном золе. Для получения ПКЗ ХТЗ навеска в течение суток набухала в растворе золя, после чего добавлялась ледяная уксусная кислота в количестве, необходимом для приготовления раствора уксусной кислоты с концентрацией 1% масс. Характеристическую вязкость $[\eta]$ полимеров определяли при температуре $T=25\pm 1^\circ\text{C}$ и рассчитывали, используя метод Баранова, по тангенсу наклона начальной зависимости логарифма относительной вязкости от концентрации. Степень агрегации (δ) определяли как тангенс угла наклона в зависимости удельной вязкости от концентрации полимера в двойных логарифмических координатах. Если $\delta=1$ – раствор представлен индивидуальными клубками макромолекул, если $\delta>1$ – раствор агрегирован. В ходе исследований установлено, что введение в растворы ХТЗ и СХТЗ заряженных неорганических частиц (золей иодида серебра) сопровождается протеканием агрегационных процессов и уменьшению значений характеристической вязкости полимеров.

© Миниахметова С.Р., Чернова В.В., 2015

МОДИФИКАЦИЯ В ТУРБУЛЕНТНЫХ ПОТОКАХ ТИТАНОВЫХ И НЕОДИМОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ СИНТЕЗА ПОЛИИЗОПРЕНА

Мухамадеева З.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основная доля получаемого полиизопрена является продуктом растворной полимеризации изопрена в присутствии микрогетерогенных титановых и неодимовых каталитических систем типа Циглера-Натта, характеризующихся высокой стереоспецифичностью (до 98 % 1,4-цис-звеньев). Ввиду микрогетерогенности указанных катализаторов существует возможность воздействия на закономерности полимеризации и молекулярные характеристики получаемых продуктов за счет изменения дисперсного состава каталитически активных частиц. В соответствии с этим широко распространен способ модификации каталитической системы добавками диенов, способствующих диспергированию частиц катализатора и увеличению его активности. Воздействовать на поверхностную структуру катализатора можно так же за счет изменения гидродинамического режима в зоне реакции, главным образом, до начала полимеризации, когда в реакционной смеси содержится небольшое количество полимера. Как следствие, представляется актуальным изучение закономерностей формирования каталитической системы, особенностей полимеризации изопрена и молекулярных характеристик синтезируемых полимеров при модификации титановых и неодимовых катализаторов в турбулентных потоках.

Проведены исследования полимеризации изопрена в присутствии и фракций титанового катализатора, сформированных при различных условиях, и неодимового катализатора, полученного на основе изопропанольных комплексов хлорида неодима с определенным диаметром частиц и содержанием спирта.

В работе использовались два метода смешения микрогетерогенных катализаторов и их компонентов. Метод 1: реактор для полимеризации в токе аргона вводили раствор мономера(ов), а затем компоненты катализатора или отдельно приготовленный катализатор. Перемешивание реакционной смеси проводили на протяжении всего синтеза. Этот метод является типичным подходом к проведению стереоспецифической полимеризации 1,3-диенов в лабораторных и промышленных условиях. Метод 2: предварительное смешение компонентов катализатора или отдельно приготовленного катализатора с раствором мономера (ов) проводили в трубчатом турбулентном реакторе диффузор-конфузорной конструкции в течении 2-3с.

© Мухамадеева З.В., 2015

**ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛА ИОНИЗАЦИИ И СРОДСТВА К
ЭЛЕКТРОНУ ДЛЯ РЯДА МОЛЕКУЛ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩИХ СОБОЙ
ПРОИЗВОДНЫЕ ФТАЛЕВОГО АНГИДРИДА**

Никитина Д.В.

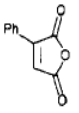

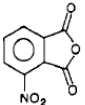

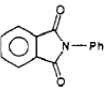
Башкирский государственный педагогический университет им. М.
Акмуллы, г. Уфа, Россия

Потенциал ионизации (IP) и сродство к электрону (EA) являются одними из важнейших фундаментальных характеристик электронной структуры молекул. Эти энергетические характеристики определяют донорно-акцепторные свойства молекул, ширину расщепления между высшей занятой и низшей вакантной молекулярной орбиталями, а так же реакционную способность химических соединений.

Сродство к электрону это способность некоторых нейтральных атомов, молекул и свободных радикалов присоединять добавочные электроны, превращаясь в отрицательные ионы. Потенциал ионизации, в свою очередь, это минимальная разность потенциалов, которую должен пройти электрон в ускоряющем электрическом поле, чтобы приобрести кинетическую энергию, достаточную для ионизации частицы.

В качестве объекта нашего исследования выступает ряд из двадцати молекул, являющихся производными фталевого ангидрида. Фталевый ангидрид обладает свойствами ароматических соединений. Легко реагирует с фенолами и их производными. Фталевый ангидрид имеет широкое потребление в промышленности пластмасс и лакокрасочных материалов. Помимо этого на его основе производят различные лекарственные препараты, добавки для авиационного топлива, инсектициды и т.д.

Ниже нами представлены рассчитанные значения EA и IP методом теории функционала плотности в приближении B3LYP/6-31G(d). Помимо рассчитанных значений приведены экспериментальные значения сродства к электрону, полученные методом спектроскопии проходящих электронов. В данной таблице указаны пять соединений гомологического ряда. IP_a - рассчитанное значение адиабатического потенциала ионизации. ϵ_{HOMO} - энергия верхней занятой молекулярной орбитали. EAa - рассчитанное значение адиабатического сродства к электрону. EA - экспериментальное значение сродства к электрону. ϵ_{LUMO} - энергия нижней вакантной молекулярной орбитали.

№	Соединение	IP _a , эВ	- ε _{НОМО} , эВ	EAa, эВ	EA, эВ	-ε _{LUMO} , эВ
1		8,82	7,10	1,45	1,69	3,10
2		9,72	7,97	1,74	1,89	2,88
3		9,58	8,17	0,81	1,13	3,32
4		7,99	6,48	0,80	1,16	2,73
5		7,74	6,39	0,84	1,18	2,27

Сравнивая рассчитанные значения сродства к электрону с экспериментальными значениями, полученными методом спектроскопии проходящих электронов, мы получили наилучшую корреляцию, составляющую примерно 98% (в случае вычисления сродства к электрону через разность полных энергий нейтральной молекулы и анион-радикала).

Полученные результаты позволяют утверждать, что адиабатические потенциал ионизации и сродство к электрону для данного ряда молекул могут быть с приемлемой точностью оценены с помощью метода теории функционала плотности в приближении B3LYP/6-31G(d).

Литература

1. Гуревич, Д.А. Фталевый ангидрид./ Д. А. Гуревич, М.: Химия, 1968. – 10 – 15 с.
2. Dreizler, R. Gross, E. Density Functional Theory. – Plenum Press, New York, 2011. – 85 с.

© Никитина Д.В., 2015 г.

Hopfenberg- Hixson-Crowell model

Rikhter N.A., Timerbaeva D.A.

Bashkir State University, Ufa, Russia

Among all drug delivery systems, oral drug delivery is the most preferred route for administration for various drugs. Recently, pharmaceutical research has focused on controlled drug delivery offer definite advantages over conventional release formulation of the same drug. Controlled delivery systems that can provide zero-order drug delivery have the potential for maximizing efficacy while minimizing dose frequency and toxicity. Systems such as multilayered tablets and other geometrically altered devices have been created to perform this function. The multi-layered matrix system overcomes inherent disadvantages of non-linearity associated with diffusion controlled matrix devices by providing additional release surface with time to compensate for the decreasing release rate. This technology also demonstrates a wide flexibility for various applications. Polymeric materials play an important role in the functioning of these systems. Hydrophilic polymers are mainly used for preparation of matrix type controlled delivery systems. The mathematical models used to determine the kinetics of drug release from drug delivery systems. The quantitative analysis of the values obtained in dissolution/release rates is easier when mathematical formulae are used to describe the process. Hopfenberg developed a mathematical model to correlate the drug release from surface eroding polymers so long as the surface area remains constant during the degradation process. The cumulative fraction of drug released at time t was described as: $M_t / M_\infty = 1 - [1 - k_0 t / CL a]^n$ where k_0 is the zero order rate constant describing the polymer degradation (surface erosion) process, CL is the initial drug loading through out the system, a is the systems half thickness (i.e. the radius for a sphere or cylinder), and n is an exponent that varies with geometry $n = 1, 2$ and 3 for slab (flat), cylindrical and spherical geometry, respectively. Application: This model is used to identify the mechanism of release from the optimized oil-spheres using data derived from the composite profile, which essentially displayed site-specific biphasic release kinetics. Hixson and Crowell recognized that the particles regular area is proportional to the cube root of its volume. They derived the equation: $W_0^{1/3} - n W_t^{1/3} = \kappa t$ where W_0 is the initial amount of drug in the pharmaceutical dosage form, W_t is the remaining amount of drug in the pharmaceutical dosage form at time t and κ (kappa) is a constant incorporating the surface volume relation. The equation describes the release from systems where there is a change in surface area and diameter of particles or tablets. To study the release kinetics, data obtained from in vitro drug release studies were plotted as cube root of drug percentage remaining in matrix versus time. Application: This expression applies to pharmaceutical dosage form such as tablets, where the dissolution occurs in planes that are parallel to the drug

surface if the tablet dimensions diminish proportionally, in such a manner that the initial geometrical form keeps constant all the time.

© Rikhter N.A., Timerbaeva D.A., 2015

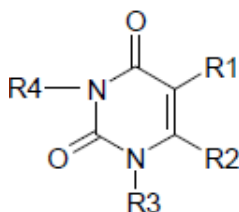
УДК 541.64+547.854

НЕКОТОРЫЕ УРАЦИЛЫ В КАЧЕСТВЕ СТАБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

Рязанов К.С., Габитов И.Т., Мустафин А.Г., Ахметханов Р.М.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для некоторых урацилов, в частности, 5-гидрокси-6-метилурацила и 6-метилурацила выявлена антиокислительная активность в реакциях радикально-цепного окисления изопропанола и 1,4-диоксана [1,2]. В этой связи представляет научный и практический интерес изучение ингибирующей эффективности урацилов при термодеструкции жесткого и пластифицированного поливинилхлорида.

В качестве объектов исследования использовались урацилы следующей общей формулы:



где $R_2=CH_3$, $R_1=R_3=R_4=H$ – 6-метилурацил (I); $R_1=OH$, $R_2=CH_3$, $R_3=R_4=H$ – 5-гидрокси-6-метилурацил (II); $R_1=OH$, $R_2=R_4=CH_3$, $R_3=H$ – 5-гидрокси- 3,6-диметилурацил (III); $R_1=OH$, $R_2=R_3=R_4=CH_3$, $R_3=H$ – 5-гидрокси-1,3,6- триметилурацил (IV).

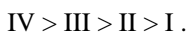
В условиях термической деструкции все урацилы незначительно ингибируют процесс дегидрохлорирования полимера. Ингибирующее действие урацилов при термораспаде ПВХ возможно связано с протондонорными свойствами урацилов, а именно с наличием подвижных атомов водорода в гидроксильной группе и при атомах азота. Известно, что протондонорные соединения, в частности, стеароилбензоилметан, бензойная кислота являются стабилизаторами ПВХ

Введение урацилов в ПВХ в условиях термоокислительной деструкции приводит к заметному снижению скорости дегидрохлорирования полимера. Максимальное снижение скорости элиминирования HCl наблюдается при содержании урацилов 0,1 мас.ч./мас.ч. ПВХ.

Еще большим ингибирующим действием обладают изученные урацилы при термоокислительной деструкции ПВХ, пластифицированного диоктилфталатом.

Как и в случае термоокислительной деструкции жесткого ПВХ зависимость скорости дегидрохлорирования ПВХ от содержания добавок имеет экстремальный характер. Максимальное снижение скорости термоокислительного распада полимера наблюдается при введении урацилов 0,1 мас.ч./100 масс.ч. ПВХ. Дальнейшее увеличение содержания урацилов приводит к повышению скорости элиминирования хлористого водорода.

По ингибирующей эффективности в отношении термоокислительного дегидрохлорирования жесткого и пластифицированного ПВХ урацилы располагаются в ряд:



Механизм ингибирования процесса термоокислительного дегидрохлорирования пластифицированного ПВХ в присутствии урацилов заключается в защите ингибирующей добавки окислительного распада пластификатора, а стабильный пластификатор, в свою очередь, в результате "сольватационной стабилизации" замедляет распад полимера – известный эффект "эхо-стабилизации".

Ингибирующее действие урацилов при распаде ПВХ также показано по показателю «время термостабильности» полимерной ПВХ-композиции дополнительно содержащей металлосодержащий акцептор HCl.

Литература:

1. Герчиков А.Я., Гарифуллина Г.Г., Султанаева И.В. и др. // Химико-фармацевтический журнал. 2000. Т. 34. №10. С. 28-30.
2. Якупова Л.Р., Салахутдинова Р.А., Панкратьев Е.Ю., Сафиуллин Р.Л. //Кинетика и катализ. 2012. Т.53 №6. С.708-715.

© Рязанов К.С., Габитов И.Т., Мустафин А.Г., Ахметханов Р.М., 2015

УДК 541.64

KINETIC MODELING ON DRUG RELEASE FROM CONTROLLED DRUG DELIVERY SYSTEMS

Timerbaeva D.A., Rikhter N.A.

Bashkir State University, Ufa, Russia

Over the past few decades, significant medical advances have been made in the area of drug delivery with the development of controlled release dosage forms. There are large variety of formulations devoted to oral controlled drug release, and also the varied physical properties that influence drug release from these formulations. The release patterns can be divided into those that release drug at a slow zero or first order rate and those that provide an initial rapid dose, followed by slow zero or first order release of sustained component. The purpose of the controlled release systems is to maintain drug concentration in the blood or in target tissues at a desired value as long as possible. In other words, they are able to exert a control on the drug release rate and duration. For this purpose, generally, controlled release system initially release part of the dose contained in order to attain rapidly the effective therapeutic concentration of the drug. Then, drug release kinetics follows a well defined behavior in order to supply the maintenance dose enabling the attainment of the desired drug concentration. In the light of wide versatility of application of controlled release formulations, in the field of medical sciences, they are unavoidable tools for the exploitation of the modern concept of therapeutic treatment whose aim is to increase drug effectiveness and patient compliance, to reduce the administration frequency and side effects connected to dosing. As a matter of fact, controlled release formulations bring engineers and pharmacists to work together with the common aim of realizing more and more effective products. For this purpose, the use of mathematical modeling turns out to be very useful as this approach enables, in the best case, the prediction of release kinetics before the release systems are realized. More often, it allows the measurement of some important physical parameters, such as the drug diffusion coefficient and resorting to model fitting on experimental release data. Thus, mathematical modeling, whose development requires the comprehension of all the phenomena affecting drug release kinetics, has a very important value in the process optimization of such formulation. The model can be simply thought as a mathematical metaphor of some aspects of reality that, in this case, identifies with the ensemble of phenomena ruling release kinetics. For this generality, mathematical modeling is widely employed in different disciplines such as genetics, medicine, psychology, biology, economy and obviously engineering and technology.

© Timerbaeva D.A., Rikhter N.A., 2015

СТАБИЛИЗАЦИЯ ЗОЛЕЙ ЙОДИДА СЕРЕБРА АМФИФИЛЬНЫМИ СОПОЛИМЕРАМИ НА ОСНОВЕ МЕТИЛАКРИЛАТА И ХИТОЗАНА

Шарипова Э.А., Жукова А.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Привитые сополимеры на основе блоков гидрофильных полисахаридов, в т.ч. хитозана (ХТЗ) и его производных, и синтетических мономеров гидрофобных полимеров, например, метилакрилата (МА), представляют собой перспективные биоразлагаемые функциональные материалы, сочетающие свойства синтетических и природных полимеров. Одним из направлений использования гидрофобно-модифицированных полисахаридов может быть стабилизация мицелл лиофобных золей. Известно, что устойчивость лиофобных золей можно часто повысить добавлением макромолекулярного материала, который адсорбируется на поверхности частиц. Лучшими протекторами являются блок-сополимеры, которые имеют лиофобную часть (якорную группу), которая прочно связывает макромолекулу с поверхностью частицы, и лиофильный хвост, который свободно размещается в дисперсионной среде. Если возникает агрегация частиц, то она будет ослабляться и становиться легко обратимой (флокуляция) благодаря адсорбированным макромолекулам протектора, которые способствуют разделению частиц.

В связи с этим, исследована стабильность и определены реологические характеристики дисперсий сополимеров ХТЗ-МА, полученных ранее на кафедре ВМС и ОХТ БашГУ, с отрицательно-заряженными мицеллами лиофобного золя йодида серебра. Установлено, что добавление полимерного протектора увеличивает агрегативную и седиментационную устойчивость золя за счёт специфической адсорбции сополимера на поверхности коллоидных частиц, и, возможно, за счёт гидрофобного взаимодействия. Также существенно повышается динамическая вязкость системы, что свидетельствует о процессах структурирования.

Таблица 1. Динамическая вязкость, Па*с, растворов ХТЗ, сополимера ХТЗ с МА (степень прививки 23,2%) и системы сополимер ХТЗ-МА – золь AgI (концентрация полимера 1%)

Система	η , Па*с
Исходный ХТЗ	0,01±0,001
Сополимер ХТЗ:МА	0,39±0,04
Исходный ХТЗ – золь AgI	0,10±0,01
Сополимер ХТЗ:МА – золь AgI	13,00±1,30

© Шарипова Э.А., 2015

СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 574.4:1.1

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА ДВУХФАЗНУЮ ЭКСТРАКЦИЮ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Зворыгина О.Б.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно, что рутин из травы гречихи посевной промышленный способом извлекают 70%-ным этанолом. Перспективным направлением в этой области является двухфазная экстракция, которая практически не изучена. Она позволяет извлекать комплекс флавоноидов. Ранее нами было показано, что без облучения ультразвуком наибольшее количество флавоноидов из зеленой массы гречихи экстрагируется при использовании смеси 70%-ного этанола и хлороформа в течение 180 минут. В данной работе изучали влияние ультразвука на полноту выделения флавоноидов из зеленой массы гречихи при использовании двухфазной системы экстрагентов. Экстракцию проводили смесью взаимно нерастворимых растворителей разной полярности, где гидрофильной фазой являлся этанол (табл.). В качестве гидрофобных растворителей использовали хлороформ, бензол, гексан. Генерирование ультразвука осуществляли на приборе «Ультразвуковой генератор И10-1.5» (рабочая частота 22 КГц, насадка – цилиндрический волновод). Выход экстракта определяли гравиметрически, содержание флавоноидов определяли фотоколориметрически по реакции образования комплекса с хлористым алюминием в пересчете на рутин.

Таблица. Зависимость выхода биологически активных веществ от природы гидрофобной фазы при ультразвуковом облучении

Гидрофобная фаза	Выход экстракта, %	Выход флавоноидов, %
хлороформ	0.4	9.35
бензол	1.6	24.39
гексан	1.4	20.59
без гидрофобн.	3	20.02

*Гидрофильная фаза – 70% этанол, время облучения – 2 мин., соотношение сырье : растворитель 1:30.

Установлено, что облучение ультразвуком позволяет повысить содержание флавоноидов с 9 до 25% и в 100 раз сократить время обработки по сравнению с традиционным методом экстракции. Оказалось, что в этих условиях наибольший выход экстракта из зеленой массы гречихи получается при использовании смеси 70% этанол – бензол (1:1).

© Апаева А.В., 2015 г.

УДК 547.7 (655.644.245)

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСХОДОВАНИЯ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДА В ПРИСУТСТВИИ МОЛИБДЕНОВОЙ И ВОЛЬФРАМОВОЙ КИСЛОТ

Борисов И. М.¹, Газизова З.Ш.¹, Фазрахманов И.С.², Клецкова Д.И.²

1. Башкирский государственный педагогический университет им. М.

Акмуллы, г. Уфа, Россия

2. Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Окислительные системы « $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{MoO}_4$ » и « $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H}_2\text{WO}_4$ » способны окислять нефтяные сульфиды до сульфоксидов. В сульфоксидах сера имеет промежуточную степень окисления и поэтому возможно дальнейшее окисление до сульфонов. В настоящей работе изучены кинетические закономерности расходования пероксида водорода в реакции окисления модельного соединения – диметилсульфоксида.

Скорость расходования пероксида водорода в реакции окисления диметилсульфоксида (ДМСО) в присутствии H_2MoO_4 или H_2WO_4 убывает во времени, а кинетические кривые линеаризуются в координатах уравнения

$$\ln [\text{H}_2\text{O}_2]_t = \ln[\text{H}_2\text{O}_2]_0 - k^*t \quad (1);$$

где $[\text{H}_2\text{O}_2]_0$ и $[\text{H}_2\text{O}_2]_t$ – начальная и текущая концентрации пероксида водорода;

k^* – экспериментально определяемая константа скорости расходования H_2O_2 по тангенсу угла наклона трансформаций кинетических кривых в координатах уравнения (1).

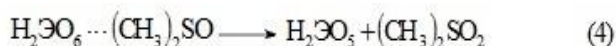
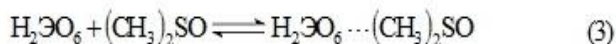
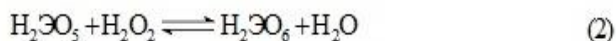
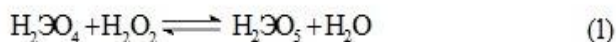
Скорость реакции зависит от концентрации исходного субстрата, пероксида водорода и катализатора.

В ходе работы были вычислены эффективные константы скорости расходования пероксида водорода при 353К.

Катализатор	$k_{\text{эф}}, \text{л}^3 \times \text{моль}^{-3} \times \text{с}^{-1}$
H_2MoO_4	1.11 ± 0.6
H_2WO_4	$(1.0 \pm 0.1) \times 10^{-2}$

Из сопоставления значений $k_{\text{эф}}$ следует, что каталитическая активность H_2MoO_4 выше по сравнению H_2WO_4 .

Полученные экспериментальные результаты можно объяснить на основе следующей схемы



При растворении H_2MoO_4 или H_2WO_4 в растворе H_2O_2 в течение 30 минут перед опытом образуются пероксокислота, а затем дипероксокислота в равновесных стадиях. В ходе опыта дипероксокислота с диметилсульфоксидом равновесно образует комплекс, из которого далее образуются сульфон и пероксокислота. Образующаяся пероксокислота вновь вовлекается в каталитический цикл окислительных превращений ДМСО.

Вероятнее всего, реакция окисления ДМСО лимитируется стадией (4) и поэтому скорость процесса зависит от концентрации комплекса

Литература

1. Борисов, И.М., Газизова З.Ш., Шаяхметова Г.Р., Файзрахманов И.С. // Нефтехимия. 2015. Т.55. №2. С. 1-5.
2. Борисов, И.М., Газизова З.Ш., Шаяхметова Г.Р., Файзрахманов И.С. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2014. Т. 57. № 10. С. 41 – 43.
3. Борисов, И.М., Газизова З.Ш., Шаяхметова Г.Р., Файзрахманов И.С. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2014. Т. 57. № 12. С. 34 – 37.
4. Иванов В.Г., Чиркунов Э.В., Латыпов Р.Ш., Харлампики Х.Э. // Журнал общей химии. 1997. Т. 67. № 3. С. 434 – 437.
5. Шарипов А.Х., Масагутов Р.М., Файзрахманов И.С., Сулейманова З.А. // Нефтехимия. 1990. Т.29. №4. С. 551-555.
6. Антоновский В. Л., Бузланова М.М. Аналитическая химия органических пероксидных соединений. М.: Химия, 1978. 309 с.

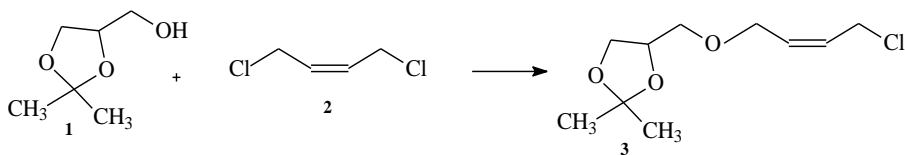
© Борисов И. М., Газизова З.Ш., Фазрахманов И.С., Клецкова Д.И., 2015

АЛКИЛИРОВАНИЕ 1,3-ДИОКСАЦИКЛОАЛКАНОВ ЦИС-1,4-ДИХЛОРБУТЕНОМ-2

Борисова Ю.Г., Мавлеткулова Р.Р., Андреева М.Д., Раскильдина Г.З.
Уфимский Государственный Нефтяной Технический Университет, г. Уфа,
Россия

Соединения класса циклических ацеталей в настоящее время остаются предметом интенсивных исследований, что обусловлено их широким использованием в тонком органическом синтезе [1].

Нами было выполнено алкилирование 2,2-диметил-4-оксиметил-1,3-диоксалана **1** *цис*-1,4-дихлорбутеном-2 **2** с применением толуола и 50%-ного раствора щелочи, в качестве катализатора был использован промышленно доступный катамин АВ при температуре 30°C [2].



Образование простого эфира **3** происходит за 7 часов с выходом более 80% и селективностью = 90%.

Количественный анализ реакционной массы проводили методом газожидкостной хроматографии. Идентификацию продуктов осуществляли методами хроматомасс-спектрометрии, ^1H и ^{13}C -ЯМР-спектроскопии.

Исследования выполнены в рамках программы фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере «У.М.Н.И.К – 2015-2016 г.» (Участник молодёжного научно-инновационного конкурса).

Литература

1. Казакова А.Н. Синтезы простых эфиров, кеталей, аминов и дихлоралкениларенов на основе замещенных галогенметил-гем-дихлорциклопропанов: дис. ... канд. хим. наук. – Уфа. – 2009. – 131 с.

2. Гиниатуллина Э.Х. Реакции *о*-алкилирования и *о*-ацилирования на основе гидроксид-1,3-диоксациклоалканов. Дис... канд. хим. наук. – Уфа. – 2010. – 101 с.

© Борисова Ю.Г., Мавлеткулова Р.Р., Андреева М.Д., Раскильдина Г.З., 2015

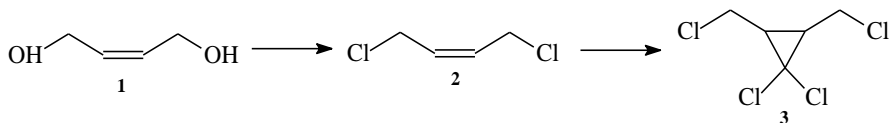
УДК 547.464.7

ЦИКЛОПРОПАНИРОВАНИЕ *ЦИС*-1,4-ДИХЛОРБУТЕНА-2

Борисова Ю.Г., Мавлеткулова Р.Р., Андреева М.Д., Раскильдина Г.З.
Уфимский Государственный Нефтяной Технический Университет, г. Уфа,
Россия

Одним из перспективных направлений современной органической химии является химия замещенных циклопропанов, которые могут являться основой для синтеза биологически активных веществ [1].

Нами было выполнено циклопропанирование *цис*-1,4-дихлорбутена-2 по методу Макоши с применением хлороформа и 50%-ного раствора щелочи, в качестве катализатора был использован промышленно доступный катамин АВ.



Исходный *цис*-1,4-дихлорбутен-2 **2** был синтезирован из *цис*-1,4-бутендиола-2 **1** по реакции спирта с хлористым тионилем в пиридине при температуре 50°C по ранее известной методике [2].

Образование *цис*-1,4-дихлорбутена-2 из соответствующего диола происходит за 8 часов с выходом более 90% и селективностью = 100%.

2,3-Бис(хлорметил)-*гем*-дихлорциклопропан **3** был синтезирован путем циклоприсоединения карбена к молекуле *цис*-1,4-дихлорбутена-2 за 12 ч с выходом равным 93% и селективностью 97%.

Количественный анализ реакционной массы проводили методом газожидкостной хроматографии. Идентификацию продуктов осуществляли методами хроматомасс-спектрометрии, ¹H и ¹³C-ЯМР-спектроскопии.

Исследования выполнены в рамках программы фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере «У.М.Н.И.К – 2015-2016 г.» (Участник молодёжного научно-инновационного конкурса).

Литература

1. Богомазова А.А., Михайлова Н.Н., Злотский С.С. Успехи химии гем-дихлорциклопропанов. Саамбрюккен: LAPLAMBERD Academic Publishing, 2011, С.-8
2. Гиниатуллина Э.Х. Реакции *о*-алкилирования и *о*-ацилирования на основе гидроксид-1,3-диоксациклоалканов. Дис... канд. хим. наук. – Уфа. – 2010. – 101 с.

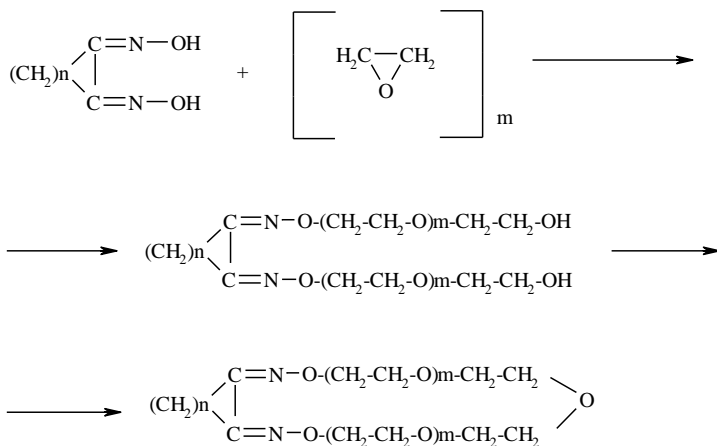
КРАУН-ЭФИРЫ НА ОСНОВЕ АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ ДИОКСИМОВ

Будагова Р.Н., Зейналов С.Б., Ходжаев Г.Х.

*Институт Катализа и Неорганической Химии им.акад. М.Нагиева
НАН., г. Баку, Азербайджан, e-mail: rahila.budagova@mail.ru*

Несмотря на большое разнообразие макроциклических полиэфиров, синтез новых краун-эфиров с комплексом полезных свойств представляет не только теоретический, но и практический интерес, поскольку они успешно применяются при решении прикладных задач в металлургии, электрохимии, межфазном катализе, тонком органическом синтезе, экологии, медицине и агрономии. Макроциклические полиэфиры обладают способностью образовывать координационные соединения с катионами металлов в кристаллическом виде и в растворе.

В литературе [1-3] отсутствуют данные о синтезе краун-эфиров на основе оксимов. Ранее нами были синтезированы краун-эфиры на основе циклических кетонов: циклопентанона и циклогексанона [4]. Разработан способ получения новых краун-эфиров реакцией поликонденсации диоксимов с оксидом этилена. В качестве исходных диоксимов использовали циклогександиондиоксим-1,2 и циклогептандиондиоксим-1,2. Реакцию проводили в среде диэтилового эфира при температуре 0-20°C при постоянном добавлении избытка оксида этилена. Продолжительность реакции 10-12 часов. Реакция поликонденсации диоксимов с оксидом этилена в присутствии эфирата трефтортористого бора протекает по следующей схеме:



Поскольку в реакции внутримолекулярной циклизации участвуют бифункциональные исходные вещества, всегда возможна конкуренция со стороны реакций поликонденсации, приводящих к образованию олигомеров. Могут протекать также побочные процессы, связанные с конденсацией образовавшегося макроцикла с исходными веществами. В ходе получения кислородсодержащегося макроциклического соединения могут происходить и другие побочные процессы, непосредственно не связанные с реакцией циклизации. Такие процессы имеют узкоспецифический характер и связаны лишь со свойствами исходных веществ, а именно реакции олигомеризации оксида этилена и перегруппировка диоксимов по Бекману, полупродуктов или продуктов данной конкретной реакции. Добавление темплатного агента щелочного металла позволяет получить соединение, которое без такой добавки не образуется или образуется с более низким выходом.

Наиболее универсальным темплатным агентом для синтеза азотсодержащих макроциклов являются ионы щелочных металлов. Определенное влияние на выход продукта в реакциях темплатного синтеза оказывает природа аниона. При замене NaOH на NaOMe выход полученных краун-эфиров увеличивается в 2 раза (38-56% от теоретического). Это можно объяснить повышением нуклеофильности аниона, что облегчает превращение OH-группы в исходном полиэтиленгликоле в алколят ион. Структуры синтезированных соединений доказаны ЯМР-, ИК- и масс-спектроскопией. Краун-эфиры, получаемые темплатным методом, проявляют выраженную способность к комплексообразованию и поэтому могут быть использованы в межфазном катализе и аналитической химии в качестве экстрагентов металлов.

Литература:

1. Хираока М. Краун-соединения. М.: Мир, 1986, с.345
2. Яцимирский К.Б., Кольгинский А.Г., Павлищук В.В., Таланова Г.Г., Синтез макроциклических соединений Киев. Наукова Думка. 1987, с.277
3. Богатский А.В. Достижения и новые тенденции в химии синтетических макроциклических комплексов. // Биоорганическая химия-1986, 9, №11, с. 1445-1482.
4. Зейналов С.Б. Spiro-краун-эфиры- новый класс органических соединений. Деп. рук в ВИНТИ 03.07.2008, №575, В.2008.

© Будагова Р.Н., Зейналов С.Б., Ходжаев Г.Х., 2015

УДК 544.022; 541.1; 547.022

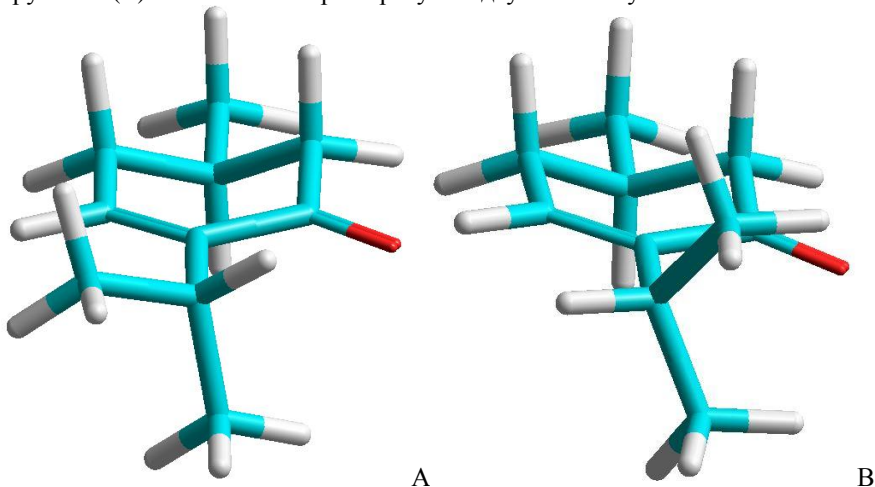
НЕОБЫЧНОЕ КОНФОРМАЦИОННОЕ СТРОЕНИЕ (R)-4-МЕНТЕНОНА

Вакулин И.В.¹, Белкина Н.А.,¹ Латыпова Э.Р.¹, Вакулина А.И.²,
Биктимерова Р.Г.¹

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия
²УЭРГУ, г. Екатеринбург, Россия

Методами квантовой химии в приближениях M2/6-31G(d,p) и B3LYP/6-31G(d,p) изучены особенности конформационного строения (R)-4-ментенона и их влияние на реакционную способность последнего.

Показано, что зависимость энергии от угла вращения изопропильной группы в (R)-4-ментеноне характеризуется двумя минимумами:



Особенностью строения конформера (А) является синперипланарное расположение одной из метильных групп относительно двойной связи. Фактически данная конформация является заслоненной. При этом другая метильная группа экранирует одну из сторон плоскости двойной связи. Такое строение конформера, хорошо объясняет стереоселективное протекание реакций 1,4-нуклеофильного присоединения магний и литийорганических соединений к (R)-4-ментенону.

Важно отметить, что по данным спектров ЯМР H^1 высокого разрешения, снятых при различных температурах именно конформация (А) является наиболее устойчивой. Наличие сигналов в спектре соответствующих конформеру В не обнаружено.

© Вакулин И.В., Белкина Н.А., Латыпова Э.Р., Вакулина А.И.,
Биктимерова Р.Г., 2015

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АЛКЕНОВ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ МАННИХА

Валеева Э.С., Вакулин И.В., Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф.
ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет», г.Уфа, Россия

Из-за практической ценности аминов разработка новых способов аминирования органических соединений является актуальной задачей. Одним из перспективных методов введения аминогруппы является аминотетилирование алкенов. Однако круг последних, вовлеченных в данную реакцию, ограничен. Одним из подходов к увеличению числа реакционноспособных алкенов является исследование индексов реакционной способности квантово-химическими методами [1].

Нами проведена оценка реакционной способности ряда алкенов на основе следующих параметров:

$$P = \left| \frac{\varphi_{max} - \varphi_{min}}{\varphi_{min}} \right| \cdot 100\%$$

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.

$$O = \left| \frac{k_{max} - k_{min}}{k_{min}} \right| \cdot 100\%$$



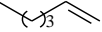

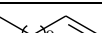
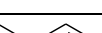

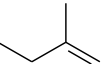
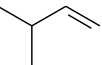
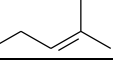
где k_{max} – это коэффициент (в процентах), характеризующий участие атомной орбитали атома углерода двойной связи, в образовании π -связи, а k_{min} – это коэффициент (в процентах), характеризующий участие атомной орбитали соседнего атома углерода по двойной связи.

В результате MP2 расчетов для алкенов, вовлекаемых, согласно литературным данным, в реакцию аминотетилирования в условиях реакции Манниха, параметр O был выбран в качестве параметра, наиболее достоверно описывающего реакционную способность. Согласно полученным ранее расчетным значениям, для алкенов, участвующих в реакции аминотетилирования, значение O_{NBO} должно быть $\geq 2,4$. Для алкенов, инертных в этой реакции, значение O_{NBO} должно быть 1,98 и меньше. Полученные значения параметра O для алкенов (1-7) подтверждают предыдущие результаты [1]. Параметры P_{NBO} (величины зарядов на атомах углерода, образующих двойную связь) и Q_{NBO} (заселенность валентных

орбиталей этих атомов) не могут быть использованы, т.к. некорректно описывают реакционную способность алкенов в реакции присоединения аминотимильного катиона по кратной связи.

Результаты расчетов реакционной способности алкенов приведены в таблице:

Характеристики двойной связи алкенов, рассчитанные с помощью NBO-анализа (MP2)

№	Алкен	P	Q	O	Выход продуктов реакции суммарный
1		6	52	6.4	38 [2]
2		5.9	65	6,1	21 [2]
3		6.4	52.5	6,44	36 [2]
4		6.4	52.4	6,57	15 [2]
5		6.44	52.6	6,6	37 [2]
6		6.48	6.55	6.65	37 [2]
7		1.56	7.9	12,1	70 [2]
прогноз					
8				13,7	
9				5,97	
10				6,95	

На основании полученных данных проведен прогноз реакционной способности ряда алкенов (8-10). Значение параметра O позволяют ожидать возможность вовлечения их в реакцию аминотимильрования. Для соединений (8-10) планируется экспериментальная проверка возможности вовлечения в реакцию аминотимильрования.

Литература

1. Шепелевич И.С, Пташко Е.Ю, Вакулин И.В, Тимофеев В.П, Талипов Р.Ф. Башкирский химический журнал. 2007. Том 14. №1. 134-136.
2. Cohen T, Onopchenko A. J. Org. Chem. 1983. V48. №24. 4531-4537.

© Валеева Э.С., Вакулин И.В., Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф., 2015

СИНТЕЗ N-БЕНЗИЛ-1-(2,2-ДИХЛОРОЦИКЛОПРОПИЛ)-МЕТИЛАМИНА

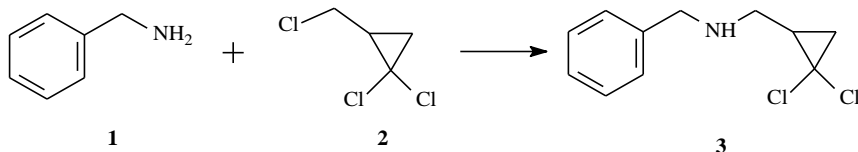
Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Миракян С.М., Раскильдина Г.З.

ФГБОУ ВПО «Уфимский Государственный Нефтяной

Технический Университет», г. Уфа, Россия

Амины, содержащие гем-дихлорциклопропановый фрагмент, широко используются в органическом синтезе и находят применение в различных областях науки и техники. Оказалось, что подобные соединения, содержащие аминокильные группы, имеют ряд преимуществ при использовании в качестве ингибиторов, ПАВ и флотореагентов [1, 2].

Нами предложен синтез N-бензил-1-(2,2-дихлорциклопропил)-метиламина **3**, основанный на N-алкилировании бензиламина **1** 2-хлорметил-гем-дихлорциклопропаном **2**.



Исходный реагент 2-хлорметил-гем-дихлорциклопропан **2** был получен по ранее известной методике [3]. В результате проведенного исследования установлено, что бензиламин **1** легко N-алкилируется 2-хлорметил-гем-дихлорциклопропаном **2** в среде ДМСО при температуре 75°C. Синтез проводился в течение 6 часов. Выход целевого продукта **3** составил более 85%. Количественный анализ реакционной массы осуществляли методом газожидкостной хроматографии. Идентификацию продукта осуществляли методами хроматомасс-спектрометрии, ¹H и ¹³C-ЯМР-спектроскопии.

Исследования выполнены при поддержке Президента РФ (стипендия Президента РФ молодым ученым и аспирантам СП-1960.2015.4 на 2015-2017 гг., приказ от 10 марта 2015 г. № 184).

Литература:

1. Insaif S.S., Witiak D.T. // *Synthesis*. – 1999. – № 3. – С. 435-440.
2. Костиков Р.Р., Варакин Г.С., Молчанов А.П., Оглоблин К.А. // *Журнал органической химии*. – 1996. – Т.32. – №.3. – С. 367-371.
3. Казакова А.Н., Тимофеева С.А., Юмакаева Ю.М., Хайруллина А.Ф., Злотский С.С. // *Башкирский химический журнал* – 2010. – Т.17. – №. 4. – С. 19-23.

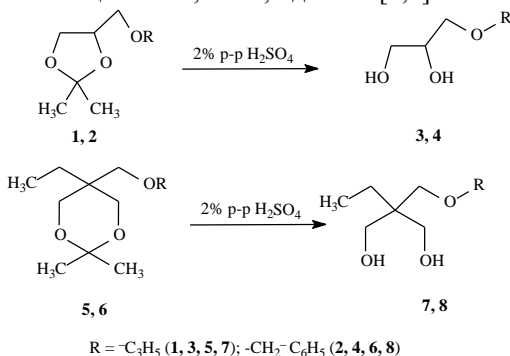
© Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Миракян С.М., Раскильдина Г.З., 2015

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ
ОБРАЗОВАНИЯ 1,2- И 1,3-ДИОЛОВ КАТАЛИТИЧЕСКИМ
РАЩЕПЛЕНИЕМ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
ЦИКЛИЧЕСКИХ ЭФИРОВ**

Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Мукминов Ф.Х., Раскильдина Г.З.
ФГБОУ ВПО «Уфимский Государственный Нефтяной
Технический Университет», г. Уфа, Россия

1,2- и 1,3-диолы, содержащие функциональные группы широко используются в синтезе биологически активных и лекарственных препаратов [1,2].

Ранее было исследовано кислотнo-катализируемое расщепление 2,2-диметил-4-алкилоксиметил-1,3-диоксаланов и 2,2-диметил-5-этил-5-алкилоксиметил-1,3-диоксанов 2%-ным водным раствором серной кислоты по ранее предложенной методике, протекающей с образованием соответствующих замещённых 1,2- и 1,3-диолов [3,4].

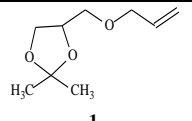
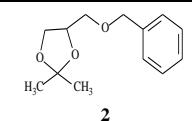
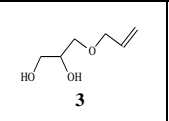
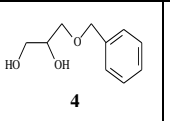
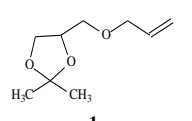
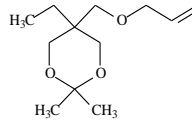
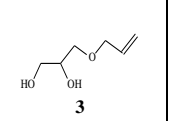
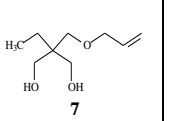
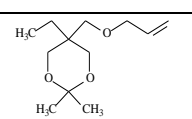
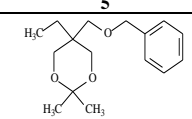
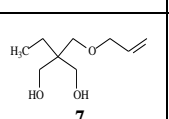
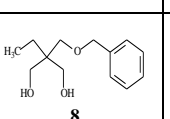


В данной работе была определена относительная активность образования 1,2- и 1,3-диолов каталитическим расщеплением полифункциональных циклических эфиров (табл. 1).

Полученные данные показывают, что деацетализация диоксоланов протекает несколько лучше, чем диоксанов. Также расщепление эфира с аллильным фрагментом пройдет быстрее, нежели расщепление соответствующего эфира с бензильным фрагментом.

Таблица 1.

Относительная реакционная способность полифункциональных циклических эфиров при расщеплении 2%-ным водным раствором серной кислоты ($t = 60^{\circ}\text{C}$; эквимолекулярное соотношение реагентов).

Исходные соединения		Продукты реакции		Относительная активность, A/B
A	B			
 1	 2	 3	 4	3/1
 1	 5	 3	 7	2/1
 5	 6	 7	 8	2/1

Исследования выполнены при поддержке Президента РФ (стипендия Президента РФ молодым ученым и аспирантам СП-1960.2015.4 на 2015-2017 гг., приказ от 10 марта 2015 г. № 184).

Литература

- Jennifer L. Gage and Bruce P. Branchaud. // J. Org. Chem. – 1996.– V. 61. – P. 831
- Yong Xu, Lian Qian and other. // Tetrahedron.– 2004.– V. 60.– P. 43.
- Мунасыпов Д.Н., Злотский С.С. // Башкирский химический журнал.– 2006.– Т. 13, №4.– С.5.
- Валиев В.Ф., Раскильдина Г.З., Мудрик Т.П., Богомазова А.А., Злотский С.С. // Башкирский химический журнал.– 2014.– Т. 21, №3.– С.25.

© Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Мукминов Ф.Х., Раскильдина Г.З., 2015

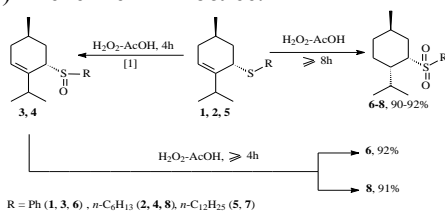
НЕТРИВИАЛЬНАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ 3-МЕНТЕНОВЫХ СУЛЬФИДОВ В МЕНТАНОВЫЕ СУЛЬФОНЫ

Ишмуратов Г.Ю., Вакулин И.В., Тухватшин В.С., Горских В.А.,
Исламова Г.И., Талипов Р.Ф.

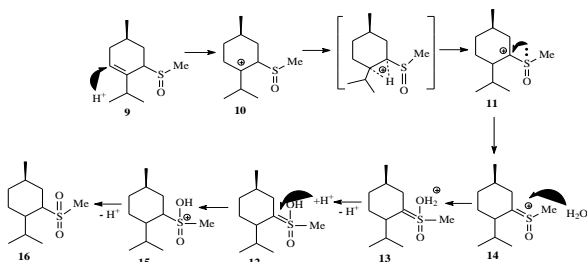
ФГБУН Уфимский институт химии РАН

ФГБОУ ВПО Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Известно [1], что сульфиды (**1**, **2**) окислением H_2O_2 в $AcOH$ в течение 4 ч превращаются в сульфоксиды (**3**, **4**). Нами показано, что при увеличении продолжительности реакции окисления сульфидов (**1**, **2**, **5**) тем же реагентом до 8 ч и более наблюдается образование ментановых сульфонов (**6-8**). Кроме того, сульфоны (**6-8**) получены при выдерживании в той же системе сульфоксидов (**3**, **4**) в течение 4 ч и более.



Была предложена и квантово-химически обоснована [метод ВЗЛҮР/6-31G(d,p)] возможная схема трансформации сульфоксидов (**3**, **4**) в сульфоны (**6**, **8**).



Предложенная схема подтверждена рядом экспериментов. Так, перемешивание сульфоксида (**3**) в системах $H_2SO_4-H_2O-AcOH$ или $H_2O-AcOH$, действительно, ведет к образованию сульфона (**6**). Следует отметить, что окисление циклогексенил- или вербенилфенилсульфидов H_2O_2 в $AcOH$ в течение 8 ч не приводит к образованию соответствующих насыщенных сульфонов.

1. Г.Ю. Ишмуратов и др. Тиilirование (*R*)-4-ментен-3-она и его производных // *Химия природ. соед.*, 2013, Т. 5, сс.743-748.

© Ишмуратов Г.Ю., Вакулин И.В., Тухватшин В.С.,
Горских В.А., Исламова Г.И., Талипов Р.Ф., 2015

УДК 547.7 (655.644.245)

ОКИСЛЕНИЕ НЕФТЯНЫХ СУЛЬФИДОВ ПЕРОКСИДОМ ВОДОРОДА КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ОКСИДОМ МОЛИБДЕНА

Клецкова Д.И.¹, Борисов И.М.², Файзрахманов И.С.¹, Газизова З.Ш.²

1. Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

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

Катализируемое пероксидное окисление нефтяных сульфоксидов происходит в условиях межфазного катализа, а именно, сульфоны образуются в мицеллах обратных эмульсий. Скорость накопления сульфонов будет зависеть от количества образовавшихся мицелл. Одним из способов увеличения числа мицелл в реакционной смеси является проведение процесса окисления сульфоксидов в пенно-эмульсионном режиме.

На рис.1 приведена типичная кинетическая кривая накопления сульфонов при катализируемом MoO_3 пероксидном окислении нефтяных сульфоксидов.

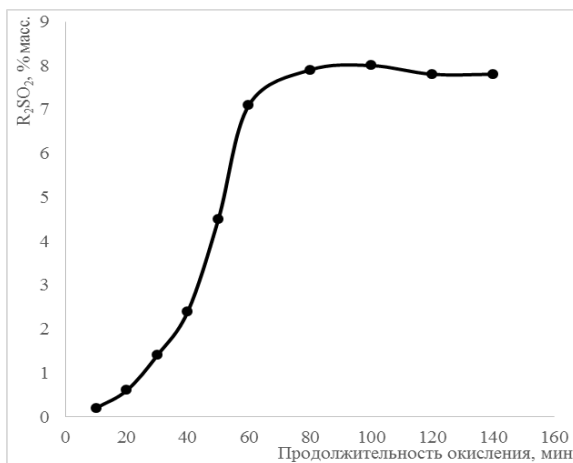


Рис.1. Типичная кинетическая кривая накопления нефтяных сульфонов. $T=110^\circ\text{C}$, $[\text{R}_2\text{SO}]_0=10$

Из рис.1 следует, что на начальных стадиях скорость реакции возрастает, а затем, достигнув предельного значения, начинает уменьшаться. В конце опыта достигается предельное значение $[\text{R}_2\text{SO}_2]_\infty$, которое позволяет найти выход сульфона по отношению к исходной концентрации сульфоксидов, т.е. $([\text{R}_2\text{SO}_2]_\infty/[\text{R}_2\text{SO}]_0) \times 100\% = 90,0\%$.

На начальных стадиях реакции концентрация сульфонов линейно зависит от квадрата времени.

Пероксид водорода наряду с термическим распадом обратимо расходуется на образование монопероксомолибденовой кислоты H_2MoO_5 . Далее H_2MoO_5 , реагируя с пероксидом водорода, обратимо превращается в дипероксомолибденовую кислоту H_2MoO_6 , которая равновесно образует промежуточный комплекс с сульфоксидом. При распаде комплекса $\text{R}_2\text{SO} \dots \text{H}_2\text{MoO}_6$ образуется следующее пероксосоединение:

Которое, по нашему мнению легко гидролизуется с разрывом двух связей $-\text{O}-\text{O}-$. При этом одновременно происходит внутримолекулярное окисление-восстановление: атомы кислорода (связанные серой) со степенью окисления (-1) принимают по одному электрону от атома серы, которая окисляется до степени окисления +6.

На кинетику накопления сульфонов при пероксидном окислении нефтяных сульфоксидов в присутствии катализатора MoO_3 оказывают влияние следующие основные факторы:

- равновесная концентрация нефтяного сульфоксида и окислителя H_2MoO_6 , образующегося из пероксида водорода и катализатора – оксида молибдена (VI) внутри мицелл обратных эмульсий;
- количество мицелл обратных эмульсий в реакционной системе.

Литература

1. И.М. Борисов, И.С. Файзрахманов, Г.Р. Шаяхметова, Р.Ф. Талипов, Н.З. Ягафаров. — Изв. вузов. Сер.: Химия и химическая технология — 2010. — Т. 53. — Вып.2. — С.102-104.
2. И. М. Борисов, З. Ш. Газизова, Р.С.Лукша, Е.Л.Маркова, И.С. — Технология нефти и газа. — 2015. — № 3. — С.15-18.
3. Шарипов А.Х., Сулейманова З.А., Файзрахманов И.С. — Нефтехимия. — 1994. — Т.34. — №5. — С.691-695.
4. Hamid Golchoubian and Farideh Hosseinpoor. — Molecules. — 2007. — V 12. — P.304-311.
5. Abbas Zali, Arash Shokromi, Mohammad Hossein Keshavars and Mohammad Ali Zarei. — Acta Chim. Slov. — 2008. — V 55. — P.257-260.

© Клецкова Д.И., Борисов И.М., Файзрвхманов И.С., Газизова З.Ш., 2015

КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ТРАНС-ВЛИЯНИЯ ХАЛКОНА, ТИОХАЛКОНА И α -ЕНИМИНА В КАРБОНИЛТРИАЗИНАНОВЫХ КОМПЛЕКСАХ МОЛИБДЕНА(0)

Колпакова Е.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, Россия

Нами впервые получены стабильные карбонитриазинановые комплексы металлов группы хрома с гетеродиенами. В них наблюдается высокая прочность связывания гетеродиенов с металлоостовом. Однако координация халкона, тиохалкона и α -енимина различается.

Нами был предложен механизм замещения карбонильных лигандов на молекулу гетеродиена. Исходя из предложенного механизма возможность связывания гетеродиена с металлом вторым координационным центром может определяться эффектом транс-влияния.

Для количественной оценки эффекта транс-влияния монооксида углерода и гетеродиеновых лигандов мы провели полную оптимизацию геометрического строения (1,3,5-три(2'-гидроксиэтил)-1,3,5-триазаиклогексан)трикарбонилмолибдена(0), а также продуктов замещения одного из карбонильного лиганда в этом комплексе на молекулу халкона, координированную с металлоцентром через π -систему связи C=C, молекулу тиохалкона и молекулу α -енимина, координированные через НЭП атомов серы и азота соответственно.

Таблица 1. Межатомные расстояния Mo-N (Å) для триазаиклогексантрикарбонилмолибдена(0) и металлоорганических соединений на его основе, вычисленные при помощи метода DFT – B3LYP/LANL2DZ, Å.

	<i>транс l(Mo-N)</i>	<i>цис l(Mo-N)</i>
(thetach)Mo(CO) ₃	2.0445	2.0445
(thetach)Mo(CO) ₂ (тиохалкон)	2.0795	2.0543
(thetach)Mo(CO) ₂ (халкон)	2.0665	2.0437
(thetach)Mo(CO) ₂ (азометин)	2.0344	2.0427

На основании длин связей Mo-N (триазинана), определенных квантово-химическими методами можно предложить следующий ряд транс-влияния гетеродиеновых лигандов для следующих нами комплексов:

1-тиоксо-1,3-диен > 1-оксо-1,3-диен > CO > 1-аза-1,3-диен

© Колпакова Е.В., 2015

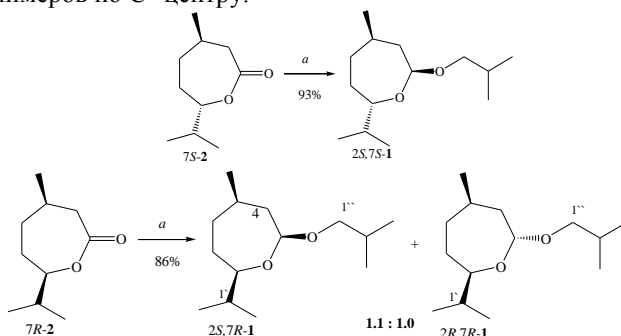
**ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО
ВОССТАНОВЛЕНИЯ ИЗОМЕНТОЛАКТОНА
ДИИЗОБУТИЛАЛЮМИНИЙГИДРИДОМ В CH_2Cl_2**

Кравченко А.А., Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю.

Уфимский Институт химии Российской академии наук
450054, Уфа, пр. Октября, 71; e-mail: insect@anrb.ru

Ранее мы сообщали о синтезе О-изобутильного производного ментолактола **2S,7S-1** при низкотемпературной (-70°C) обработке двукратным мольным количеством диизобутилалюминийгидрида (-)-ментолактона **7S-2** в хлористом метиле [1].

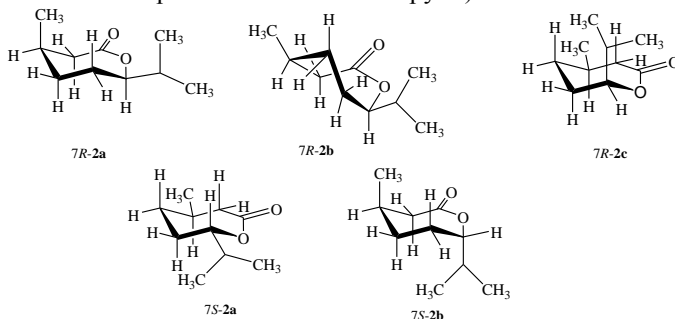
С целью изучения влияния асимметрического изопропилсодержащего C^7 -центра на стереоселективность реакции образования изобутиловых ацеталей низкотемпературной обработке подвергали эпимер (-)-ментолактона **7S-2** – изоментолактон **7R-2**, полученный по известной методике [2, 3]. В результате была получена смесь (1.1:1.0, по данным ЯМР ^1H) двух эпимеров по C^2 -центру.



а) 2 экв. *i*-Bu₂AlH, CH₂Cl₂, -70°C , 3 ч.

Для объяснения образования одного эпимера изобутилового ацетала **2S,7S-1** в случае (-)-ментолактона **7S-2**, а из изоментолактона **7R-2** двух – **2S,7R-1** и **2R,7R-1**, проведен анализ конформаций исходных лактонов **7S-2** и **7R-2**. Согласно квантово-химическим расчётам энергии Гиббса методом теории функционала плотности [M06-2X/6-31+G(d,p)] [2], устойчивость конформаций изоментолактона убывает в ряду **7R-2a** (0.0 кДж/моль) > **7R-2b** (7.4 кДж/моль) > **7R-2c** (8.5 кДж/моль), где в скобках приведена разница в свободной энергии. Из приведенных структур видно, что для изоментолактона **7R-2** характерно наличие 3-х конформаций с низким энергетическим барьером перехода. Несмотря на то, что структура **7R-2** обладает гибкостью, наиболее устойчивой является **7R-2a** – кресло с экваториальной ориентацией изопропильной и аксиальной метильной групп.

Близки к ней по энергии конформации **7R-2b** (твист с экваториально расположенными заместителями) и **7R-2c** (кресло с аксиальной ориентацией изопропильной и экваториальной метильной групп).



В случае (-)-ментолактона **7S-2** наблюдаются две возможные конформации, причем, как по экспериментальным данным [1], так и квантово-химическим расчётам, наиболее стабильной является кресловидная конформация с экваториальной ориентацией всех заместителей. Данные квантово-химических расчетов указывают на понижение устойчивости конформаций для (-)-ментолактона при переходе от **7S-2a** (0.0 кДж/моль) к **7S-2b** (13.8 кДж/моль) [2].

Таким образом, у (-)-ментолактона **7S-2** устойчивой является одна конформация с экваториальной ориентацией заместителей, и образование изобутилового ацеталя **2S,7S-1** протекает стереоспецифично. Тогда как у изоментолактона **7R-2** устойчивы три конформации, поэтому образование изобутилового ацеталя протекает менее стереоселективно.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке НШ 2625.2014.3 «Синтетические трансформации веществ, получаемых из отечественного растительного сырья, как базовый принцип разработки лекарственных препаратов высокой социальной значимости»

Литература

1. Ишмуратов Г.Ю., Яковлева М.П., Выдрин В.А., Хасанова Э.Ф., Муслухов Р.Р., Ишмуратова Н.М., Толстикова Г.А. *Химия растительного сырья*. **2007**, 23.
 2. Marell D.J., Emond S.J., Kulsherstha A., Thomas R. *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 752.
 3. Выдрин В.А., Галкина Ю.А., Муслухов Р.Р., Кравченко А.А., Ишмуратов Г.Ю. *XPC*. **2014**, 665.
- © Кравченко А.А., Выдрин В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., 2015

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ
ГЕМАТИТА ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ФЕНОЛОВ
С КАРБОНАТОМ КАЛИЯ**

Люткин А.С., Волков Е.М., Орлов В.Ю.

Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,
г. Ярославль, Россия.

Нами было исследовано влияние добавок оксидами железа (III) на процесс образования дифениловых эфиров в реакциях паранитрохлорбензола с феноксид-анионами, образующимися *in situ* (при взаимодействии фенола с карбонатом калия). Проведенные опыты с добавкой различных образцов гематита в реакционную систему показали, что внесение указанного твердофазного компонента ускоряет протекание процесса в различной степени. Наибольшее влияние на изучаемую реакцию оказывает оксид железа (III), полученный из сульфата железа. Для оценки особенностей механизма протекания изучаемого процесса было использовано квантово-химическое моделирование реакционных систем на основе метода PM7. В целях исследования структуры реакционного центра в присутствии гематита, было проведено моделирование взаимодействия фенола с оксидом железа (III) и карбонатом калия.

Проведенное исследование кластера оксида железа (III) с карбонатом калия показало следующее: при их сближении от 5 Å до 3 Å происходит удлинение связей О-К (для ближайшего к гематиту) с 2,48 и 2,52 Å до 2,58 и 2,73 Å соответственно.

Это указывает на миграцию калия на поверхность гематита в условиях изученного процесса, что подтверждают результаты оценки элементного состава. Было установлено, что контрольный образец гематита не содержит калия. Образец оксида железа, имевший контакт с поташом содержит 0,06 весовых процентов К. Также, образец гематита, прошедший после контакта с карбонатом калия обработку водой (для смыва возможных частиц поташа) содержит 0,04 весовых процентов К.

Полученные данные позволяют сделать предположение, что наблюдаемый промотирующий эффект добавок оксида железа (III) в реакционной системе пара-нитрогалогенбензол-замещенный фенол-карбонат калия связан с первоначальным взаимодействием фенола с гематитом, обеспечивающим ускорение последующей реакции с карбонатом калия. Образующийся феноксид далее участвует в процессе нуклеофильного замещения галогена на поверхности твердой фазы.

© Люткин А.С., Волков Е.М., Орлов В.Ю., 2015

СИНТЕЗ АМИНОПРОИЗВОДНЫХ П-ТРЕТ- БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, В КАЧЕСТВЕ ПРЕКУРСОРОВ МУЛЬТИМАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Носов Р.В., Стойков И.И.

Казанский федеральный университет, г.Казань, Россия

Производные каликс[4]арена и его тиа-аналога - тиакаликс[4]арена, нашли широкое применение в качестве молекулярных платформ для дизайна различных синтетических рецепторов, трансфекционных агентов и каталитических систем. Большинство работ представленных в литературе сосредоточены на ациклических каликсареновых производных, в тоже время все больший интерес представляет создание объемных наноразмерных структур – мультикаликс[4]аренов, содержащих в своем составе несколько макроциклических блоков. Наиболее интересным является создание мультикаликс[4]аренов, содержащих в своем составе первичные аминогруппы, которые способствуют взаимодействию с биомакромолекулами, такими как ДНК и белки.

Для синтеза мультитиакаликс[4]ареновых систем в литературе широко используется блочный синтез. Он заключается в объединении ядра и терминальных макроциклов посредством взаимодействия якорных групп. В качестве ядер мультимакроциклических систем нами были выбраны легкодоступные тетракислоты на основе тиакаликс[4]арена, в различных конфигурациях: *конус*, *1,3-альтернат* и *частичный конус*. В качестве терминальных макроциклов было решено синтезировать различно замещенные производные *n-трет*-бутилтиакаликс[4]арена, содержащие помимо якорной этилиденаминной группы, также и пропилфталимидные фрагменты. Гидразинолиз фталимидных групп позволит получить мультимакроциклы, содержащие в своем составе первичные аминогруппы. В результате нашей работы нами были синтезированы различно замещенные производные *n-трет*-бутилтиакаликс[4]арена, содержащие в своем составе аминные и фталимидные фрагменты. Структура и состав синтезированных макроциклов была подтверждена рядом физико-химических методов, такими как: ЯМР ^1H , ^{13}C спектроскопии, масс спектрометрии, ИК спектроскопии и элементным анализом.

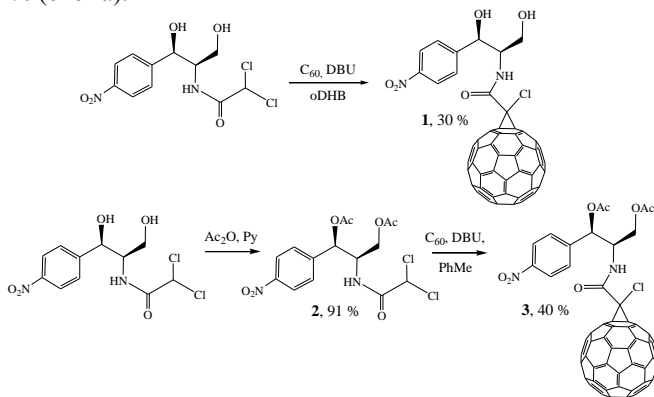
Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №15-03-02877_a).

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ С ЛЕВОМИЦЕТИНОМ

Нуриахметова З.Ф., Биглова Р.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последнее десятилетие интенсивно развиваются исследования по дизайну и синтезу производных фуллера C₆₀ для биологии и медицины. Подобные работы в основном направлены на создание водорастворимых соединений. Из их числа найдены производные C₆₀ с антивирусной, антиканцерогенной, антибактериальной активностями, «тушители» свободных радикалов и др. Отмечается, что C₆₀ – идеальный партнер для липофилизации лекарственного средства конъюгированием. В связи с этим нами запланирован синтез конъюгата фуллера C₆₀ с антибиотиком широкого спектра действия левомецетином. Как видно из структуры, левомецетин содержит дихлорметиновую функцию CHCl₂, активную в условиях реакции циклопропанирования C₆₀ по Бингелю. При экспериментальной проверке хлорамфеникол гладко реагировал с фуллереном C₆₀ в растворе *o*-дихлорбензола, содержащем 1.5 эквивалента DBU с образованием моноаддукта **1** с выходом 30 %. В аналогичных условиях нами апробирована реакция циклопропанирования фуллера C₆₀ диацетатом **2** в растворе толуола. При этом выход метанофуллера **3** составил 40 % (схема).



Весьма важную роль в создании соединений для медицинского применения играет их растворимость в водной среде. Синтезированные аддукты **1**, **3** оказались нерастворимыми в воде, однако метанофуллерен **3** имеет ограниченную растворимость в диметилсульфоксиде (5 мг/мл). Таким образом, нами впервые проведена реакция фуллера C₆₀ с левомецетином и диацетатом **2** в условиях Бингеля. Структуры синтезированных моноаддуктов **1**, **3** доказаны спектральными методами.

© Нуриахметова З.Ф., 2015 г.

ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА ПОР (СО)КАТАЛИЗАТОРА НА СКОРОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА

Овчинников Г.А., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.

ФГБОУ ВПО Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Изопрен является одним из важнейших мономеров для получения синтетических каучуков, широко применяемых в самых разных отраслях промышленности (автомобильной, электротехнической, авиационной и др.).

Основным способом получения изопрена является «диоксановый метод», основанный на пиролизе 4,4-диметил-1,3-диоксана (ДМД), который синтезируется по реакции Принса [1] с участием изобутилена в условиях кислотного катализа.

С целью усовершенствования процесса получения ДМД нами предлагается применение керамических материалов или нанотрубок как (со)катализаторов в выше указанной реакции. Так, нами изучено влияние диаметра пор (со)катализаторов на скорость образования 4,4-диметилдиоксана-1,3 (ДМД) в реакции Принса. Для этого была изучена кинетика накопления ДМД при взаимодействии изобутилена с формальдегидом и установлены значения констант скоростей накопления ДМД для каждого (со)катализатора (Таблица 1).

Таблица 1. Зависимость константы скорости накопления ДМД от диаметра пор (со)катализаторов (5% масс., 75 °С)

d, Å	Константа скорости реакции накопления ДМД, с ⁻¹
Sk1	$4,53 \cdot 10^{-3}$
Sk2	$3,5 \cdot 10^{-2}$
Sk3	$4,8 \cdot 10^{-1}$
Sk4	$5,5 \cdot 10^{-2}$
Sk5	$4,5 \cdot 10^{-2}$
Sk6	$1,1 \cdot 10^{-2}$

Согласно представленным данным, керамические материалы или нанотрубки способны оказывать (со)каталитический эффект на рассматриваемую реакцию и скорость образования ДМД. При этом наибольшая скорость накопления ДМД наблюдается в при использовании Sk3 как (со)катализатора.

Литература

1. С.К. Огородников, Г.С. Идлис // Производство изопрена, Л.: Химия, 1973., 296 с.
© Овчинников Г.А., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф., 2015

3-ФОРМИЛ-12-N-МЕТИЛЦИТИЗИН: СИНТЕЗ И НЕКОТОРЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ

Петрова П.Р.², Лобов А.Н.¹, Цыпышева И.П.¹

¹ФГБУН Уфимский институт химии РАН, Уфа, проспект Октября, 71.

²ГОУ ВПО «Башкирский государственный университет», г. Уфа, Россия

Формилированием по Даффу – действием уротропина в трифторуксусной кислоте на исходный 12-N-метилцитизин **1** синтезирован 3-формил-12-N-метилцитизин **2** с выходом 80 %.

Показаны дальнейшие превращения **2** путем реакций конденсации по альдегидной группе (схема 1).

Реагенты и условия: **a)** уротропин, CF_3COOH , кипячение; **b)** $\text{NH}_2\text{OH}\cdot\text{HCl}$, Py ; **c)** PhNHOH , MgSO_4 , CH_2Cl_2 ; **d)** $(\text{CH}_3)_2\text{CO}$, AcOH ; **e)** малоновый эфир, Py , Pur .

Схема 1.

Соединения **3-6**, функционализованные для последующих реакций [3+2]- и [4+2]-циклоприсоединения, получены с выходами от 54 до 76%. Строение соединений **3-6** установлено на основании данных спектроскопии ЯМР – ^1H , ^{13}C , ^{15}N .

Спектры (ЯМР, ИК, УФ) записаны на оборудовании ЦКП «Химия» УФИХ РАН.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ для ведущих научных школ № НШ-1700.2014.3.

©Петрова П.Р., Лобов А.Н., Цыпышева И.П., 2015

ЭПОКСИДЫ (*R*)-4-МЕНТЕНОНА И (*R*)-КАРВОНА В КАТАЛИЗИРУЕМОЙ $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ РЕАКЦИИ РИТТЕРА

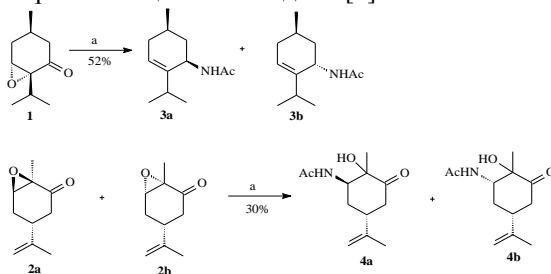
Тухватшин В.С., Кириллов Д.А., Овчинников Г.А.,
Талипов Р.Ф., Ишмуратов Г.Ю.

ФГБУН Уфимский институт химии РАН

ФГБОУ ВПО Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Удобным и распространенным способом синтеза ацетамидов, обладающих потенциальной фармакологической активностью, является реакция Риттера с участием терпеноидов [1].

В связи с этим нами изучена данная реакция окисей (*R*)-4-ментен-3-она (**1**) и (*R*)-карвона (**2**) (*цис*-/*транс*- ~ 14 : 1, согласно ГЖХ) в условиях катализа $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$. Так, по данным ГЖХ и ЯМР, установлено, что в указанных выше условиях оксид (**1**) образует смесь ацетамидов (**3a,b**) в соотношении 7 : 3, а оксиды (**2a,b**) – смесь гидроксиацетамидов (**4a,b**) в соотношении 2 : 1, соответственно. Образование ацетамидов (**3a,b**) в условиях реакции Риттера из оксида (*R*)-4-ментен-3-она (**1**) свидетельствует о том, что указанная реакция протекает нетривиально – с участием кетогруппы окиси (**1**) - по аналогии с производными адамантана [2]; реакция же с участием окисей (*R*)-карвона (**2a,b**) протекает традиционно - с раскрытием оксиранового цикла последних [3].



Реагенты и условия: а) MeCN, $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$, rt.

Литература

1. Карташов В.Р., Малкова К.В. и др. // *Журн. орг. химии*, 2006, Т. 42, № 7, сс. 986-989.
2. Averina N.A., Zefirova O.N., Zefirov N.S. and etc. // *Russ. Journal Org. Chem.*, 2004, V. 40, № 10, pp. 1437-1440.
3. Santos M.D., Crousse B., Bonnet-Delpon D. // *Tetrahedron Lett.*, 2009, V. 50, № 8, pp. 857-859.

© Тухватшин В.С., Кириллов Д.А., Овчинников Г.А.,
Талипов Р.Ф., Ишмуратов Г.Ю., 2015г.

УДК 547.16

ДИЗАЙН И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА БИС(1-АМИНО)ФОСФОНАТОВ НА ОСНОВЕ ДИЭТИЛЕНТРИАМИНА

Шабалин К.В., Стойков И.И.

Казанский (Приволжский) Федеральный университет, г. Казань, Россия

Аминофосфонаты, являясь ближайшими аналогами аминокислот, представляют большой интерес в качестве эффективных и селективных сенсоров на катионы металлов или олигопептиды. Обладая такими качествами, как простота получения и нетоксичность, аминофосфонаты могут найти широкое применение в качестве синтетических рецепторных структур или молекулярных «матриц» для адресной доставки веществ.

Квантово-химическое моделирование позволяет на начальном этапе исследования отобрать наиболее селективные и эффективные рецепторные структуры.

Предварительно с помощью эмпирического метода ММ+ и полуэмпирического метода РМЗ нами были изучены комплексообразующие свойства синтезированных производных **1-3** по отношению к катионам металлов (Cu^{2+} , Fe^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+}). Определены участки связывания, а также факторы, влияющие на энергию стабилизации образующихся комплексов. Рецепторные свойства и закономерности самосборки данных лигандов с аминокислотами изучались методами УФ-титрования, ДЛС и АСМ.

© Шабалин К.В., Стойков И.И., 2015

СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

УДК 543.552.054.1

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ БИСОПРОЛОЛА НА МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДАХ

Аничкова Ю.Г., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А., Сидельников А.В.,
Хаблетдинова А. И.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Целью настоящей работы явилось изучение электрохимического поведения биспролола на модифицированных полиариленфталидами электродах. Были определены оптимальные условия для проведения электрохимического анализа биспролола на предложенных электродах, в том числе и температурная зависимость. Из логарифмических зависимостей величин токов пиков от обратной температуры были рассчитаны кажущиеся энтальпии, энтропии и энергия Гиббса процессов окисления биспролола на модифицированных стеклоуглеродных электродах (табл. 1).

Таблица 1 Кажущиеся энтальпии, энтропии и энергия Гиббса процессов окисления биспролола на модифицированных стеклоуглеродных электродах

	$-\Delta H$, кДж/моль	$-\Delta S$, Дж/моль	$-\Delta G$, кДж/моль
Без модификатора	14,4	36,89	25,4
ТО	7,5	12,11	11,1
ТОО	7,9	15,48	12,5
ТООО	5,9	9,64	8,8

Полученные значения кажущихся энтальпий свидетельствуют об экзотермическом характере процесса накопления биспролола на пленочных электродах. Такой характер процесса характерен для физической адсорбции электроактивных компонентов.

Отрицательные значения ΔS (табл. 1) в данном процессе свидетельствуют об упорядочении системы биспролол-полимер по мере приближения молекул биспролола к поверхности модифицированного электрода и формирования адсорбционного слоя.

Энергии Гиббса процессов окисления биспролола (табл. 1) на модифицированных стеклоуглеродных электродах во всех случаях имеют отрицательные значения, что свидетельствует о самопроизвольности протекания указанных процессов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 14-03-97067-р_поволжье_а.

МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ

Аничкова Ю.Г., Яркаева Ю.А., Хаблетдинова А. И., Зильберг Р.А.,
Сидельников А.В.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

В большинстве случаев для установления различий между лекарственными формами отдельных производителей используются методы хемометрики. В частности, хемометрическая обработка вольтамперограмм методом главных компонент (МГК) позволяет перенести массивы экспериментальных данных в новую систему координат и представить их точками, группирующимися в виде эллипсоидов или сферы в пространстве. Совокупности близлежащих точек и занимаемые ими пространства соответствуют различным веществам. В настоящей работе были идентифицированы антиаритмические лекарственные средства различных производителей с использованием вольтамперометрических мультисенсорных систем на основе модифицированных полиариленфталидами стеклогуглеродных электродов (СУЭ). Снимали циклические вольтамперограммы биспролола различных производителей на СУЭ и модифицированных полиариленфталидами СУЭ. Для оценки схожести и различий между вольтамперограммами проводили их МГК-моделирование. Оптимальное число главных компонент выбирали таким образом, чтобы доля объясненной дисперсии была не ниже 90 % (2 - 5 ГК). Мы видим что выделяются кластеры бипрола, кардинорм, биола, бисогаммы, конкора и конкор кора.

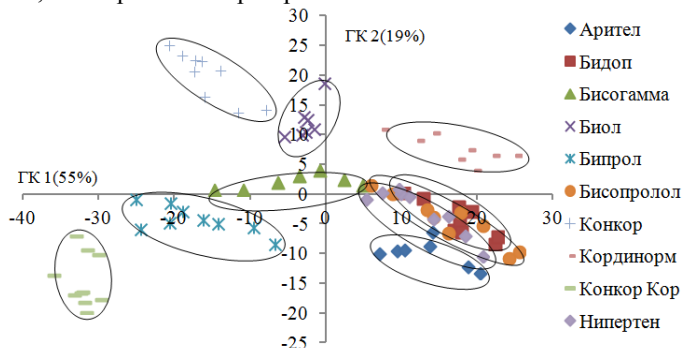


Рис. 1. График счетов МГК-моделирования циклических вольтамперограмм лекарственных средств на основе биспролола различных производителей, зарегистрированных на СУЭ модифицированном ТО.

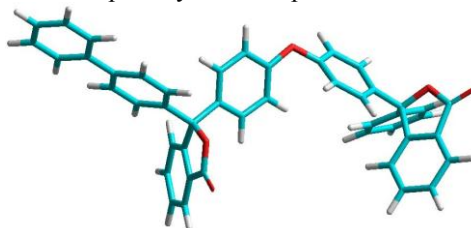
Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 14-03-97067-р_поволжье_а

УДК 544.022; 541.1; 547.022

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ РЯДА ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ С ПАФК

Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Хаблетдинова А.И.¹, Миргалеев Д.Н.¹,
¹Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

С использованием полуэмпирического приближения RM1 осуществлено моделирование взаимодействия действующих веществ (ДВ) ряда лекарственных препаратов (сотагексал, метаприлин, амидарон, атенолол) с полиариленфталидкетонами (ПАФК), используемыми в качестве модификаторов стеклоуглеродных электродов. В качестве модели для описания ПАФК использовался мономер следующего строения:

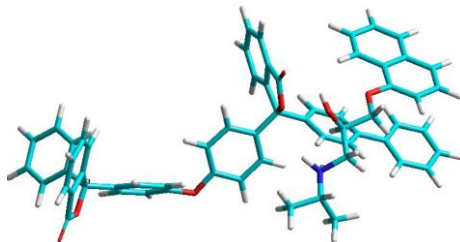


Показано, что данные соединения образуют достаточно прочные комплексы с ПАФК, что по видимому обуславливает концентрирование ДВ из раствора на поверхности электрода.

Расчетные значения энтальпий комплексообразования ДВ с ПАФК,
кДж/моль

комплекс с ПАФК	ΔH_r
анаприлин	-33,5
атенолол	-48,5
амидарон	-28,7
сотагексал	-41,2
метаприлин	-25,4

Интересно отметить, что практически все комплексы образуются за счет водородных связей и взаимодействий между ароматическими фрагментами молекул.



**РЕГУЛИРОВАНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ
ПОВЕРХНОСТНО – АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ**

Нигматзянова А.И., Лутфуллина Г.У., Ширяева Р.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последние годы в разработку широко вовлекаются месторождения с высоким содержанием парафиновых углеводородов или смолисто-асфальтеновых веществ. Добыча и транспортировка таких нефтей осложняются образованием асфальтосмолопарафиновых отложений (АСПО). Для снижения вязкости аномальных нефтей используют депрессорные присадки, ПАВ и различные поля. Подбор реагентов для каждой нефти осуществляется индивидуально путем изучения их реологических свойств.

Целью данной работы являлось исследование реологических свойств нефти Оренбургского месторождения с добавками ПАВ. Нефть содержит 34,4% масс. парафино-нафтеновых углеводородов, 48,0% масс. ароматических углеводородов, 15,6% масс смол и 2,0% масс асфальтенов. В качестве ПАВ использовали сонпар 5403Б2, лапрол 6000, неонол АФ -12, додецилсульфат натрия, СНПХ 48880 Д2, ОКН (содержание активной формы 30%), В-19 и американскую присадку. Добавки в концентрации 0,01-0,2% масс вводили в нефть при температурах 20-60 С. Динамическую вязкость нефти изучали на ротационном вискозиметре «Реотест-2» при скоростях сдвига от 3 до 729 с⁻¹.

Установлено, что по характеру течения нефть и ее композиции при низких температурах относятся к пластичным жидкостям. С повышением температуры характер течения меняется, нефть и ее композиции являются ньютоновскими жидкостями.

Выявлено, что все добавки снижают вязкость нефти и их оптимальное содержание составляет 0,05% масс. По уменьшению вязкости нефти добавки располагаются в ряд: неонол > американская присадка > ОКН > В-19 > лапрол 6000 > додецилсульфат натрия СНПХ > сонпар. Видимо, неонол АФ -12 увеличивает прочность сольватных оболочек сложных структурных единиц (ССЕ) и уменьшает взаимодействие между частицами асфальтенов, препятствуя их слипанию.

Таким образом, неонол оказывает на нефть наилучшее модифицирующее действие и приводит к значительному снижению ее вязкости.

ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ПОЛУАВТОМАТИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ ПОВЕРХНО- АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ

Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Газизов Э.Р., Батыров Т.И.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Применение метода импедансной спектроскопии в химическом анализе представляет собой новое и перспективное направление, позволяющее снизить пределы обнаружения и объемы исследуемых растворов на несколько порядков. Измерение комплексного сопротивления повышает чувствительность различных способов анализа, так как его мнимая часть отражает явления, протекающие на границах электрод/раствор.

В данной работе предложен менее токсичный, недорогой полуавтоматический способ определения ПАВ в водно-органических средах. Одними из основных преимуществ способа можно выделить отсутствие требований к селективности электродов, присутствию окрашенных компонентов, наличию гетерогенных фаз и др.

Суть способа заключается в титровании ПАВ в водно-органической среде; снимая спектры импеданса для каждой дозы титранта с обработкой методом главных компонент получаем кривую, которая аналогична кривой титрования в кондуктометрическом методе. Точка пересечения двух монотонных участков представляет собой конечную точку титрования.

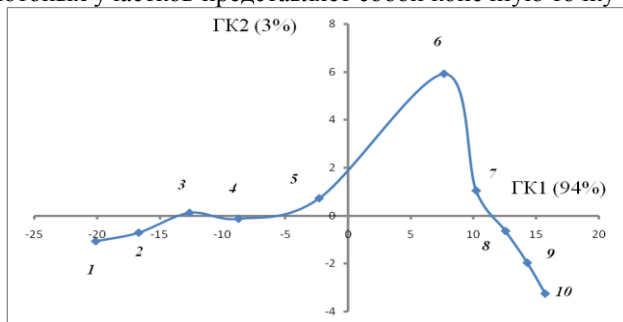


Рисунок. График счетов МГК - моделирования спектров импеданса при титровании 0,09 % (масс.) раствора ЦПХ, V_T , мл: 1-0.18, 2-0.36, 3-0.54, 4-0.72, 5-0.9, 6-1.08 (КТТ), 7-1.26, 8-1.44, 9-1.62, 10-1.8.

В качестве поверхностно-активного вещества использовали хлорид цетилпиридиния (ХЦП). В качестве титранта использовали анионное ПАВ – додецилсульфат натрия (ДДС). Погрешность определения не превышает 3%.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-03-97067 p_поволжье_a)

**ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ
НИТРОСОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИБРИДНОЙ
МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ С PLS-DA**Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Мухамедьяров Т.Н., Батыров Т.И.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В последние десятилетия активно ведутся работы по созданию экспрессных мультисенсорных систем, позволяющих без подробного качественного и количественного анализа устанавливать химическую схожесть между сложными растворами. Известны потенциометрические, вольтамперометрические, кондуктометрические мультисенсорные системы, которые используются для установления фальсифицированных продуктов, лекарственных препаратов, классификации и т.п. Развитие этих систем связано с необходимостью повышения чувствительности и разрешающей способности отличать вещества близкой природы в условиях многообразия и широкого концентрационного диапазона матричных компонентов. Новым инструментальным приемом получения химической информации о составе растворов является импедансометрическая спектроскопия, обладающая чрезвычайно высокой чувствительностью к изменению состава как раствора, так и приэлектродного слоя. Это позволяет использовать спектры импеданса сложного раствора как многомерный массив данных для хемометрического анализа и извлечения информации о составе, природе, концентрации компонентов раствора. В данной работе впервые предложен гибридный способ идентификации электроактивных веществ с использованием потенциодинамического режима регистрации спектра импеданса. В качестве стандартных электроактивных веществ были выбраны ароматические нитросоединения, для которых достаточно хорошо изучено электрохимическое поведение в условиях вольтамперометрического анализа. Способ основан на регистрации спектров импеданса при наложении потенциала на рабочий электрод в диапазоне от 0 до -900 мВ. Многомерные данные представляют собой набор мнимой и действительной составляющей импеданса при различных потенциалах (около 500 значений для каждого исследуемого нитросоединения). Методами главных компонент и PLS-DA показана возможность отличать близкие по природе изомеры ароматических нитросоединений. Погрешность регрессионной модели не более 10%, доля объясненной дисперсии с использованием первых четырех главных компонент при анализе трех нитросоединений составила 80% для дискриминационных коэффициентов в условиях сходимости.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 14-03-97067 р_поволжье_а)

УДК 544.022; 541.1; 547.022

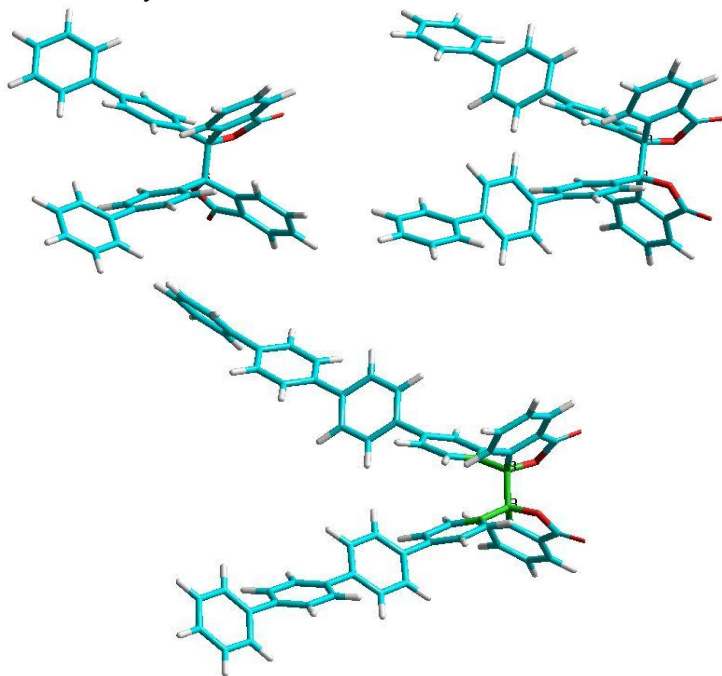
ОСОБЕННОСТИ КОНФОРМАЦИОННОГО СТРОЕНИЯ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДКЕТОНОВ

Хаблетдинова А.И.¹, Вакулин И.В.¹, Зильберг Р.А.¹, Миргалеев Д.С.¹,
Крайкин В.А.²

¹Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

²Уфимский институт химии, г. Уфа, Россия

С использованием приближения RM1 в газовой фазе рассмотрено конформационное строение полиариленфталидкетон (ПАФК), используемых в качестве модификаторов стеклоуглеродных электродов. В качестве модели рассматривались следующие соединения:



В зависимости от угла вращения по связи С-С между фталимидными фрагментами, дипольный момент конформеров данных соединений меняется в пределах от 0.1 до 8.6 D. При этом разница энергий между конформерами находится в пределах 14-25 кДж/моль. Характер зависимости предполагает изменение относительной устойчивости конформеров при изменении полярности среды, что может оказывать заметное влияние на строение модификатора ПАФК и его склонность к комплексообразованию с анализируемыми компонентами.

**ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ
ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ СТЕКЛОУГЛЕРОДНЫХ
ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО
ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ**
Яркаева Ю.А., Аничкова Ю.Г., Хаблетдинова А.И., Зильберг Р.А.,
Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Анализ лекарственных препаратов является актуальным вопросом в связи с увеличением производства контрафактной продукции. Наряду с использованием хроматографических, колориметрических, титриметрических методов определения лекарственных препаратов широко используются электрохимические методы анализа, в частности вольтамперометрия, так как многие лекарственные средства электроактивны в доступной области потенциалов. В данной работе были анализированы следующие антиаритмические препараты: анаприлин, амиодарон, ателолол, метопролол, сотогексал и бисопролол, в том числе дженерики бисопролола: арител, бидоп, биол, бипрол, бисогамма, конкор, конкор кор, кардинорм, нипертен [1]. Снимали циклические, линейные, дифференциально-импульсные и квадратно-волновые вольтамперограммы выбранных антиаритмических препаратов на СУЭ и модифицированных полиариленфталидами СУЭ при скорости развёртки потенциала 1 В/с на фоне 0.1 М H₂SO₄, время накопления 90 с. Наблюдаются различия в форме кривых, их расположении на оси потенциалов и величинах мгновенных токов, поскольку многие лекарственные средства отличаются не только по физико-химическим показателям, но и по составу вспомогательных веществ, способных проявлять электрохимическую активность в исследуемой области потенциалов и влиять на форму вольтамперограмм и величины мгновенных токов. Результаты показывают, что предложенная вольтамперометрическая система на основе модифицированных полиариленфталидами электродах оказывается чувствительна к составу таблетированных лекарственных форм, что позволяет надежно различать не только лекарственные формы с различными действующими веществами, но и лекарственные формы одного препарата, выпущенные различными производителями.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 15-03-01388-а.

Литература

1. Сидельников А. В., Зильберг Р. А., Яркаева Ю. А., Майстренко В. Н., Крайкин В. А. Журнал аналитической химии, 2015, том 70, № 10, с. 1–7.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-ИМПУЛЬСНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ БИСОПРОЛОЛА РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ

Яркаева Ю.А., Аничкова Ю.Г., Хаблетдинова А.И., Зильберг Р.А.,

Сидельников А.В.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Дженерики различных производителей отличаются по физико-химическим показателям и терапевтической эффективности. Поэтому интерес представляют методы, позволяющие не только идентифицировать, но и отличать одних производителей от других.

Целью данной работы является создание аналитической методики определения бисопролола различных производителей с различными коммерческими названиями. Дифференциально-импульсные вольтамперограммы (ДИВ) регистрировали на стеклоуглеродном электроде, модифицированном полиариленфталидами ТО, ТОО, ТООО.

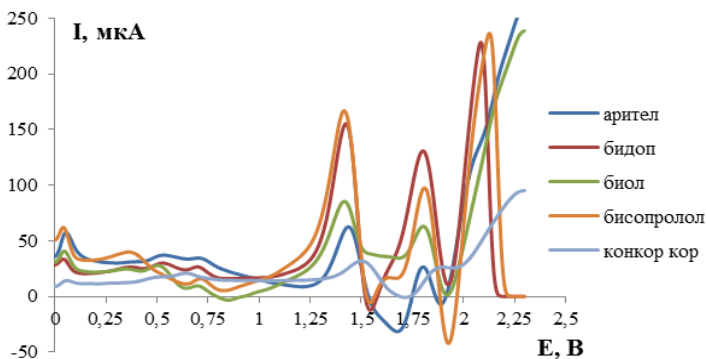


Рис. 1. Дифференциально-импульсные вольтамперограммы антиаритмических препаратов на СУЭ, модифицированном ТОО

Из рис.1 видно, что для препаратов всех производителей наблюдаются фарадеевские токи окисления основного компонента при 1,25–2,25 мВ и остальные токи, обусловленные составом матрицы исследуемых препаратов. Применение ДИВ значительно уменьшает вклад емкостных процессов в регистрируемый сигнал. Наблюдаются различия в форме кривых, их расположении на оси потенциалов и величинах мгновенных токов, поскольку многие лекарственные средства отличаются не только по физико-химическим показателям, но и по составу вспомогательных веществ, способных влиять на форму вольтамперограмм и величины мгновенных токов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ: грант № 15-03-01388-а.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ХИМИИ»

УДК 371.261

ПРЕПОДАВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ» СТУДЕНТАМ НАПРАВЛЕНИЯ ПОДГОТОВКИ «ЭКОЛОГИЯ И ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЕ» БАШКИРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Тухватшин В.С., Талипова Г.Р., Талипов Р.Ф.

ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет», Уфа,
Россия

Курс «Органическая химия» читается студентам второго курса биологического факультета направления подготовки «Экология и природопользование» Башкирского государственного университета и включает в себя как лекции, так и лабораторные занятия.

Лекционный курс направлен на рассмотрение классификации, номенклатуры, изомерии, способов (промышленных и лабораторных) получения, химических свойств органических соединений - углеводов, галогенопроизводных, одно- и многоатомных спиртов, простых эфиров, карбонильных соединений, карбоновых кислот и их производных, аминов и т. д.

Основу же практического курса составляют лабораторные работы, в ходе выполнения которых, студенты наглядно закрепляют знания, полученные ранее на лекциях.

Большинство загрязняющих веществ имеют органическую природу.

В связи с этим в курсе «Органическая химия» сделан акцент на формирование у студентов практических и теоретических знаний об органических веществах с точки зрения их токсичности и влияния на окружающую среду.

При подготовке к лабораторным работам студенты решают задачи, касающиеся номенклатуры, установления молекулярных формул, взаимных превращений органических соединений.

© Тухватшин В.С., Талипова Г.Р., Талипов Р.Ф., 2015

**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ КОНТРОЛЯ
РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ
В ВЫСШЕМ УЧЕБНОМ ЗАВЕДЕНИИ**

Абдуллина А.Р., Ильясова Р.Р.

ФГБОУ ВПО «Башкирский государственный университет», г. Уфа

Современные информационные технологии привели к подлинной революции в образовании, причем первенство в практическом их применении принадлежит высшему образованию.

Часто в учебных заведениях применение информационных технологий связано с использованием компьютеров в учебном процессе. Можно привести многочисленные примеры, подтверждающие эффективность использования компьютеров на всех стадиях педагогического процесса: на этапе предъявления учебной информации; на этапе усвоения учебного материала в процессе интерактивного взаимодействия с компьютером; на этапе повторения и закрепления усвоенных знаний (навыков, умений) и т.д.

Одним из практических направлений применения информационных технологий в высшем учебном заведении становится внедрение их для контроля результатов обучения в форме тестирования знаний. Однако среди тех, кто знаком с процедурой тестирования, бытуют распространенные заблуждения относительно тестов. Многие преподаватели считают, что тест охватывает лишь поверхностный слой знаний студентов, для его выполнения не требуется сложных интеллектуальных действий. Существует мнение, что тест составить легко. Все эти мнения небезосновательны, но возникли в результате столкновения с недоброкачественной продукцией, которой в настоящее время достаточно большое количество.

Следует отметить, что преимуществами применения компьютеров для тестового контроля знаний студентов являются: возможность преподавателю получать оперативно сведения о качестве усвоения материала, не затрачивая время на устную или письменную проверку контрольных работ; компьютерное тестирование экономит время, разнообразит учебный процесс, наполняет деятельность преподавателя принципиально новым содержанием.

Т.к. традиционные технологии обучения в ряде случаев уже исчерпывают себя, ограничены возможности и информационных технологий, поэтому только гармоничное сочетание традиционного обучения и информационных технологий способствует обогащению образовательной деятельности высших учебных заведений, способствуя совершенствованию качества образования и его доступности.

© Абдуллина А.Р., Ильясова Р.Р., 2015

УДК 541.69:54 (091)

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ
В КУРСЕ МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ
НА ХИМИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ**

Биглова Р.З.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Основная цель организации научно-исследовательской работы студентов (НИРС) – повышение уровня научной подготовки специалистов с высоким профессиональным образованием, выявление талантливой молодежи для последующего обучения.

Организация НИРС в курсе «Медицинской химии», изучаемой на третьем курсе химического факультета, предполагает, прежде всего, внедрение элементов научного творчества студентов во все формы учебного и внеучебного процессов: лекции, лабораторные и семинарские занятия, а также самостоятельную работу. Необходимо иметь ввиду, что активная научно-исследовательская работа студентов возможна только при наличии серьезной мотивации (а этот – подготовка к последующей плодотворной профессиональной деятельности).

Как основной активизирующий фактор научно-исследовательской работы следует выделить полезность выполняемой работы. Не последнюю роль при этом играет психологический настрой студента.

Немаловажна как мотивационный фактор и интенсивная педагогика. Она предполагает введение в учебный процесс активных методов, например, игрового тренинга, в основе которого лежат инновационные и организационно-деятельностные игры. В последних происходит переход от односторонних к многосторонним знаниям от объектов, его моделирование с выделением существенных моментов.

Мотивационным фактором в учебной работе является и личность преподавателя. Он может и должен являть собой пример для студента как профессионал, творческая личность. Педагог должен своевременно помочь студенту раскрыть свой творческий потенциал и определить перспективы внутреннего роста. Стимулируя интерес студента к научно-исследовательской работе, преподаватель активизирует и его учебную деятельность.

© Биглова Р.З., 2015 г.

**АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЕДИНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
ЭКЗАМЕНА ПО ХИМИИ В РБ ЗА 2015 ГОД**

Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

В Республике Башкортостан во всех этапах проведения ЕГЭ-2015 по химии участвовали 3 826 человек, из которых 3 601 выпускника республиканских общеобразовательных организаций (школ, гимназий, лицеев) текущего года; 224 – выпускника прошлых лет и выпускники учреждений профессионального образования, и 1 выпускник, не завершивший среднее (полное) образование. Средний балл, показанный первыми, равен 57,8 баллам, вторыми – 42,25 баллам, в совокупности – 56,9 баллам. Всего 313 выпускников школ, к сожалению, не смогли преодолеть минимальный порог в 36 баллов, что составляет 6,2% (в 2014 году – 5,9%). Процент «высокобалльных» работ равен 6,2% (более 80 баллов), в основной день экзамена набрали 236 выпускников, что соизмеримо с аналогичным показателем за прошлый год (5,9%).

Анализ процентов выполнения заданий ЕГЭ показывает, что сложными для школьников являются почти все задания третьей части, а именно задания с 36 по 40. Среди названных трудных заданий самый низкий процент выполнения имеет задание 37. Задание 37 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 37 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.

Задание под номером 38 оформлено в виде классической цепочки превращения органических веществ. Следует отметить, что это самое «дорогое» задание, за правильное выполнение которого можно получить 5 первичных баллов. Учащиеся испытывают большие трудности в написании структурных формул органических соединений, в использовании подсказок в самом задании. Подсказками мы считаем условия проведения опыта, конкретные катализаторы процесса.

Решение расчетных задач по заданию 39 предполагает обязательное владение теоретического материала по химии, знание законов математики и физики. Особую трудность, как у школьников, так и у студентов вызывают задачи на алгоритм «избыток-недостаток», расчет массовой доли растворенного вещества и задачи на смеси веществ. Наибольшее число задач под номером 39 приходится на расчет массовой доли растворенного вещества. Для данного типа задач самой типичной ошибкой является расчет массы раствора после проведения химических реакций согласно заданию. В условиях задачи нет ни одного лишнего слова, в содержании задачи каждое слово имеет свой вес. В качестве примера приводим следующую задачу, в котором учащиеся не обратили внимания на слово «избыток раствора щелочи». Задача 39. «Смесь безводных сульфата алюминия и хлорида меди (II) растворили в воде и добавили к раствору избыток раствора гидроксида натрия. При этом образовалось 19,6г осадка. А если тот же раствор солей добавить к раствору нитрата бария, то выделяется 69,9г осадка. Определите массовую долю сульфата алюминия в исходной смеси». При решении этой задачи учащиеся не учли избыток раствора щелочи, который с сульфатом алюминия (амфотерность!) приводит к образованию растворимой комплексной соли – тетраалюмината натрия. По этой причине вся масса осадка (19,6г) состоит из гидроксида меди (II).

В последние годы несколько усложнено задание 40. Во-первых, задание оценивается 4-мя первичными баллами; во-вторых, кроме установления формулы органического соединения необходимо написать структурную формулу вещества и написать характерную реакцию для этого вещества согласно самому заданию. Таким образом, задание становится комплексным: если выпускник ошибся на стадии установления формулы вещества, то и структурная формула и химическая реакция будут ошибочными.

© Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н., 2015 г.

УДК 54.057

ИЗУЧЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА CHEMCALCULATOR

Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р., Исакова М.М., Талипова Г.Р.
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия.

Нами разрабатывается учебное пособие, позволяющее освоить основы органического синтеза с применением современных компьютерных технологий. Оно состоит из 4 разделов, в каждом из которых приведены теоретические основы и предложены варианты заданий. Особенности данного пособия являются on-line база данных методов синтеза и разработанная нами программа Калькулятор сложности химических реакций, позволяющая оценивать сложность предлагаемых схем химических превращений.

Цель первого этапа заключается в ознакомлении с подпрограммой «Калькулятор сложности химических соединений». Студенту будут предложены ряд соединений различных классов и сложности, которые он должен будет отображать в данной программе и сравнивать ответы с приведенными. В дальнейшем задача будет усложнена до количественных расчетов эффективности предлагаемых реакций синтеза органических соединений. На третьем этапе сложность задач будет существенно повышена. На основе количественного определения эффективности синтезов студентам предлагается выбрать оптимальную схему синтеза данного соединения из нескольких предлагаемых схем синтеза. Последний этап будет представлен иным образом, нежели предыдущие вышеописанные три этапа. Он базируется на умении студентов, изучающих органическую химию, предложить собственные варианты синтеза приведенных в условии веществ. В помощь предлагается on-line база 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.), а также программный продукт CHEMCALCULATOR. Задания на этом этапе формулируются как генерирование схемы синтеза предложенного органического соединения с заданным значением эффективности синтеза.

Считаем, что разрабатываемое учебное пособие будет интересно не только студентам, изучающим органическую химию, но также и преподавателям и исследователям, планирующим работы по органическому синтезу.

© Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р., Исакова М.М., Талипова Г.Р., 2015

МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ РЕОЛОГИЧЕСКОГО МЕТОДА В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА И ОЦЕНКИ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ

Тухватуллин Р.Ф.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

rust20-11@yandex.ru

Реология — наука о деформациях и течении реальных тел, дисперсных систем и технических материалов—от металлов, бетонов и полимеров до суспензий и коллоидных растворов. Реологический метод нашел широкое применение в химической, текстильной, строительной, пищевой промышленности, в машиностроении и т. п.

Переработка полимеров связана с превращением исходных материалов в готовые изделия. Осуществление таких сложных процессов как получение волокон, литье под давлением, термоформование, нанесение практически всегда требует глубокого понимания реологических свойств перерабатываемых полимерных материалов в текучем состоянии. Хорошо известно, что реологические свойства материалов связаны с их молекулярными параметрами и что это играет важную роль как при получении новых полимеров, так и при переработке материалов в изделия. Анализ отдельных процессов формования включает рассмотрение реологии перерабатываемых полимерных материалов, а также основных закономерностей механического поведения систем в этих процессах.

Также, реологические испытания важны в качестве экспресс-методов оценки хода процессов синтеза полимеров.

Кафедрой высокомолекулярных соединений и общей химической технологии химического факультета Башкирского государственного университета приобретен реометр Haake Mars III и автограф Shimadzu AGS-X для детального изучения реологических свойств получаемых полимерных материалов.

К настоящему моменту отработана методология использования реологического метода в следующих научных направлениях кафедры ВМС и ОХТ:

- Реология биологически-активных систем на основе водорастворимых природных и синтетических полимеров;
- Разработка и создание технологий производства полимер-мицеллярных реагентов для нужд нефтедобычи, нефтепереработки и нефтехимии
- Исследование процессов деструкции, стабилизации и модификации полимеров

© Тухватуллин Р.Ф., 2015

МАТЕМАТИКА

СЕКЦИЯ «КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И ТЕОРИЯ ФУНКЦИИ»

УДК 517.53

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ДЕЛЬТАОБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Бадахов Мухтар Шамильевич

Карачаево-Черкесский государственный университет им. У.Д. Алиева,
г.Карачаевск, Россия

Уравнение Шредингера с потенциалом $q(x)$ в виде конечной суммы δ -функций имеет вид:

$$\psi_{xx} = [k^2 + q(x)]\psi, \quad q(x) = \sum_{j=1}^N \gamma_j \delta(x - x_j) \quad (1)$$

Решения на бесконечностях (функции Йоста) задаются в виде:

$$\psi^+(x, k) = e^{kx}, \quad x \ll 0, \quad \psi^-(x, k) = e^{-kx}, \quad x \gg 0. \quad (2)$$

Функция Грина $G(x, y; k)$ связана с функциями Йоста $\psi^\pm(x, k)$ классической формулой:

$$G(x, x; k) = \frac{\psi^+(x, k)\psi^-(x, k)}{\psi^+(x, k)\psi_x^-(x, k) - \psi^-(x, k)\psi_x^+(x, k)}, \quad \operatorname{Re} k \geq 0. \quad (3)$$

Нам важна связь полюсов функции Грина с параметрами потенциала.

В случае $N = 2$ коэффициент $a(k)$ решения

$$\psi(x, k) = a(k)e^{kx} + e^{-kx}$$

имеет вид:

$$a(k) = 1 + \frac{\gamma_1}{2k} + \frac{\gamma_2}{2k} + \frac{\gamma_1 \gamma_2}{2k^2} (1 - e^{-2k(x_2 - x_1)}),$$

при этом - вронскиан в знаменателе формулы (3).

γ_1 и γ_2 восстанавливаются по нулям k_1 и k_2 $a(k)$ при помощи квадратного уравнения

$$\gamma^2 + \alpha\gamma + \beta = 0, \quad \alpha = \frac{z_1 z_2 - z_2 z_1}{z_2 - z_1}, \quad \beta = \frac{z_1 - z_2}{z_2 - z_1}, \quad z_j = \frac{1 - e^{-z_j(x_2 - x_1)}}{z_j}, \quad z_j = 2k_j$$

Литература

- [1] Бадахов М.Ш., Веремеенко О.Ю., Шабат А.Б. Об асимптотике обобщенных собственных значений оператора Шредингера// Владикавказский мат. журн., 16(4)- 2014, С 34-40;
- [2] Шабат А.Б. Теория рассеяния для дельтаобразных потенциалов// Теор. Мат. Физ., 183(1), - 2015.
- [3] Коддингтон Э., Левинсон Н., Теория обыкн. дифф. ур-й, М. 1958.

О ФРЕЙМАХ ИЗ ЧАСТЕЙ СИСТЕМЫ ЭКСПОНЕНТ С ВЫРОЖДАЮЩИМСЯ КОЭФФИЦИЕНТОМ В КЛАССАХ ХАРДИ

Билалов Билал Тельманович, Садыгова Сабина Рагибовна
 Институт Математики и Механики НАН Азербайджана, г. Баку,
 Азербайджан

Рассмотрим систему $E_{\pm}^{(k)}(\rho) \equiv \{\rho(t)e^{\pm i n t}\}_{n \geq k}$. Будем предполагать, что вырождающийся коэффициент ρ имеет степенной вид

$$\rho(t) = (e^{it} - 1)^{\alpha_0} \prod_{k=1}^r (e^{it} - e^{it_k})^{\alpha_k}, \text{ где } \{t_k\}_1^r \subset (-\pi, \pi] \setminus \{0\} - \text{различные точки}$$

и $\{\alpha_k\}_0^r \subset \mathbb{R}$. Через \mathbf{M}_p будем обозначать класс весов $\nu(t)$, удовлетворяющих условию Макенхоупта (см. напр. [1])

$$\sup_{I \subset [-\pi, \pi]} \left(\frac{1}{|I|} \int_I \nu(t) dt \right) \left(\frac{1}{|I|} \int_I [\nu(t)]^{-\frac{1}{p-1}} dt \right)^{p-1} < +\infty, \text{ где } \sup \text{ берется по всем}$$

интервалам $I \subset [-\pi, \pi]$ и $|I|$ есть лебегово мера I .

Доказывается следующая

Теорема [2]. Пусть выполнены неравенства $k - 1/p \leq \alpha_0 < k + 1/q$, $-1/p < \alpha_i < 1/q$, $i = \overline{1, r}$. Тогда система $E_{+}^{(0)}(\rho)$ имеет дефект, равный (k) в пространстве L_p^+ , где L_p^+ есть сужение класса Харди H_p^+ на единичную окружность. При этом система $E_{+}^{(k)}(\rho)$ полна и минимальна в L_p^+ , но не является равномерно минимальной в нем, и следовательно, не образует базис.

Работа выполнена под финансовой поддержки программы "Применение теория фреймов в обработке сейсмологических сигналов и сигналов различных природ", НАН Азербайджана, 2015.

Литература

1. Гарнетт Дж. Ограниченные аналитические функции, М: «Мир», 1984, 469с.
2. Bilalov B.T., Sadigova S.R. Frame properties of the part of a system of exponents with degenerate coefficient in Hardy classes. Georgian Math. Journal (accepted paper)

МАТРИЧНАЯ ЗАПИСЬ КОМПЛЕКСНЫХ ЧИСЕЛ

Дашкин А.Р., Баландин С.П.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа,
Россия

Комплексные числа принято представлять в виде точек на плоскости, точнее их радиус-векторов. С другой стороны, умножение на число есть линейный оператор, и его можно задать матрицей. Очевидно, умножение на единицу определяется единичной матрицей, а на мнимую единицу – матрицей $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ (см., например, [1], с.27).

Числу $a+bi$ сопоставляем матрицу $\begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}$.

Умножение и сложение такого рода матриц сохраняют все свойства арифметических операций с комплексными числами. Заметим, что комплексное сопряжение соответствует транспонированию. При этом след матрицы дает сумму, а детерминант – произведение числа и его комплексно-сопряженного. Детерминант равен (квадрат модуля). Для любого ненулевого числа можно найти обратное, обращая матрицу.

Таким образом установлено взаимно однозначное соответствие между множеством комплексных чисел и множеством матриц вышеуказанного вида.

Обобщения комплексных чисел с тремя мнимыми единицами (кватернионы) [2] также можно связать с кососимметрическими матрицами 4-го порядка [3] вида

$$\begin{pmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & -d & -c \\ c & d & a & -b \\ d & -c & b & a \end{pmatrix}.$$

Сохранение свойств арифметических действий проверяется непосредственно.

Комплексные числа и кватернионы имеют широкое применение в различных областях физики, техники и математики. Матричный аппарат также актуален в научных и технических задачах.

Литература

1. Грин Х. Матричная квантовая механика. – Н: ИО НФМИ, 2000. – 160 с.
2. Понтрягин Л.С. Обобщения чисел. – М.: Наука Физматлит, 1986. – 120 с.
3. Балк М.Б., Балк Г.Д., Полухин А.А. Реальные применения мнимых чисел. – К.: Рад. шк., 1988. – 255 с.

ОБ ОДНОМ ИНТЕГРАЛЬНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ДЗЕТА- ФУНКЦИИ КОРНЕЙ ГОЛОМОРФНОЙ ФУНКЦИИ

Кузоватов Вячеслав Игоревич

Сибирский федеральный университет, г.Красноярск, Россия

Вопрос об интегральном представлении для дзета-функции, ассоциированной с некоторой целой функцией, был рассмотрен В.Б. Лидским и В.А. Садовничим. Этими авторами была рассмотрена целая функция $f(z)$ определенного вида.

Пусть $f(z)$ - целая функция нулевого порядка в \square . Рассмотрим уравнение

$$f(z) = 0. \quad (1)$$

Обозначим через $N_f = f^{-1}(0)$ множество всех корней уравнения (1), каждый корень считается столько раз, какова его кратность. Число корней не более чем счетно.

Наша цель – получить интегральное представление для дзета-функции $\zeta_f(s)$ уравнения (1), которая определяется следующим образом:

$$\zeta_f(s) = \sum_{a \in N_f} (-a)^{-s},$$

где $s \in \square$. Знак минус в определении дзета-функции взят только для удобства записи интегральных формул.

Пусть $z = x + iy$. Предположим, что функция f не равна нулю ни в одной точке множества $\square_+ := \{z \in \square : x \geq 0, y = 0\}$. Это означает, что $N_f \cap \square_+ = \emptyset$.

Теорема. Предположим, что $0 < \operatorname{Re} s < 1$. Тогда

$$\zeta_f(s) = \frac{\sin \pi s}{\pi} \int_0^{\infty} \left\{ \frac{f'(x)}{f(x)} - \omega_0 \right\} x^{-s} dx,$$

где ω_0 есть предельное значение для выражения $\frac{f'(x)}{f(x)}$ на бесконечности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты 14-01-00283, 15-01-00277)

**НАХОЖДЕНИЕ СТЕПЕННЫХ СУММ КОРНЕЙ СИСТЕМ
НЕАЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СПЕЦИАЛЬНОГО ТИПА**

Мышкина Евгения Константиновна
Сибирский федеральный университет, г. Красноярск, Россия

Рассмотрим систему функций

$$f_i(z) = q_i + Q_i(z) = (1 - a_{i1}z_1)^{m_{i1}} \cdots (1 - a_{in}z_n)^{m_{in}} + Q_i(z), i = 1, \dots, n,$$

m_{ij} - натуральные числа, a_{ij} - комплексные числа, различные при каждом фиксированном j , $Q_i(z)$ - целые функции. Система уравнений имеет $n!$ изолированных корней в $\overline{\mathbb{C}^n}$. Пусть $J = (j_1, \dots, j_n)$ мультииндекс, являющийся перестановкой $(1, \dots, n)$, тогда эти корни можно записать

$$\bar{a}_j = \begin{cases} (a_{1j_1}, \dots, a_{nj_n}), & \text{если все } a_{kj_k} \neq 0, \\ (a_{1j_1}, \dots, 0_{[i_1]}, \dots, 0_{[i_k]}, \dots, a_{nj_n}), & \text{если все } a_{i_1j_{i_1}} = \dots = a_{i_kj_{i_k}} = 0, \end{cases}$$

$$Q_i(z) = z_1 \cdots z_n \sum_{|\alpha| > 0} C_{\alpha}^i z^{\alpha}.$$

Пусть теперь $Q_i(z)$ - многочлены вида $z^{\alpha} = z_1^{\alpha_1} \cdots z_n^{\alpha_n}$ и $\deg_{z_j} Q_i \leq m_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n$ для тех a_{ij} , для которых $a_{ij} \neq 0$. Если $a_{ij} = 0$, то ограничений на степень $\deg_{z_j} Q_i$ нет.

Сделаем теперь замену $z_j = \frac{1}{w_j}$, предполагая, что все $w_j \neq 0$. Обозначим

через \tilde{G}_i функции $\tilde{G}_i(w) = \tilde{q}_i(w) + \tilde{Q}_i(w)$, где $\tilde{q}_i(w)$ функции $\tilde{q}_i(w) = (w_1 - a_{i1})^{m_{i1}} \cdots (w_n - a_{in})^{m_{in}}$, \tilde{Q}_i многочлены вида

$$\tilde{Q}_i = w_1^{m_{i1}} \cdots w_n^{m_{in}} \cdot Q_i\left(\frac{1}{w_1}, \dots, \frac{1}{w_n}\right).$$

$z_j = z_{j1}, \dots, z_{jn}$, $j = 1, \dots, p$ - корни нашей системы.

Теорема. Для системы с функциями f_j, Q_j , определенных выше

$$\sum_{j=1}^p \frac{1}{z_1^{y_1+1} \cdots z_n^{y_n+1}} = \sum_{K \in \mathbb{N}^n} (-1)^{|K|} \sum_J (-1)^{s(J)} \frac{1}{\beta(K, J)!} \cdot \frac{\partial^{|\beta|}}{\partial w^{\beta}} \left[\tilde{\Delta} \cdot w_1^{y_1+1} \cdots w_n^{y_n+1} \cdot \frac{\tilde{Q}^K(w)}{\tilde{q}^{K+1}(w)} \right]_{w=\bar{a}_j}$$

где множество

$\mathfrak{K} = \{K = (k_{11}, \dots, k_{1n}) \mid \exists i: \gamma_{1i} + 2 > \|K\| \quad \mathbb{K} = k_{11} + \dots + k_{1n}, \quad i = (1, n)\}$
 $(-1)^{s(J)} = 1$, когда J – четная перестановка и $(-1)^{s(J)} = -1$, когда J –
 нечетная перестановка $q^{K+J}(J) = q_{11}^{k_{11}+1}[i_{11}] \cdot \dots \cdot q_{nn}^{k_{nn}+1}[i_{nn}]$, а $q_j[i_j]$ – все
 $(w_{11} - a_{j1})^{m_{j1}} \cdot \dots \cdot (w_{1n} - a_{jn})^{m_{jn}}$ кроме $(w_{ij} - a_{ji})^{m_{ji}}$, Δ – якобиан нашей
 системы,

$$\beta(K, J) = (m_{1i_1} \cdot (k_{i_1} + 1) - 1, \dots, m_{ni_n} \cdot (k_{i_n} + 1) - 1),$$

$$\beta(K, J)! = \prod_j (m_{ji_j} \cdot (k_{ij} + 1) - 1)!, \quad \frac{\partial \|\beta\|}{\partial w^\beta} = \frac{\partial^{m_{1i_1} \cdot (k_{i_1} + 1) - 1 + \dots + m_{ni_n} \cdot (k_{i_n} + 1) - 1}}{\partial w_{11}^{m_{1i_1} \cdot (k_{i_1} + 1) - 1} \cdot \dots \cdot \partial w_{nn}^{m_{ni_n} \cdot (k_{i_n} + 1) - 1}}$$

ОПЕРАТОР ОБОБЩЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

Рахимова А.И., Напалков В.В.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

Обобщенное пространство Фока по определению имеет вид: $\beta > 0$,

$$F_\beta = \left\{ f(z) \in H(\mathbf{C}): \|f\|^2 = \frac{1}{\pi \frac{2}{\beta} \Gamma\left(\frac{2}{\beta}\right)} \int_{\mathbf{C}} |f(z)|^2 e^{-|z|^\beta} d\mu < \infty \right\} \quad \text{где } d\mu \text{ —}$$

мера Лебега на плоскости. Введем обозначение $k = \frac{2}{\beta}$. F_β является гильбертовым пространством. Рассмотрим функции $f(z), g(z) \in F_\beta$, их

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n$$

можно представить в виде . Оператор обобщенного дифференцирования, сопряженный к оператору умножения на

$$\text{переменную } z \quad Sf(z) = z \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad Df(z) = \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} b_n m_n z^n, \quad \text{имеет вид}$$

$$m_n = \frac{\Gamma\left(\frac{2}{\beta}(n+1)\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{\beta}n\right)} \quad n \geq 1, \quad m_0 = 0. \quad [1]$$

Теорема 1. Оператор, сопряженный к оператору умножения на переменную z $S = z \cdot$, имеет вид

$$S^* = c_1 \frac{d}{dz} + c_2 z \frac{d^2}{dz^2} + \dots + c_{n-1} z^{n-2} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} + c_n z^{n-1} \frac{d^n}{dz^n} + \dots, \quad n \leq n_0,$$

где порядок оператора n_0 конечный или бесконечный, причем его

$$\text{коэффициенты такие, что} \quad \sum_{s=1}^n \frac{c_s n!}{(n-s)!} = \frac{\Gamma\left(\frac{2}{\beta}(n+1)\right)}{\Gamma\left(\frac{2}{\beta}n\right)}, \quad n = \overline{(1; n_0)}.$$

Если k — целое число, то дифференциальный оператор S^* конечный порядка k , если k — нецелое число, то дифференциальный оператор S^* бесконечный.

Оператор дифференцирования S^* совпадает с оператором обобщенного дифференцирования D .

Теорема 2. Коэффициенты дифференциального оператора

$$S^* = c_1 \frac{d}{dz} + c_2 z \frac{d^2}{dz^2} + \dots + c_{n-1} z^{n-2} \frac{d^{n-1}}{dz^{n-1}} + c_n z^{n-1} \frac{d^n}{dz^n} + \dots$$

$$c_n = \sum_{s=1}^n \frac{(-1)^{n-s} \Gamma\left(\frac{2}{\beta}(s+1)\right)}{s! (n-s)! \Gamma\left(\frac{2}{\beta}s\right)}, \quad n = \overline{(1; n_0)},$$

вычисляются по формуле

n_0 — порядок дифференциального оператора, и верно неравенство $\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|c_n|} < \infty$.

Литература:

1. Дильмухаметова А.М., Муллабаева А.У., Напалков В.В. *Обобщение пространства Фока* // Уфимский математический журнал. 2010. Т. 2, №1. С. 52 – 58.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ФЛЕКСОМАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В (111)- ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПЛЕНКАХ ФЕРРИТОВ-ГРАНАТОВ

Файзуллина А.М.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

В последнее время существенно вырос интерес к исследованию свойств материалов в которых наблюдается два и более видов упорядочения (мультиферроики), в частности электрическое и магнитное [1]. К таким материалам относятся и кристаллы ферритов-гранатов, в которых недавно был обнаружен гигантский неоднородный магнитоэлектрический эффект (НМЭ) при комнатных температурах [2]. Интересной особенностью проявления НМЭ эффекта в феррит-гранатовых пленках была его сильная зависимость от ориентации пленок: эффект смещения доменных границ под действием электрического поля, создаваемое заряженной иглой, поднесенной к поверхности пленок был осуществлен и для пленок с ориентацией (210) более слабо проявлялся – с ориентацией (011) и вовсе отсутствовал в (111)-ориентированных пленках. Было предположено, что такая зависимость может быть объяснена структурой доменных границ, возникающих в этих образцах.

В данной работе исследуются топологические особенности и свойства 180-градусных доменных границ возможных в феррит-гранатовых пленках с ориентацией (111) и изучается флексомагнитоэлектрический механизм трансформации их структуры под действием электрического поля. Показано, что в этом случае типология ДГ представляет квазиблоховскую стенку с выходом вектора намагниченности из ее плоскости, который характеризуется углом φ . Зависимость последней от координаты y такова, что электрическое поле, создаваемое возникающими в ДГ зарядами, в среднем равно нулю.

Литература

1. Пятаков А.П., Звездин А.К. УФН, 182, 593-620 (2012)
3. Логинов А.С., Мешков Г.А., Николаев А.В., Пятаков А.П. Письма в ЖЭТФ. т. 86, №2, 124 – 127 (2007)

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ»

УДК 517.94

ТЭКЛИНДОВСКИЙ КЛАСС ЕДИНСТВЕННОСТИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ЧЕРЕДОВАНИЕМ ТИПА КРАЕВОГО УСЛОВИЯ

Васильев Михаил Алексеевич., (БГПУ им. М.Акумуллы, г.Уфа, Россия)
Вильданова Венера Фидарисовна (БГПУ им. М.Акумуллы, г.Уфа, Россия)

Рассмотрим смешанную задачу для параболического уравнения второго порядка

$$u_t = \sum_{i,j=1}^n (a_{ij}(t,x)u_{x_i})_{x_j} \quad (1)$$

с сочетающимися краевыми условиями первого и третьего типа:

$$u(t,x)|_{\Gamma_1} = 0; \quad \frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma_2} = 0, \quad u(0,x) = \varphi(x). \quad (2)$$

Здесь Ω — неограниченная область пространства R^n . На симметричные коэффициенты $a_{ij} = a_{ji}$ накладывается условие равномерной эллиптичности.

Целью работы является выделение класса единственности решений рассматриваемой задачи (1), (2), включающего в себя ограниченные в каждом слое $(0, T) \times \Omega$ функции.

Теорема. Если обобщенное решение задачи (1), (2) в области D^T с равной нулю начальной функцией ($\varphi \equiv 0$) удовлетворяет условию: существует такая монотонно неубывающая на полуоси $[1; +\infty)$

положительная функция $h(r)$, что интеграл $\int_1^{\infty} \frac{dr}{h(r)}$ расходится и для всех

$r \geq 1 \int_0^T \int_{\Omega(r)} u^2(t,x) dt dx \leq e^{rh(r)}$, то оно тождественно равно нулю, где

$\Omega(r) = \{x \in \Omega \mid |x| < r\}$.

ОБ АСИМПТОТИКЕ КРАТНОГО СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА ПРИ ПЕРФОРАЦИИ ВДОЛЬ ГРАНИЦЫ

Гадыльшин Рустем Рашитович, Кожевников Денис Владимирович
Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акмуллы,
г.Уфа, Россия

Пусть Ω — ограниченная область в R^2 , лежащая в верхней полуплоскости, граница которой Γ состоит из двух частей: $\Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$, где Γ_1 — отрезок $[0, 1]$ на оси абсцисс, Γ_2 — гладкая и в окрестности концов отрезка Γ_1 совпадает с прямыми $x_1 = 0$ и $x_1 = 1$ соответственно. Далее, пусть B — произвольная ограниченная двумерная область с гладкой границей. Обозначим $B_a = \{x : (a^{-1}x_1 - b, a^{-1}x_2 - c) \in B\}$, где $0 < b < 1$, $c > 0$ — любые фиксированные числа, $a > 0$ — достаточно малый параметр, такой, что $\overline{B_a}$ лежит в полуполосе $\Pi = (0, 1) \times (0, \infty)$. Всюду $0 < \varepsilon = N^{-1}$ — малый параметр, где $N \gg 1$ — натуральное число.

Обозначим $B_{\varepsilon, a}^j = \{x : \varepsilon^{-1}(x_1 - j, x_2) \in B_a\}$, $j \in Z$, $B_{\varepsilon, a} = \bigcup_{j=0}^{N-1} B_{\varepsilon, a}^j$,

$\Gamma_{\varepsilon, a} = \partial B_{\varepsilon, a}$. Определим область $\Omega_{\varepsilon, a}$ как $\Omega \setminus \overline{B_{\varepsilon, a}}$

В [1] показано, что при $\varepsilon \ln a \rightarrow 0$ решения краевой задачи

$$-\Delta u_{\varepsilon, a} = \lambda_{\varepsilon, a} u_{\varepsilon, a} \text{ в } \Omega_{\varepsilon, a}, \quad u_{\varepsilon, a} = 0 \text{ на } \Gamma_{\varepsilon, a}, \quad \frac{\partial u_{\varepsilon, a}}{\partial \nu} = 0 \text{ на } \Gamma, \quad (1)$$

где ν — вектор внешней нормали, сильно сходятся к решениям задачи

$$-\Delta u_0 = \lambda_0 u_0 \text{ в } \Omega, \quad u_0 = 0 \text{ на } \Gamma_1, \quad \frac{\partial u_0}{\partial \nu} = 0 \text{ на } \Gamma \setminus \overline{\Gamma_1}. \quad (2)$$

Методом согласования асимптотических разложений построены двучленные асимптотики собственных значений краевой задачи (1), сходящиеся к n -кратному собственному значению предельной спектральной задачи (2).

Работа первого автора выполнена в рамках Государственного задания Минобрнауки РФ. Работа второго автора поддержана грантом РФФИ (проект No 15-01-07920 А).

Литература

[1] Гадыльшин Р.Р., Кожевников Д.В. Об усреднении краевой задачи в области, перфорированной вдоль части границы // Проблемы математического анализа, 2014, Вып. 75, с. 41-59.

АСИМПТОТИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА ВНЕ МАЛОЙ ОКРЕСТНОСТИ ОТРЕЗКА

Ершов Александр Анатольевич

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Потенциал скоростей $u(x_1, x_2, \varepsilon) \in C^\infty(\mathfrak{R}^2 \setminus \sigma_\varepsilon)$ идеальной жидкости моделируется с помощью решения следующей краевой задачи:

$$\begin{cases} \Delta u = 0, & x \in \mathfrak{R}^2 \setminus \sigma_\varepsilon, \\ \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = 0, & x \in \partial \sigma_\varepsilon, \\ u = x_2 + o(1), & |x| \rightarrow +\infty, \end{cases}$$

где $x = (x_1, x_2)$, \mathbf{n} – внешняя нормаль, σ_ε – некоторая окрестность отрезка $\bar{\sigma} = \{(x_1, x_2) : 0 \leq x_1 \leq 1, x_2 = 0\}$, ширина которой характеризуется малым параметром $0 < \varepsilon \ll 1$, и с границей $\partial \sigma_\varepsilon \in C^\infty$.

Методом согласования асимптотических разложений [1] построено двухмасштабное асимптотическое разложение функции $u(x_1, x_2, \varepsilon)$ по малому параметру ε с точностью до решения краевых задач.

Внешнее асимптотическое разложение найдено в виде ряда

$$U = \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k u_k(x),$$

где $u_k(x)$ – решения краевых задач, $u_0(x) = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \sqrt{(2x_1 - 1 + 2ix_2)^2 - 1}$

(ветвь корня выбирается из условия $u_0(x) \sim x_2$ при $x_2 \rightarrow +\infty$).

В данной работе направление обтекания перпендикулярно направлению, рассмотренному в работе [1, гл. III, § 2], в которой была построена асимптотика функции тока, моделируемой с помощью решения первой краевой задачи для уравнения Лапласа вне той же малой окрестности отрезка.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ (проект № 15-11-10018).

Литература

[1] Ильин А. М. Согласование асимптотических разложений решений краевых задач. М.: Наука, 1989. – 256 с.

**ОЦЕНКИ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ С
НЕСТЕПЕННЫМИ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ
В НЕОГРАНИЧЕННЫХ ОБЛАСТЯХ**

Л.М. Кожевникова, Р.Х. Каримов, А.А. Хаджи

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
Россия

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
Россия

Тюменский государственный университет, Россия

Пусть Ω - произвольная неограниченная область пространства $\mathbf{R}_n = \{x = (x_1, x_2, \dots, x_n)\}$, $\Omega \subset \mathbf{R}_n$, $n \geq 2$. Для анизотропных квазилинейных эллиптических уравнений второго порядка рассматривается задача Дирихле

$$\sum_{\alpha=1}^n \square (a_\alpha(x, u, \nabla u))_{x_\alpha} - a_0(x, u, \nabla u) = 0, \quad x \in \Omega; \quad (1)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (2)$$

Предполагается, что функции $a_\alpha(x, s_0, s)$, $\alpha = 0, \dots, n$, измеримы по $x \in \Omega$ для $s = (s_0, s) = (s_0, s_1, \dots, s_n) \in \mathbf{R}_{n+1}$, непрерывны по $s \in \mathbf{R}_{n+1}$ для почти всех $x \in \Omega$. Пусть существуют измеримые неотрицательные функции $\psi(x), \Psi(x) \in L_{1,loc}(\bar{\Omega})$ и положительные числа \bar{a}, \hat{A} такие, что для п.в. $x \in \Omega$ и $s = (s_0, s), t = (t_0, t) \in \mathbf{R}_{n+1}$, $s \neq t$ справедливы неравенства:

$$\sum_{\alpha=0}^n \square a_\alpha(x, s_0, s) s_\alpha \geq \bar{a} \sum_{\alpha=0}^n \square B_\alpha(s_\alpha) - \psi(x); \quad (3)$$

$$\sum_{\alpha=0}^n \square \bar{B}_\alpha(a_\alpha(x, s_0, s)) \leq \hat{A} \sum_{\alpha=0}^n \square B_\alpha(s_\alpha) + \Psi(x); \quad (4)$$

$$\sum_{\alpha=0}^n \square (a_\alpha(x, s_0, s) - a_\alpha(x, t_0, t))(s_\alpha - t_\alpha) > 0. \quad (5)$$

Считаем, что N -функции $B_0(z), B_1(z), \dots, B_n(z)$ и дополнительные к ним $\bar{B}_0(z), \bar{B}_1(z), \dots, \bar{B}_n(z)$ удовлетворяют Δ_2 -условию.

В качестве примера можно рассмотреть уравнение

$$\sum_{\alpha=1}^n \left[B'_\alpha(u_{x_\alpha}) + f_\alpha(x) \right] - B'_0(u) - f_0(x) = 0 \quad (6)$$

с непрерывно дифференцируемыми N -функциями $B_0(z), B_1(z), \dots, B_n(z)$. Для уравнения (6) все условия (3)–(5) выполняются.

В работе [1] Л.М. Кожевниковой, А.А. Хаджи для уравнения (1) с функциями, подчиняющимися условиям (3)–(5), доказано существование решений однородной задачи Дирихле в произвольных неограниченных областях. При дополнительных требованиях на структуру уравнения установлена единственность решения задачи (1), (2).

В настоящей работе получены оценки, характеризующие поведение решений задачи (1), (2) при $|x| \rightarrow \infty$ в неограниченных областях Ω . Оценка степенного характера установлена для решений анизотропных уравнений в произвольных неограниченных областях. А для "нешироких" неограниченных областей установлена экспоненциальная оценка убывания на бесконечности решений изотропных уравнений.

Сначала приведем некоторые сведения из теории N -функций [2]. Неотрицательная непрерывная выпуклая вниз функция $M(z), z \in \mathbb{R}$, называется N -функцией, если она четна и

$$\lim_{z \rightarrow 0} \frac{M(z)}{z} = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{M(z)}{z} = \infty.$$

N -функция

$$M(z) = \sup_{y \geq 0} (y|z| - M(y))$$

называется дополнительной к N -функции $M(z)$.

N -функция $M(z)$ удовлетворяет Δ_2 -условию, если существуют такое число $c > 0$, что $M(2z) \leq cM(z)$ для любых $z \in \mathbb{R}$.

Для N -функций $B(z)$ и $M(z)$ записывают $B(z) \prec M(z)$, если существуют числа $l > 0$ и $z_0 \geq 0$ такие, что $B(z) \leq M(lz)$, $z \geq z_0$.

$$0 < \varepsilon < 1$$

Будем считать, что существует такое ε , что выполнены условия $B_\alpha(z^{1+\varepsilon}) \prec B_0(z)$, $\alpha = 1, 2, \dots, n$. (1)

В работе [1] доказана

Теорема 1.1 Пусть выполнены условия (3) – (5), (30), тогда существует обобщенное решение $u(x)$ задачи (1), (2).

Обозначим
$$B(v) = B_0(v) + \sum_{\alpha=1}^n B_\alpha(v_{x_\alpha}),$$
 $\|v\|_{1,Q}$ - норма в пространстве $L_1(Q)$.

Степенная оценка решения задачи (1), (2) получена при условии, что:

$$B_\alpha(z) = c_\alpha |z|^{p_\alpha}, \quad |z| \leq 1, \quad p_\alpha > 1, \quad c_\alpha > 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, n. \quad (31)$$

Заметим, что для произвольной N -функции $\tilde{B}(z)$ такую функцию легко построить:

$$B(z) = \begin{cases} \tilde{B}(1)|z|^p, & |z| \leq 1; \\ \tilde{B}(z), & |z| > 1, \end{cases} \quad p = \frac{\tilde{b}(1)}{\tilde{B}(1)} > 1.$$

Считаем, что показатели $p_\alpha, \alpha = 1, \dots, n$ упорядочены: $p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_n$ и подчиняются условиям:

$$p_0 > p_1, \quad \sum_{\alpha=1}^n \frac{1}{p_\alpha} > 1. \quad (2)$$

Тогда числа $q_\alpha = \frac{p_0 p_\alpha}{p_0 - p_\alpha}, \alpha = 1, \dots, n,$ также упорядочены: $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_n$. Предполагаем, что

$$q_n > n. \quad (3)$$

Теорема 22. Пусть выполнены условия (3) – (5), (30) – (33). Тогда для обобщенного решения задачи (1), (2) справедлива оценка

$$\|B(u)\|_{1,\Omega(\frac{r}{2})} \leq \mathcal{M}_1(r^{n-q_n} + \|\psi + \Psi\|_{1,\Omega(2r)}), \quad (34)$$

$r > 2$, в которой $\Omega(r) = \{x \in \Omega \mid |x| < r\}$.

В частности, из оценки (34) при $\psi = \Psi = 0$ в $\Omega(2r)$ следует, что скорость убывания решения задачи (1), (2) на бесконечности не ниже степенной.

Условия теоремы 2 выполнены, например, для уравнения (6) с функциями

$$B_\alpha(z) = \begin{cases} |z|^{p_\alpha}, & |z| \leq 1; \\ |z|^{p_\alpha-1}(\ln|z| + 1), & |z| > 1 \end{cases}$$

при подходящем выборе $p_\alpha > 2, \alpha = 0, 1, \dots, n.$

В следующей теореме установлена экспоненциальная оценка решения изотропного уравнения (1)

$$B_\alpha(z) = B(z), \quad \alpha = 1, 2, \dots, n, \quad (4)$$

в областях, подчиняющихся условию

$$d(r) = \text{diam } \gamma(r) \leq D, \quad r \geq r_1. \quad (5)$$

Теорема 3.3 Пусть выполнены условия (3) – (5), (30), (35), (36). Тогда существуют положительные числа κ , \mathcal{M}_2 , r_0 такие, что решение $u(x)$ задачи (1), (2) при всех $r \geq r_0$ подчиняется оценке

$$\|V(u)\|_{1,\Omega(\frac{r}{2})} \leq \mathcal{M}_2 (\exp(-\kappa r) r^{n-1} + \|\psi + \Psi\|_{1,\Omega(2r)}). \quad (37)$$

Из оценки (37) следует, что скорость убывания решения при $|x| \rightarrow \infty$ в неограниченных областях, которые не расширяются на бесконечности, имеет по крайней мере экспоненциальный характер.

Полученные в работе результаты, согласуются с результатами статьи [2]. В ней О.А. Олейник и Ж.И. Диаз установили априорные оценки решения краевой задачи в неограниченных областях с однородными граничными условиями первого и второго типа (в частности задач Дирихле и Неймана) для полулинейных уравнений с переменными коэффициентами, на основе которых доказали существование и единственность решения.

Работа выполнена при поддержке СФ БашГУ (грант В15-13).

Литература

1. Кожевникова Л.М., Хаджи А.А. *Существование решений анизотропных эллиптических уравнений с нестепенными нелинейностями в неограниченных областях* // Матем. сб., 2015, 206:8 (2015), с. 99-126.
2. Рutiцкий Я.Б., Красносельский М.А. *Выпуклые функции и пространства Орлича* / М.: Гос. издательство физ.-мат. лит.-ры, 1958, 587 с.
3. Diaz J.I., Oleinik О.А. *Nonlinear elliptic boundary-value problems in unbounded domains and the asymptotic behaviour of its solution* // C. R. Acad, Sci. Paris, 1992, v. 315, № 1, p. 787-792.

ПОСТРОЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ С БЫСТРО ОСЦИЛЛИРУЮЩИМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

Мулюков А.Л.

Уфимский государственный авиационный технический университет, г.

Уфа, Россия

Рассмотрим следующую краевую задачу:

$$\frac{d}{dx} \left(a \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) \frac{du_\varepsilon}{dx} \right) + \alpha q \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) p(u_\varepsilon) = f(x), \quad x \in (0, 1), \quad u_\varepsilon(0) = u_\varepsilon(1) = 0,$$

где $p(u_\varepsilon) \in C^\infty(\mathbb{R})$; $a(\xi), q(\xi) \in C^\infty[0, 1]$ – 1-периодические функции по ξ , а $\varepsilon = \mathbb{N}^{-1}$, где \mathbb{N} -большое натуральное число.

Пусть $p(0) = 0, a(\xi) > \nu > 0$.

$$\exists L \geq 0: \forall u_1, u_2 \in \mathbb{R}, |p(u_1) - p(u_2)| \leq L|u_1 - u_2|.$$

Будем искать решение краевой задачи в виде:

$$u(x, \xi) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k(x, \xi) \varepsilon^k, \quad \text{где } u_k(x, \xi) \in C^\infty([0, 1] \times \mathbb{R}) \text{ – 1-}$$

периодические функции по переменной ξ , называемой быстрой.

В ходе построения асимптотики определены краевые задачи для определения всех членов асимптотического разложения $u_k(x, \xi)$, получена равномерная оценка решения, доказано его существование и единственность, а также равномерная сходимость частичной суммы ряда

$$\sum_{k=0}^n u_k(x, \xi) \varepsilon^k$$

к решению краевой задачи.

Литература

1. Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.А. Вазов В. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний, М.: Наука, 1974.
2. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. М.: Мир, 1984.
3. Р.Р. Гадьльшин Дополнительные главы дифференциальных уравнений

БИФУРКАЦИЯ СУБГАРМОНИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ СИСТЕМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Фазлытдинов Марат Флюрович

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассматривается динамическая система, зависящая от скалярного или векторного параметр μ и описываемая дифференциальным уравнением вида

$$x' = B(\mu)x + b(x, \mu, t), \quad x \in R^N, \quad N \geq 2, \quad (1)$$

где $B(\mu)$ квадратная матрица порядка N , нелинейность $b(x, \mu, t)$ является T периодической по t , то есть $b(x, \mu, t + T) = b(x, \mu, t)$ и удовлетворяет условию $|b(x, \mu, t)| = O(|x|^2)$ при $|x| \rightarrow 0$. Предполагается, что правая часть уравнения (1) гладко зависит от параметра μ , нелинейность $b(x, \mu, t)$ непрерывно дифференцируема по x и непрерывна по t . Система (1) имеет решение $x = 0$ при любых значениях параметра μ .

В настоящей работе рассматривается задача о бифуркации ненулевых qT -периодических решений в окрестности точки равновесия $x = 0$. Приведем соответствующее определение (см. например [Ошибка! Источник ссылки не найден.]).

Говорят, что значение μ^* параметра μ является точкой бифуркации qT -периодических решений системы (1), если существует непрерывная функция $\mu = \mu(\varepsilon)$, определенная в некотором промежутке $[0, \varepsilon_0)$ такая, что

1. $\mu(0) = \mu^*$;
2. при $\mu = \mu(\varepsilon)$ и $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ система (1) имеет ненулевое qT -периодическое решение $x = x(t, \varepsilon)$, которое непрерывно зависит от ε и удовлетворяет условию $\max_t |x(t, \varepsilon)| \rightarrow 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0$.

Функции $\mu(\varepsilon)$ и $x(t, \varepsilon)$ называются бифурцирующими решениями системы (1). Необходимым условием бифуркации qT -периодических решений системы (1) является требование, чтобы матрица $B(\mu^*)$ имела собственное значение вида

Литература

1. Арнольд В.И. Геометрические методы в теории обыкновенных дифференциальных уравнений. - Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2000.

2. Юмагулов М.Г. Локализация языков Арнольда дискретных динамических систем. Уфа. Уфимский математический журнал. Том 5, № 2 (2013). С. 109-131.

3. Юмагулов М.Г. Операторный метод исследования правильной бифуркации в многопараметрических системах. Доклады АН. Том 424, №2 (2009). С. 177-180.

4. Вышинский А.А., Ибрагимова Л.С., Муртазина С.А., Юмагулов М.Г. Операторный метод приближенного исследования правильной бифуркации в многопараметрических динамических системах. Уфа. Уфимский математический журнал. Том 2, № 4 (2010). С. 3-26.

5. Фазлытдинов М.Ф., Юмагулов М.Г. Признаки устойчивости циклов в задачах о Языках Арнольда. Магнитогорск. Математическое и программное обеспечение систем в промышленной и социальной сферах. № 2(5) (2014). С. 19-23.

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ИНТЕГРАЛАМИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Юрьева А.М.

Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Основополагающие идеи в изучении проблемы интегрирования уравнений в частных производных гиперболического типа восходят к классическим работам Лапласа, Дарбу, Гурса, Вессиио и др.

В данной работе рассматриваются уравнения вида

$$u_{xy} = \frac{p - \bar{\varphi}_u}{\bar{\varphi}_{u_y}} u_x + \frac{q}{\bar{\varphi}_{u_y}} \sqrt{u_x} \quad (1)$$

здесь p, q - функции переменных x, y, u , а $\bar{\varphi}$ - переменных x, y, u, u_y .

В работе приводятся условия, при которых уравнения вида (1) обладают интегралами второго порядка.

Для полной классификации уравнений, интегрируемых по Дарбу, согласно статьи [1] необходимо провести классификацию уравнений типа (1), обладающих интегралами второго порядка.

Описываются уравнения (1), обладающие интегралами второго порядка.

Показывается, что уравнения Лэне

$$u_{xy} = \left(\frac{u_y}{u-x} + \frac{u_y}{u-y} \right) u_x + \frac{u_y}{u-x} \sqrt{u_x} \quad (2)$$

и

$$u_{xy} = 2 \left[(u+Y)^2 + u_y + (u+Y) \sqrt{(u+Y)^2 + u_y} \right] \times \left[\frac{\sqrt{u_x} + u_x}{u-x} - \frac{u_x}{\sqrt{(u+Y)^2 + u_y}} \right], \quad (3)$$

$$Y = Y(y)$$

содержатся в классе уравнений (1). Последние обладают интегралами второго порядка.

Литература

1. Жибер А.В., Соколов В.В. Точно интегрируемые гиперболические уравнения лувилевского типа // Успехи матем. наук. 2001. Т. 56. №1(337). С.63-106.
2. Жибер А.В., Соколов В.В. Метод каскадного интегрирования Лапласа и уравнения, интегрируемые по Дарбу: Учебное пособие // Изд-е Башкирск. ун-та. - Уфа, 1996. - с.56.
3. Lainé M.E. Sur l'application de la méthode de Darboux aux équations $s = f(x, y, z, p, q)$ // Comptes rendus. V. 182. 1926. P. 1127-1128.
4. Lainé M.E. Sur une équation de la forme $s = f(x, y, z, p, q)$ qui sont de la première classe // Comptes rendus. V. 184. 1927. P. 1430-1431.

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ»

УДК 514.122.3, 512.763, 512.647, 511.343

О КЛАССИФИКАЦИИ КУБИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ \mathbf{R}^2

Шарипов Р. А.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Полиномиальные, и в частности кубические, преобразования \mathbf{X}^2 и \mathbf{R}^2 вызывают интерес в связи с проблемой якобиана (см. [1–3]):

$$y^i = \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^2 \sum_{p=1}^2 F_{mnp}^i x^m x^n x^p + \dots \quad (1)$$

Мой интерес к ним связан с задачей о совершенном кубоиде (см. [4]). В работе [5] было показано, что преобразования (1) порождают шесть форм четвёртой степени от двух и четырех переменных. Это обобщения квадратичных форм при повышении степени с 2 до 4, они связаны с симметрическими тензорами валентности (0,4). При помощи одной из этих форм $\omega[1]$ в работе [6] была построена классификация потенциально обратимых преобразований вида (1). На данный момент классификация из [6] является грубой и рамочной. Предполагается, что в дальнейшем каждый из её четырёх пунктов будет дробиться на подпункты с использованием форм $\omega[2]$, $\omega[3]$, $\omega[4]$, $\omega[5]$ и возможно некоторых других тензорных инвариантов преобразований вида (1), которые ещё предстоит найти и каталогизировать. Хотя, частично, такое дробление уже произведено в работе [6].

Литература

1. Оревкин С. Ю., О трехлистных полиномиальных отображениях \mathbf{X}^2 // Изв. АН СССР, Сер. матем., 1986, Т. 50, № 6, С. 1231–1240.
2. Pinchuk S. I., A counterexample to the strong real Jacobian conjecture // *Mathematische Zeitschrift*, 1994, V. 217, P. 1–4.
3. Домрина А. В., Оревкин С. Ю., О четырехлистных полиномиальных отображениях \mathbf{X}^2 . Случай неприводимой кривой ветвления // *Мат. заметки*, 1998, Т. 64, № 6, С. 847–862.
4. Sharipov R. A., Asymptotic estimates for roots of the cuboid characteristic equation in the nonlinear region // e-print arXiv:1506.04705.
5. Sharipov R. A., On quartic forms associated with cubic transformations of the real plane // e-print arXiv:1508.03005.
6. Sharipov R. A., A rough classification of potentially invertible cubic transformations of the real plane // e-print arXiv:1508.04703.

© Шарипов Р. А., 2015 г.

СЕКЦИЯ «СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

УДК 517.94

О ФОРМУЛЕ СЛЕДОВ ДЛЯ ВОЗМУЩЕННОГО ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА-БЕЛЬТРАМИ

Атнагулов Арсэн Ильгизович

Башкирский государственный аграрный университет, г.Уфа, Россия

В работе изучается оператор в $L^2(S^2)$:

$$L_0 u = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}$$

и его возмущение $L = L_0 + V$, где V - оператор умножения на функцию $v(\omega)$. Целью работы является ослабление требований на возмущение $v(\omega)$ при вычислении формулы регуляризованного следа для собственных чисел оператора L , которая прежде была получена при условиях $v(\omega) \in C^2(S^2)$ (см., например, работу [1]).

С этой целью в работе более подробно изучаются свойства ядра резольвенты невозмущенного оператора $R_0(z) = (L_0 - z)^{-1}$, которое, как доказывается, сводимо к функциям, выражаемые через функции Бесселя 1 и 2 рода. После чего вторая поправка теории возмущений разбивается на сумму двух интегралов: от 0 до $\pi/2$ и от $\pi/2$ до π . Функции на втором промежутке можно выразить через функции на первом, коэффициенты легко вычисляются. После чего производится оценка отдельных слагаемых в подынтегральных выражениях.

Литература

[1] Садовничий В.А., Фазулин З.Ю. Матем. зам. 2005. Т. 77 вып. 3. с. 434-448.

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВИДА ДЕФЕКТА СТЕРЖНЯ.

Ахтямов А.М., Ахметвалиева Э.Н.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Рассмотрим задачу о продольных колебаниях стержня с упругим закреплением на концах и условиями сопряжения в точке $x = x_c$, описывающими упругое сопряжение (трещину), сосредоточенную массу (полость) описывается следующим уравнением, крайвыми условиями и условиями сопряжения:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left(EF \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \rho F \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v^2 \rho \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \left(I_0 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} \right) = 0,$$

$$a_{11} \cdot u_1 + a_{12} \cdot \frac{\partial u_1}{\partial x} = 0 \text{ при } x=0,$$

$$a_{21} \cdot u_2 + a_{22} \cdot \frac{\partial u_2}{\partial x} = 0 \text{ при } x=L,$$

$$u_2 - u_1 = \frac{(EF)_1}{c} \cdot \frac{\partial u_1}{\partial x} \text{ при } x = x_c,$$

$$(EF)_2 \cdot \frac{\partial u_2}{\partial x} - (EF)_1 \cdot \frac{\partial u_1}{\partial x} = M \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} \text{ при } x = x_c.$$

Путем замены $u(x,t) = y(x) \cos wt$, где $w = a\lambda$, $a^2 = \frac{E}{\rho}$, $\lambda \in \mathbb{R}$ (λ – параметр) получаем спектральную задачу:

$$y'' + p(x, \lambda) \cdot y = 0,$$

$$a_{11} \cdot y_1 + a_{12} \cdot y_1' = 0 \text{ при } x=0,$$

$$a_{21} \cdot y_2 + a_{22} \cdot y_2' = 0 \text{ при } x=L,$$

$$y_2 - y_1 = b \cdot y_1' \text{ при } x = x_c,$$

$$k \cdot y_2' - y_1' = -d\lambda^2 y_1 \text{ при } x = x_c.$$

Для обратной задачи доказаны теоремы об однозначном определении одного из видов дефекта стержня (трещина, сосредоточенная масса, или полость) по одной или двум собственным частотам продольных колебаний стержня. Найдены условия на собственные частоты, при которых можно однозначно определить вид дефекта и его соответствующий параметр.

**INVERSE STURM-LIOUVILLE PROBLEM WITH SPECTRAL
POLINOMIALS IN BOUNDARY CONDITIONS**

Akhtyamov A.M.¹, Mamedov Kh.R.², Cetinkaya A.F.²

¹Bashkir State University+Mavlutov Institute of Mechanics, Ufa, Russia;

²Mersin University, Mersin, Turkey

Let L denote the Sturm-Liouville problem: $-y'' + q(x)y = \lambda^2 y$,

$$U(y) = y'(0) + (a_{11} + \lambda^2 a_{12})y(0) + h(\lambda)y(\pi) = 0,$$

$$V(y) = (a_{21} + \lambda^2 a_{22})y'(\pi) + (a_{23} + \lambda^2 a_{24})y(\pi) + H(\lambda)y(0) = 0.$$

Here $q(x)$ is a continuous real valued function on the interval $[0, \pi]$, a_{ij} are real constants, $h(\lambda)$ and $H(\lambda)$ are following polynomials:

$$h(\lambda) = a_0 + a_2 \lambda^2 + a_4 \lambda^4 + \dots + a_{2m} \lambda^{2m};$$

$$H(\lambda) = a_1 + a_3 \lambda^3 + a_5 \lambda^5 + \dots + a_{2m-1} \lambda^{2m-1},$$

where m is arbitrary natural number, a_i with $i=0, 1, 2, \dots, 2m$ are real constants.

For the inverse problem of reconstructing Problem L_0 in which all coefficients a_{ij} and a_i are unknown, no uniqueness theorems have been obtained.

Along with problem L, we consider the following problem with separated boundary conditions.

Problem L_j . The Equation (1) with boundary conditions

$$U_1(y) = y'(0) + (a_{11} + \lambda^2 a_{12})y(0) = 0,$$

$$V_1(y) = (a_{21} + \lambda^2 a_{22})y'(\pi) + (a_{23} + \lambda^2 a_{24})y(\pi) = 0.$$

We show that, for unique reconstruction of L_0 we need $2m+1$ eigenvalues of L_0 and a Weyl Function $M(\lambda)$ of an additional problem L_1 with separated boundary conditions. This result generalizes Mamedov and Cetinkaya's uniqueness theorem [1] for inverse Sturm-Liouville problem with separated boundary conditions.

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project 15-01-01095 a), by the Academy of Sciences of the Republic of Bashkortostan (project 14-01-97010-r_povolzh'e) and by the Scientific and Technological Research Council of Turkey (TÜBİTAK).

References

1. Mamedov Kh.R. and Cetinkaya F.A. Eigenparameter dependent inverse boundary value problem for a class of Sturm-Liouville operator // Boundary Value Problems. 2014. Vol. 194, pp. 1-13.

УДК 517.927.25

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЙ СЛЕД ОПЕРАТОРА ШТУРМА – ЛИУВИЛЛЯ С ЛОГАРИФМИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Валиуллина Л.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Для сингулярного оператора Штурма–Лиувилля с медленно растущим потенциалом получено асимптотическое уравнение для спектра. Используя это уравнение, выписаны несколько первых (вплоть до суммируемого остатка) членов асимптотического ряда для собственных чисел при $q=\ln(x+a)$, $a>0$, и найден регуляризованный след. Тем самым показано, что основная трудность в теории следов, связанная с быстрым (в данном случае – экспоненциальным) ростом $N(\lambda)$ может быть преодолена, если известна асимптотика спектра. Ранее (см. [1]) даже при наличии этой асимптотики следы изучались только в случае, когда $N(\lambda)=O(\lambda^a)$.

Литература

1. Садовничий В.А., Подольский В.Е. Следы операторов // Усп. мат. наук, 2006, т. 61, № 5(371), с. 89–156.

**ФОРМУЛЫ ЛЕФШЕЦА ДЛЯ ПОТОКОВ
С НЕПОДВИЖНЫМИ ТОЧКАМИ.**

Павленко Виктор Александрович

Башкирский государственный аграрный университет, г. Уфа, Россия

Формулами Лефшеца для потоков стали интересоваться где-то в 60-х годах 20-го столетия. Выяснилось, что получить формулу Лефшеца для произвольного потока нельзя. Поэтому необходимо накладывать ограничения на исследуемый класс потоков, например, потоки, сохраняющие слоения, то есть потоки, которые переводят слои слоения в слои. Изучать такие потоки предложил Денингер в 1998 году, так как они интересны для исследования глобальных и важных проблем теории чисел. В случае потока без неподвижных точек, формула Лефшеца была доказана Х.А. Альваресом Лопесом и Ю.А. Кордюковым (см. [1]). Однако, в 2001 году, Денингер показал, что особый интерес представляют такие потоки, сохраняющие слоения, которые имеют неподвижные точки. В случае, когда поток имеет неподвижные точки, возникает одна большая проблема, которая заключается в том, что кое-какие операторы не являются ядерными, значит, определить функцию Лефшеца так, как было сделано в случае, когда поток без неподвижных точек, нельзя. Поэтому мы построили специальную алгебру операторов и определили регуляризованный след для операторов и з этой алгебры. Это было сделано в работе [2].

В данной работе мы рассматриваем два случая. В обоих случаях мы рассматриваем поток, который сохраняет слоение, имеет конечное число неподвижных точек и удовлетворяет ещё кое-каким второстепенным условиям. Первый случай – это случай тривиального слоения: слои задаются слоями некоторого расслоения. Второй случай – это случай нетривиального слоения: это слоение на торе, которое имеет только один компактный слой. Все остальные слои некомпактны и наматываются на него.

Литература

[1] J. Alvarez Lopez, Yu. A. Kordyukov. Distributional Betti numbers of transitive foliations of codimension one. In: *Foliations: Geometry and Dynamics*. (Warsaw, 2000), World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 2002, P.159—183.

[2] Кордюков Ю. А., Павленко В. А. Сингулярные интегральные операторы на многообразии с отмеченным подмногообразием. Уфимск. матем. журн. Т.~6, № 3, 2014, С.35–71

АСИМПТОТИКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ С ГРАНИЧНЫМ УСЛОВИЕМ ДИРИХЛЕ НА КОНЕЧНОМ ЧИСЛЕ МАЛЫХ УЧАСТКОВ ГРАНИЦЫ

Репьевский С.В.¹, Гадыльшин Р.Р.², Шишкина Е.А.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. В ε -окрестностях точек $x_0^{(j)}$, $j = \overline{1, N}$ лежат дуги граничной окружности $\gamma_\varepsilon^{(j)} \in \partial\Omega$. Через γ^ε обозначим объединение всех дуг $\gamma_\varepsilon^{(j)}$.

Рассмотрим краевую задачу

$$-\Delta \psi^\varepsilon = \lambda^\varepsilon \psi^\varepsilon, \quad x \in \Omega, \quad \psi^\varepsilon = 0, \quad x \in \gamma^\varepsilon, \quad \frac{\partial \psi^\varepsilon}{\partial r} = 0, \quad x \in \partial\Omega \setminus \gamma^\varepsilon. \quad (1)$$

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, либо двукратные. Методом согласования асимптотических разложений [2] доказана следующая теорема.

Теорема 1. *Если ни одна из собственных функций соответствующих двукратному собственному значению $\hat{\lambda}_0$, или простому — λ_0 , краевой задачи (2) не равна нулю во всех точках $x_0^{(j)}$, то собственные значения краевой задачи (1): $\lambda^{\varepsilon,0}$ сходящиеся к λ_0 и $\lambda^{\varepsilon,1}$, $\lambda^{\varepsilon,2}$ сходящиеся к $\hat{\lambda}_0$, имеют асимптотики*

$$\lambda^{\varepsilon,i} = \lambda_0 + \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \lambda_j^{(i)} \left(-\frac{1}{\ln \varepsilon} \right), \quad i = \overline{0,2},$$

где функции $z^{[j/2]-1} \lambda_j^{(i)}(z)$ аналитичны в некоторой окрестности нуля.

Работа выполнена в рамках базовой части государственного задания в сфере научной деятельности Минобрнауки России. Первый автор поддержан РФФИ (проект № 15-31-50704).

Литература

1. Гадыльшин 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.

УДК: 517.928.1

О ВОЗМУЩЕНИИ ОПЕРАТОРА ХИЛЛА КОМПЛЕКСНЫМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

Хуснуллин И.Х.

БГПУ им. М. Акмуллы, г. Уфа, Россия

Пусть H_0 самосопряженный оператор в $L_2(\square)$ с областью определения $W_2^2(\square)$:

$$H_0 := -\frac{d}{dx} p \frac{d}{dx} + q,$$

где $p(x) > 0$ - 1-периодическая кусочно-непрерывно дифференцируемая вещественная функция, а $q(x)$ - 1-периодическая кусочно-непрерывная вещественная функция. Частным случаем оператора H_0 (при $p \equiv 1$) является оператор Хилла. Возмущенный оператор в $L_2(\square)$ с областью определения $W_2^2(\square)$ обозначим через $H_{\mu, \varepsilon}$:

$$H_{\mu, \varepsilon} := H_0 + \mu^{-1} \left(V_1 \left(\frac{x - x_1}{\varepsilon} \right) + V_2 \left(\frac{x - x_2}{\varepsilon} \right) \right), \quad 0 < \varepsilon, \mu \leq 1,$$

где $V_1(x), V_2(x)$ - комплекснозначные функции из $C_0^\infty(\square)$, $x_1 < x_2$ - произвольные числа, параметры ε, μ удовлетворяют условию

$$\varepsilon \mu^{-1} = o(1), \quad \varepsilon \rightarrow 0. \quad (1)$$

Известно (см., например [1]), что спектр оператора H_0 совпадает с его непрерывным спектром и имеет зонную структуру.

В работе изучен эффект возникновения собственных значений из краев невырожденных лакун непрерывного спектра оператора H_0 . В предположении (1), получены достаточные условия, при которых из краев невырожденных лакун непрерывного спектра возникают собственные значения оператора $H_{\mu, \varepsilon}$ и построены их асимптотики.

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

Литература.

1. Eastham M.S.P. The spectral theory of periodic differential equations. Texts in Mathematics, Scottish Academic Press, Edinburgh, 1973.

УДК 534.113

**ОБ ОДНОЗНАЧНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРЕХ ПАРАМЕТРОВ
ЗАКРЕПЛЕННОСТИ И НАГРУЖЕННОСТИ ОДНОГО ИЗ КОНЦОВ
БАЛКИ ЭЙЛЕРА-БЕРНУЛЛИ**

¹Аитбаева А.А., ²Султанова А.А.

¹Институт механики им. Р.Р.Мавлютова УНЦ РАН,

²Башкирский государственный университет, г.Уфа, Россия

Рассматривается однородная балка Эйлера-Бернулли [1], левый конец которой заделан, а на правом конце сосредоточен груз массой m и моментом инерции I_1 , упруго закрепленный на пружинке с жесткостью c_1 , препятствующая вертикальному смещению балки (см. Рис.1). Цель работы: 1) найти параметр упругого закрепления балки (коэффициент жесткости пружинки), а также параметры концевого груза (масса и момент инерции) по собственным частотам ее изгибных колебаний; 2) определить какое минимальное число собственных частот понадобится для однозначной идентификации этих неизвестных параметров.

В отличие от работы [1], здесь, было уменьшено число собственных значений, используемых для однозначной идентификации, с 5 до 4. Доказана теорема о корректности по Адамару [3] задачи об идентификации трех параметров: m , I_1 , c_1 по четырем собственным частотам. Были приведены контрпримеры, показывающие, что при использовании меньшего числа собственных частот, однозначность идентификации параметров нарушается.

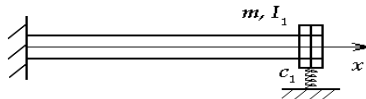


Рис.1. Балка Эйлера – Бернулли с сосредоточенной массой на конце

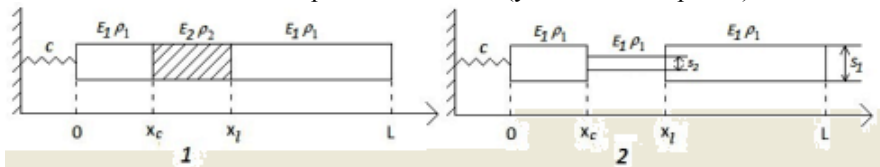
Литература

1. Вибрации в технике: Справочник. Т. 1. Колебания линейных систем / Под ред. В. В. Болотина. М.: Машиностроение, 1978. 352 с.
2. Аитбаева А.А. Идентификация коэффициента жесткости пружины, закрепленной на конце балки Эйлера-Бернулли, а также массы и момента инерции груза сосредоточенного на этом конце // Обратные краевые задачи и их приложения: материалы конференции (г. Казань, 20-24 октября, 2014г.) [Электронный ресурс]. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2014.
3. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА УТОНЕНИЯ МАТЕРИАЛА, ПОДВЕРГШЕГОСЯ КОРРОЗИОННОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ.

Ахтямов Азамат Мухтарович, Галеева Дилара Рустэмовна
Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

В работе рассмотрена задача о поиске коррозионного участка для двух случаев. В первом случае коррозионный участок моделируется, как участок с плотностью меньшей, чем плотность стержня (разрыхление материала). Во втором случае – как участок с такой же плотностью, но с меньшей площадью поперечного сечения (утонение материала).



Для обоих случаев решены задачи двух видов: прямая и обратная. Прямая задача заключается в поиске собственных частот продольных колебаний стержня с пружиной и коррозионным участком. В обратной задаче необходимо определить по двум собственным частотам продольных колебаний, начало коррозионного участка, его среднюю плотность (сл.1) и коэффициент утонения (сл.2). В работе выведено характеристическое уравнение для поиска собственных частот, а также координаты начала коррозионного участка и коэффициента утонения материала:

$$\begin{aligned} & \sin\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) \cdot \left[\left(\frac{E_2 S_2}{c_2}\right)^2 \cos\left(\frac{\omega_k (L - x_l)}{c_1}\right) \cdot \left(\frac{E_1 S_1 \omega_k}{c_1} \cos\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) + c \cdot \sin\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right)\right) - \right. \\ & \left. - \left(\frac{E_1 S_1}{c_1}\right)^2 \sin\left(\frac{\omega_k (L - x_l)}{c_1}\right) \cdot \left(\frac{E_1 S_1 \omega_k}{c_1} \sin\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right) - c \cdot \cos\left(\frac{\omega_k x_c}{c_1}\right)\right) \right] + \\ & + \frac{E_1 E_2 S_1 S_2}{c_1 c_2} \cos\left(\frac{\omega_k l}{c_2}\right) \cdot \left[\left(\frac{E_1 S_1 \omega_k}{c_1}\right)^2 \sin\left(\frac{\omega_k (L - l)}{c_1}\right) - c \cdot \cos\left(\frac{\omega_k (L - l)}{c_1}\right) \right] = 0 \end{aligned}$$

Литература

1. Ахтямов А.М., Галеева Д.Р. Определение длины, плотности и модуля упругости коррозионного участка стержня по собственным частотам продольных колебаний // Вестник Башкирского университета. 2015. Т. 20. №2. С. 398 – 402.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОДИНОЧНОГО ПУЗЫРЬКА С ТВЁРДОЙ ЧАСТИЦЕЙ

Гайнетдинов А.Р., Иткулова Ю.А.

Центр микро- и наномасштабной динамики дисперсных систем
Башкирского государственного университета, г.Уфа, Россия

Изучение взаимодействия пузырька с твёрдой частицей может быть использовано в медицине и во многих технологических процессах. Яркими примерами применения подобных исследований в медицине является ударно-волновая литотрипсия (дробление камней в почках), в микроэлектронике – очистка поверхностей микрочипов.

В работе рассматривается система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающая взаимодействие сферического пузырька с сферической твёрдой частицей под воздействием акустического поля в потенциальном течении [1]. Получена система ОДУ относительно четырех неизвестных (радиус пузырька, радиальная и поступательная скорости пузырька, поступательная скорость частицы), которая решалась методом Рунге - Кутты 4-ого порядка.

Рассматривалось взаимодействие пузырька и частицы одинаковых начальных радиусов, расположенных на различных расстояниях друг от друга. Выявлено, что при больших расстояниях взаимодействие незначительно и результаты моделирования совпадают с решением уравнения Рэлея-Плессета без учета вязкости жидкости [2]. При небольших расстояниях наблюдается сильное взаимодействие. При расширении пузырек отталкивает частицу при сжатии – притягивает. Анализ размеров частицы показал, что частица большого размера также может оказывать влияние на пузырек. Обнаружено, что частица и пузырек притягиваются в момент сжатия пузырька при определенном соотношении радиусов пузырька и частицы и расстояния между ними.

Литература

- [1] Hay T. A., Hamilton M. F., Ilinskii Yu. A. and Zabolotskaya E. A.. Coupled pulsation and translation of a gas bubble and rigid particle // AIP Conference Proceedings – 2008.– V. 1022. – P. 209–212.
- [2] Rayleigh L. On the pressure developed in a liquid during the collapse of spherical void // Philos. Mag. – 1917. – V. 34. – P. 94–98.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА В ГАЗОВОЙ СРЕДЕ ПРИ ИНЖЕКЦИИ КАПЕЛЬ ВОДЫ

Кунсбаева Г. А.¹, Чиглинцева А.С.²

¹Сибайский институт БашГУ, г. Сибай, Россия

²Бирский филиал БашГУ, г. Бирск, Россия

Гидраты природного газа представляют собой уникальное сырье 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 [3].

Задачи, связанные с образованием газогидратов, в настоящее время представляет значительный научный и практический интерес, что обусловлено перспективой использования газовых гидратов в различных технологиях.

В работе исследован процесс образования гидрата в газовой среде при инжекции капель воды, построена соответствующая технологическая схема реактора и теоретическая модель, описываемого процесса.

Получены конкретные численные величины для параметров, определяющих интенсивность образования гидрата и движениями газовой и водной фаз, которые позволяют 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 оптимальности размера был проведен параметрический анализ по данной теоретической модели.

Литература

1. Бык С. Ш., Макагон Ю. Ф., Фомина В. И. Газовые гидраты.-М.: Химия, 1980.
2. Макагон Ю.Ф. Гидраты природных газов.-М., «Недра», 1974.
3. Шагапов В.Ш., Чиглинцева А.С., Русинов А.А. О механизмах роста гидратной оболочки на поверхности всплывающих газовых пузырьков // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика 2015 № 3(35). С.73-86.

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-
ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПРЯМОЛИНЕЙНЫХ И
КРИВОЛИНЕЙНЫХ УЧАСТКОВ НЕФТЕПРОВОДА,
ДЕФОРМИРУЮЩЕГОСЯ СОВМЕСТНО С ГРУНТОМ**

Масалимов Радик Биктимерович, Зарипов Раиль Муталлапович
Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

При строительстве подземных участков нефтепровода, проложенного через естественные или искусственные препятствия, часто используются следующие конструктивные схемы: нефтепровод собирают в сочетании из кривых вставок и прямых труб. Нередко потеря устойчивости нефтепроводов наблюдается именно на этих участках. Для обеспечения большей надежности нефтепровода на этих участках требуется неукоснительное соблюдение норм и правил расчета при его проектировании.

Рассматривается подземный участок нефтепровода, составленный из прямых труб и кривых вставок. Этот участок может состоять из различных типов грунтов. Нефтепровод деформируется совместно с грунтом под действием собственного веса, веса грунта над трубой, веса продукта в трубе, а также эксплуатационных нагрузок. Так как жесткость грунта основания неодинакова по длине рассматриваемого участка нефтепровода, то на одних частях грунт деформируется в упругой области, на других – исчерпывает свою несущую способность.

Для описания НДС отдельных частей нефтепровода используются [1]:

а) геометрические соотношения; б) уравнения равновесия; в) физическое соотношение, в котором заложена начальная кривизна нефтепровода.

На основе данных и принятых предположений поставлена и решена задача о нахождении основных характеристик НДС подземного нефтепровода в виде эпюр и экстремальных значений. Приведены примеры расчета в зависимости от несущей способности грунта основания.

Литература

[1] Шаммазов А.М., Зарипов Р.М., Чичелов В.А. и др. Расчет и обеспечение прочности трубопроводов в сложных инженерно-геологических условиях. Т.1. – М.: Изд-во «Интер», 2005. – 706 с.

НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ КРИВОЛИНЕЙНОГО УЧАСТКА НЕФТЕПРОВОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЕНСИРУЮЩИХ УСТРОЙСТВ

Масалимов Радик Биктимерович, Зарипов Раиль Муталлапович
Уфимский государственный нефтяной технический университет,
г. Уфа, Россия

На выходе подземного участка нефтепровода на поверхность земли на трубе может быть установлено компенсационное устройство с целью разгрузки нефтепровода от продольных напряжений.

Решена задача о НДС кривой вставки, которая при деформации под действием собственного веса с продуктом растягивается в продольном направлении от воздействия компенсатора. Если пренебречь жесткостью конструкции компенсатора, то на концах вставки будет действовать растягивающее усилие от воздействия внутреннего давления [1], определяемое по формуле

$$S_x = p_0 F_{cs} = 0,25 p_0 \cdot \pi \cdot D_{\text{вн}}^2. \quad (1)$$

где S_x – эквивалентное продольное усилие, p_0 – внутреннее давление; F_{cs} – площадь поперечного сечения трубы «в свету», $D_{\text{вн}}$ – внутренний диаметр трубы. В этом случае для описания НДС кривой вставки используется дифференциальное уравнение

$$\frac{d^4 w}{dx^4} - \frac{S_x}{EJ} \frac{d^2 w}{dx^2} + k_1^2 \frac{d^2 w}{dx^2} = \frac{q_y}{EJ} + \frac{S_x k_1}{EJ}, \quad (2)$$

где w – прогиб; x – независимая переменная, совпадающая с продольной осевой координатой; E – модуль деформации; J – осевой момент инерции поперечного сечения стенки трубы, q_y – вертикальная составляющая нагрузки; k_1 – кривизна вставки. Здесь S_x определяется по формуле (1).

Рассматривается два варианта закрепления на опорах концов вставки: свободное опирание и жесткая заделка. Найдено решение дифференциального уравнения (2), удовлетворяющего этим граничным условиям. Найдены формулы для расчета основных характеристики НДС криволинейных участков нефтепровода с компенсатором.

Литература

[1] Шаммазов А.М., Зарипов Р.М., Чичелов В.А. и др. Расчет и обеспечение прочности трубопроводов в сложных инженерно-геологических условиях. Т.1. – М.: Изд-во «Интер», 2005. – 706 с.

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

УДК 514.83

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНУЮ ПЛАЗМУ

Егоров Антон Андреевич

Чувашский государственный университет, г. Чебоксары, Россия

В настоящее время особое внимание уделяется изучению вопроса об управлении горением пламени при помощи различных физических методов[1].

В данной работе изучается влияние электростатического поля на низкотемпературную плазму (пламя свечи).

Как известно, газообразная среда пламени содержит заряженные ионы, чем обеспечивается наличие электропроводности пламени, и взаимодействие его с электрическим полем. Опыты, проведённые на высоковольтном школьном преобразователе «РАЗРЯД-1» показали, что взаимодействие между электрическим полем и пламенем существует. Аналитически процесс воздействия электростатического поля на пламя свечи может быть представлен в виде системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - c_p m \frac{dT}{dx} + qW = 0$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{D\rho}{\mu} \frac{dN}{dx} \right) - \frac{m}{\mu} \frac{dN}{dx} - W = 0$$

с краевыми условиями:

$$\text{в } \partial\Omega \text{ при } X = -\infty \quad T = T_0 \quad \rho = \rho_0$$

$$\text{в } \partial\Omega \text{ при } X = \infty \quad T = T_A \quad \rho = \rho_A \quad (\text{и } \rho = 0)$$

Найти явное решение большинства дифференциальных уравнений в аналитическом виде оказывается возможным только в частных случаях. Анализ математических моделей, подобных этой, построенных на основе дифференциальных уравнений, проводится при помощи приближенных численных методов [2]. Наиболее распространенным методом решения таких дифференциальных уравнений является метод конечных элементов.

Литература

1. Хитрин Л.Н. Физика горения и взрыва / Л.Н. Хитрин. - М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1957. — 452 с.
2. Мудров А.Е. Численные методы для ПЭВМ на языках Бейсик, Фортран и Паскаль / А.Е. Мудров. - Томск: МП «РАСКО», 1991. 272 с.

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МОДЫ НЕЛОКАЛЬНОГО ДИСКРЕТНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НАСЫЩЕНИЕМ

Коробейников А.С.

Московский Институт Электронной Техники, г. Москва, Россия

Нелинейное уравнение Шредингера с насыщением (называемое также уравнением Винецкого-Кухтарева)

$$iU_t + U_{xx} - \frac{\theta U}{1 + \gamma |U|^2} = 0, \quad \theta, \gamma > 0 \quad (1)$$

возникает в различных физических приложениях, в частности, в теории фоторефрактивных кристаллов. Среди его решений имеется локализованная нелинейная мода $U(x, t) = u(x) \exp(i\omega t)$, где $u(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$. В дискретной версии этого уравнения вторая производная по x заменяется второй разностью. Вопрос о существовании локализованных решений для возникающего при этом нелокального уравнения в некотором приближении сводится к изучению локализованных решений следующего ОДУ

$$\varepsilon^2 U_{xxxx} + U_{xx} + \omega U - \frac{\theta U}{1 + \gamma |U|^2} = 0 \quad (2)$$

где ε соответствует параметру нелокальности. Локализованные решения уравнения (2) существуют не при всех ε . В работе [1] показано, что существование бесконечной последовательности значений $\varepsilon = \varepsilon_n \rightarrow 0$ при которых такие решения существуют, у уравнений подобного типа связано с наличием четверки особых точек $x = \pm\alpha \pm i\beta$, $\alpha, \beta > 0$ у локализованного решения уравнения (2), которое соответствует пределу $\varepsilon = 0$. В этом случае асимптотическое поведение ε_n описывается формулой

$$\varepsilon_n \sim \alpha / (\varphi_0 + \pi n) \quad (3)$$

где φ_0 - константа. В данной работе представлено численное исследование особых точек локализованного решения (2) при $\varepsilon = 0$. Также численно найдены значения ε_n , при которых локализованные решения (2) существуют и показано, что формула (3) хорошо описывает численный результат.

Литература

1. G.L. Alfimov, E.V. Medvedeva, D.E. Pelinovsky. Wave systems with an infinite number of localize traveling waves //Phys. Rev. Lett. 112.054103

СТАЦИОНАРНЫЕ МОДЫ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ПРИСУТСТВИИ ЛИНЕЙНОГО И НЕЛИНЕЙНОГО ПОТЕНЦИАЛОВ

Лебедев М. Е.

Московский Институт Электронной Техники, г. Москва, Россия

В докладе речь пойдет об уравнении:

$$u_{xx} + Q(x)u + P(x)u^3 = 0$$

Уравнения такого рода используются для описания стационарных нелинейных мод нелинейного уравнения Шредингера (НУШ), которое возникает в моделях конденсата Бозе-Эйнштейна. Известно, что при некоторых условиях на $P(x)$ и $Q(x)$, «большая часть» решений уравнений такого типа оказываются сингулярными, т.е. уходящими на бесконечность в конечной точке числовой прямой. В некоторых ситуациях это обстоятельство позволяет использовать методы символической динамики для изучения не сингулярных решений этого уравнения.

В ходе исследований были установлены достаточные условия для существования сингулярных решений этого уравнения, а также достаточные условия их полного отсутствия.

Для случая, когда $Q(x)$ является константой (что соответствует отсутствию линейного потенциала в НУШ), а $P(x)$ является знакопеременной периодической функцией (периодический нелинейный потенциал), был проведен численный эксперимент. На основе результатов численного счета было выдвинуто предположение, что все не сингулярные решения в этом случае могут быть кодированы бесконечными последовательностями из символов алфавита, состоящего из счетного числа символов.

© Лебедев М. Е., 2015 г.

СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

УДК 519.62

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОДУ

Арисова О.Г.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия,

В работе изучается проблема численного решения нелинейных краевых задач, описываемых системой нелинейных однородных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x), \quad t \in [a, b], \quad x \in \mathbf{R}^n,$$

в которых дополнительные условия налагаются на значения функций $x(t)$ более чем в одной точке отрезка

$$R(x(a), x(b)) = 0.$$

Функции $f(t, x)$ и $R(x, y)$ являются гладкими вектор-функциями в \mathbf{R}^n . Такие задачи описывают многие процессы, такие как, например, процессы теплофизики, химической кинетики и т.д.

Для решения данного класса задач в работе рассмотрен и применен метод продолжения по параметру. Метод продолжения по параметру является сильным численным инструментом решения нелинейных алгебраических и функциональных уравнений. Основным его достоинством по сравнению с классическими методами, такими как, например, метод Ньютона и его модификации, является присущая ему при определенных предположениях (см. [1]) глобальная сходимость, так как метод продолжения по параметру позволяет сильно ослабить требования к начальному приближению. Однако этот метод не так широко известен, во многом из-за того, что он мало освещен в русскоязычной литературе.

Схему вариации параметра (метод продолжения) можно рассматривать как некоторую модификацию классического метода Ньютона. Основную идею данного метода можно сформулировать: сведение исходной краевой задачи к решению задачи Коши для нелинейного уравнения, а именно, на каждом шаге итерационного процесса решается так называемая внешняя задача Коши, в ходе которого происходит многократное обращение к решению внутренней задачи Коши при различных значениях параметра p (см. [2], [3]). В нашей работе последовательность таких задач решалась методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности [4].

В работе проведены вычислительные эксперименты на решениях модельной задачи с использованием среды Embarcadero RAD Studio.

Полученные результаты подтверждают эффективность метода продолжения по параметру.

Литература

1. Avvakumov, S., Kiselev, Yu. Boundary value problem for ODE with applications to optimal control // Spectral and Evolution Problems. 2000. Vol 10. Simferopol, Ukraine.
2. Шалашилин, В.И., Кузнецов, Е.Б. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация. М.: Эдиториал УРСС, 1999. С. 6-10.
3. Жулин С.С. Метод продолжения по параметру с коррекцией и его приложения// Прикладная математика и информатика. Сборник статей. - М.: Издательский отдел факультета ВМиК МГУ. 2009. № 30. С.55-94.
4. Калиткин Н.Н., Численные методы. М.: Наука, 1978.

CODING AND COMPUTATION FOR LOCALIZED NONLINEAR STATES OF NLS WITH ADDITIONAL PERIODIC POTENTIAL

Kizin P. P.

National Research University of Electronic Technology,
Zelenograd, Moscow, Russia.

Localized nonlinear modes for defocusing NLS equation with periodic potential

$$i\partial_t \Psi(x,t) = -\partial_x^2 \Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) + |\Psi(x,t)|^2 \Psi(x,t) \quad (1)$$

(known also as Gross-Pitaevskii equation with repulsive interactions) are the solutions of Eq.(1) of the form $\Psi(x,t) = \psi(x)\exp(-i\mu t)$ that satisfy the condition of localization $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x,t) = 0$ the function $\psi(x)$ obeys the second order ODE

$$\psi''(x) + (\mu - V(x))\psi(x) - \psi^3(x) = 0 \quad (2)$$

Recently, complete description of these solutions for some classes of potential $V(x)$ has been presented [1]. This approach allows to code these solutions by words of finite length consisting of symbols of some finite alphabet. This contribution is devoted to the two following issues: (i) given the code, how one can restore the profile of the mode? (ii) is it possible to make a conclusion about the stability of the mode by its code?

Answering the point (i), we present a numerical algorithm for construction of the mode profile by its code [2]. In order to study the point (ii) we explore the linear stability of the nonlinear modes with the simplest codes. The study was fulfilled for the model case $V(x) = A \cos 2x$. Numerical computations show that the modes with alternating symbols in the code are unstable. At the same time it has been shown that even the simplest localized mode with one-symbol code may also reveal oscillatory instability. The stability results have been verified by several different numerical tools including the Evans function method and direct solving of eigenvalue stability problem in Fourier space.

References

1. G. L. Alfimov, A. I. Avramenko, Coding of nonlinear states for the Gross-Pitaevskii equation with periodic potential, *Physica D* 254, 29–45 (2013).
2. G. L. Alfimov, P. P. Kizin, D. A. Zezyulin, Gap solitons for repulsive Gross-Pitaevskii equation with periodic potential: coding and algorithm for computation, preprint

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА МЕТОДА ВАРИАЦИЙ В ПРОСТРАНСТВЕ УПРАВЛЕНИЙ

Хайбуллина Г.Б.

Башкирский государственный университет, г.Стерлитамак, Россия

Целью работы является разработка и реализация алгоритма метода вариаций в пространстве управлений для решения оптимизационных задач.

Общий алгоритм метода вариаций в пространстве управлений можно представить в следующем виде:

1. Задаем начальное приближение для оптимального управления $U^0(t) \in D_U$ и полагаем счетчик числа итераций равным нулю. Начальное приближение выбирается, как правило, из физических соображений поставленной задачи.

2. С управлением $U^0(t)$ решаем задачу Коши для системы ОДУ – получаем фазовую траекторию $X^r(t)$.

3. Вычисляем функционал $J_0^r(U)$ – значение критерия качества управления на невозмущенной траектории $U^r(t)$.

4. В окрестности невозмущенной траектории $U^r(t)$ выполняем линеаризацию задачи – вычисляем производную $W_0^r(t) = \frac{\partial J_0^r(U)}{\partial U}$ и определяем окрестность ∂D_0^r невозмущенной траектории.

5. Из условия

$$\min_{\partial U} \frac{\partial J_0^r}{\partial U}(\partial U) = \min_{\partial U} \int_0^T [(W)_0^r(t)]^T \partial U(t) dt, \quad \partial U \in \partial D_0^r, \quad (1)$$

находим приращение ∂U^r управления $U^r(t)$.

6. Полагаем $U^{r+1}(t) = U^r(t) + \partial U^r$.

7. Если условие окончания итераций выполнено (см. ниже), то в качестве приближения к оптимальному управлению принимаем управление $U^{r+1}(t)$ и заканчиваем вычисления. Иначе – полагаем $r = r + 1$ и переходим к п.2. Если $U^{r+1}(t) = U^r(t)$ и условие окончания итераций не выполнено, тогда ∂U^r делим на 2.

В качестве условия окончания итераций естественно принять условие $\|\partial U^r\| \leq \varepsilon_U$, где $\|\bullet\|$ – некоторая функциональная норма, ε_U – заданная константа.

Задача (1) может быть сведена к задаче линейного программирования, что является значительным достоинством метода.

Литература

1. Пантелеев А.В., Бортакoвский А.С., Лeтoвa Т.А. Oптимальное управление в примерах и задачах: Учеб. пособие. – М.: Изд-во МАИ, 1996. – 212с.

УДК 519.622.

ПОИСК НЕИЗВЕСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ РИЧАРДСОНА

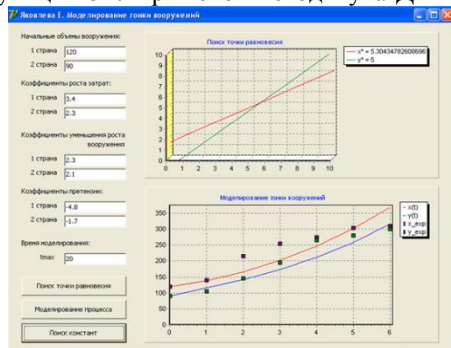
Яковлева Е.П., Михайлова Т.А.

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Зачастую встречаются задачи, в которых необходимо по наблюдаемым данным найти неизвестные параметры модели. Такие задачи называются обратными. Одной из таких задач является поиск неизвестных параметров модели Ричардсона по известным экспериментальным данным.

Имея в наличии действующую модель гонки вооружений, для решения обратной задачи логично использовать «метод прямой задачи», который заключается в расчете функции расходов вооружений рассматриваемых стран и сопоставлении результатов с соответствующими экспериментальными данными. При этом расчетные значения сопоставляемых параметров определяются в процессе численного эксперимента, а задача сводится к нахождению минимума функционала соответствия модельных и экспериментальных значений.

На основе рассмотренных положений было создано программное средство, с помощью которого была решена задача поиска неизвестных параметров для гонки вооружений между СССР и США в 1975-1987 гг. Для поиска минимума функции был применен метод Хука-Дживса.



В результате были получены оптимальные параметры модели Ричардсона для рассматриваемой гонки вооружений: коэффициенты роста затрат $a = 122.56$, $b = 84.10$; коэффициенты уменьшения роста вооружения $m = 84.1$, $n = 77.10$; коэффициенты притязаний $r = -161.71$, $s = -53.21$.

Литература

1. Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах. – М.: Высшая школа, 2005. – 544 с.

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»

РАСЧЕТ СТРАХОВЫХ ТАРИФОВ В МЕДИЦИНСКОМ СТРАХОВАНИИ

Арсланова Р.Р.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Страховая медицина как одна из форм общегосударственной защиты населения представляет собой определенную организационную систему медицинской помощи, основанную на методе страхования.

Обязательной частью любого вида страховой деятельности, в том числе медицинского страхования являются актуарные расчеты - это система математических и статистических методов, с помощью которых производится исчисление страховых тарифов. Широкое применение в актуарной практике получил подход, основанный на теории Марковских процессов. В данном подходе для описания состояния застрахованного лица используется модель поведения системы со многими состояниями.

Простейшая ситуация содержит два состояния застрахованного лица: «жив» и «умер». Схема переходов из одного состояния в другое показана на Рисунке 1. Переход возможен только в одном направлении.

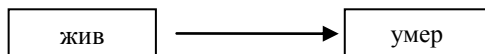


Рисунок 1. Модель двух состояний

Для описания состояния человека обычно используется схема, которая включает три состояния: «здоров», «болен», «умер» (Рисунок 2).

Вероятность выздоровления по основным классам болезней мала, поэтому переходом из состояния Болен->Здоров можно пренебречь.

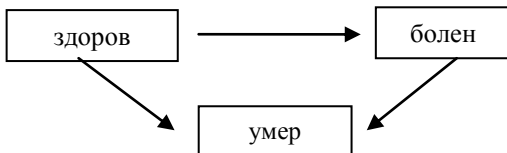


Рисунок 2. Модель трех состояний.

С помощью составления дифференциальных уравнений Колмогорова можно построить математические модели и рассчитать вероятности состояний, в которых будет находиться застрахованное лицо в определенный момент времени.

Для вычисления интенсивностей перехода из состояния в состояние можно воспользоваться статистикой численности, заболеваемости и смертности по основным классам причин смерти.

Построенные модели и вычисления вероятностей необходимы для расчета страховых тарифов.

Страховой платеж как основной источник доходов страховщика определяется на основе страхового тарифа (тарифной ставки). Тарифная ставка - это цена страхового риска и других расходов по ведению страхового дела. Совокупность тарифных ставок называется тарифом.

Тарифная ставка, по которой заключается договор страхования, называется брутто-ставкой. Нетто-ставка выражает цену страхового риска. В основе построения нетто-ставки лежит вероятность наступления страхового случая.

Используя формулы для расчета брутто- и нетто-ставки, можно вычислить величину страхового тарифа.

Полученные результаты позволяют рассмотреть возможность прогнозирования страховых тарифов и заболеваемости на последующие годы.

Литература

1. Корчевской Л.И., Турбиной К.Е. Основы страховой деятельности, 2007;
2. Ахвледиани Ю.Т., Шахова В.В. Страхование. М.: Юнити, 2008;
3. Грищенко Н.Б. Основы страховой деятельности: Учебное пособие. Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2001. 274 с.
4. Спивак С.И., Абдюшева С.Р. Обратные задачи для Марковских моделей. Журнал «Актuariй», М.: Наука, 2007, №1.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЙВЛЕТ АППАРАТА ДЛЯ
ИССЛЕДОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ В
ГОРОДСКОЙ АТМОСФЕРЕ**

Билалов Биал Тельман оглу, Забидов Закир Джумшуд оглу
Институт Математики и Механики НАН Азербайджана, г. Баку,
Азербайджан

В настоящее время в городских и промышленных центрах созданы множество различных систем, которые контролируют характеристики качества воздуха. Есть разные формы алгоритмы обработки данных о загрязнений воздуха.

В существующих системах мониторинга решаются проблемы сбора и прогнозирования данных. В основном для этой цели, обычно использовали статистические методы. Но часто не принимается во внимание динамика изменения загрязняющих веществ. Для преодоления этого недостатка в структуре обработки информации, которая является неотъемлемой частью экологического мониторинга, необходимо создать математические модели, которые учитывают изменчивости параметров временных рядов. Одним из эффективных методов математического анализа и обработки данных мониторинга окружающей среды является способ вейвлет преобразование.

В рассматриваемой работе обрабатывается значения Суммарной радиации, измеренные в разные дни в г. Баку. Измерения проводились с интервалом $\Delta t=2$ сек в диапазоне длин волн 03 μkm - 2,4 микрон. Измерения проводились с устройством пиранометр "Пеленг СФ -06". Рассчитываются вейвлет-коэффициенты и строится графики функции Skoloqram.

Работа выполнена под финансовой поддержки программы "Применение теория фреймов в обработке сейсмологических сигналов и сигналов различных природ", НАН Азербайджана, 2015.

Литература

1. Витязев В.В. Вейвлет-анализ временных рядов. Издательство С. Петербургского Университета, 2001, 58 с.

2. Шитов А.Б. Разработка численных методов и программ, с применением вейвлет-анализа для моделирования и обработки экспериментальных данных. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Ивановский Гос. Унив., 2001, 126 с.

**РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ
СОСТАВОВ РЕАГИРУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ СИНТЕЗА
БЕНЗИЛИДЕНБЕНЗИЛАМИНА РЕАКЦИЕЙ БЕНЗИЛАМИНА С
ЧЕТЫРЕХХЛОРИСТЫМ УГЛЕРОДОМ ПОД ДЕЙСТВИЕМ $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$**

Булатов И.М.¹, Абзалилова Л.Р.¹, Мустафина С.А.²

¹*Институт нефтехимии и катализа РАН, г. Уфа*

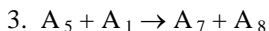
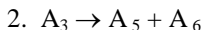
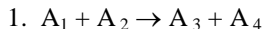
²*Стерлитамакский филиал Башкирского государственного
университета, г. Стерлитамак*

Внедрение математических методов планирования эксперимента позволяет в значительной степени исключить слепой хаотический поиск, заменить его научно обоснованной программой проведения экспериментального исследования. Одной из задач планирования химического эксперимента является задача определения оптимальных составов реагирующих веществ. [1]

Каталитические реакции синтеза ароматических и гетероциклических соединений, таких как N-бензилиденбензиламин и метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты обладают широким спектром применения. N-бензилиденбензиламин известен как индикатор количественного определения литийорганических соединений титриметрическим методом и является исходным соединением для синтеза ряда гетероциклов. Метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты представляет большой интерес для получения порфиринов и лекарственных препаратов [2].

Целью работы является создание физико-химической модели синтеза бензилиденбензиламина реакцией бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и проведение ее формализации, т. е. составление математической модели, которая представляет собой систему соотношений, отражающих основные законы сохранения (массы, энергии, импульса и т.д.), и на её основе решение задачи определения оптимальных составов бензиламина и четыреххлористого углерода.

Рассмотрим механизм химической реакции синтеза бензилиденбензиламина:



Здесь введены обозначения для веществ: $\text{A}_1 = \text{C}_7\text{H}_9\text{N}$ – бензиламин, $\text{A}_2 = \text{CCl}_4$ – четыреххлористый углерод, $\text{A}_3 = \text{C}_7\text{H}_8\text{NCl}$ – хлорбензиламин, $\text{A}_4 = \text{CHCl}_3$ – хлороформ, $\text{A}_5 = \text{C}_7\text{H}_7\text{N}$ – 1-фенилметанимин, $\text{A}_6 = \text{HCl}$ – хлористый водород, $\text{A}_7 = \text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}$ – бензилиденбензиламин, $\text{A}_8 = \text{NH}_3$ – аммиак,

$A_0 = \text{NH}_4\text{Cl}$ – хлористый аммоний. Первыми в реакцию вступают бензиламин и четыреххлористый углерод, в зависимости от их концентраций синтезируется определенное количество бензилиденбензиламина.

Составим матрицу стехиометрических коэффициентов данной химической реакции. Матрица имеет вид:

$$v = \begin{pmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где i -ой строке соответствует вещество A_i , j -ый столбец соответствует номеру реакции. Скорость j -ой реакции r_j определяется по формуле:

$$r = k^+ \prod_{i=1}^{N_A} C_{A_i}^{\alpha_i} - k^- \prod_{i=1}^{N_B} C_{B_i}^{\beta_i} \quad (1)$$

где N_A , N_B - число исходных веществ и продуктов реакции соответственно, α_i и β_i - элементы матрицы стехиометрических

коэффициентов v , k^+ и k^- - константы скорости. Тогда в соответствии с (1) для реакции синтеза бензилиденбензиламина скорости стадий имеют вид (здесь и далее под C_i понимаются концентрации реагирующих веществ A_i):

Согласно закону действующих масс [3] суммарный материальный баланс для варианта, когда суммарная концентрация $C = \sum_{i=1}^m C_i$ изменяется во

времени, имеет вид:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{d(Cx_i)}{dt} = \sum_{j=1}^n v_{ij} r_j, \quad i = \overline{1, m} \quad (2)$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad x_i(0) = x_i^0. \quad (3)$$

соответствии с (2) и (3) получим систему дифференциальных уравнений,

являющейся математической моделью реакции синтеза бензилиденбензиламина:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dC_1}{dt} = -K_1 C_1 C_2 - K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_2}{dt} = -K_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_3}{dt} = K_1 C_1 C_2 - K_2 C_3 \\ \frac{dC_4}{dt} = K_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_5}{dt} = K_2 C_3 - K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_6}{dt} = K_2 C_3 - K_4 C_8 C_6 \\ \frac{dC_7}{dt} = K_3 C_5 C_1 \\ \frac{dC_8}{dt} = K_3 C_5 C_1 - K_4 C_8 C_6 \\ \frac{dC_9}{dt} = K_4 C_8 C_6 \end{array} \right.$$

с начальными условиями (3).

Построенная математическая модель синтеза бензилиденбензиламина позволяет получить информацию о динамике образования веществ и о степени влияния каждого вещества на ход реакции.

На основе построенной модели реализована программа. На рисунке 1 изображена зависимость образования бензилиденбензиламина от мольной доли содержания бензиламина.

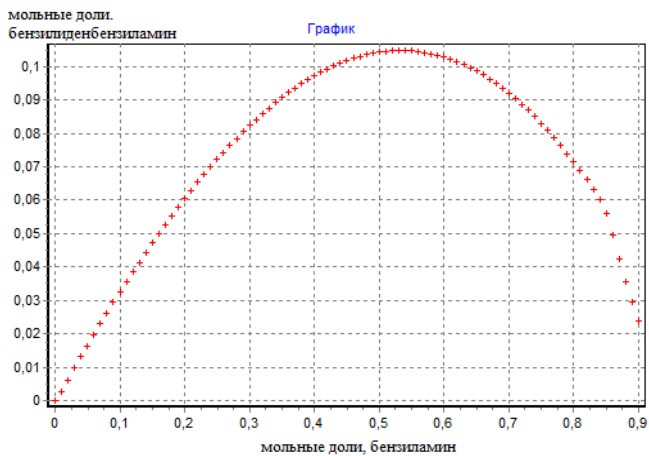


Рис. 1. График зависимости составов веществ

Полученные результаты показывают, что для максимального получения бензилиденбензиламина состав реагирующих веществ должен выглядеть следующим образом: 54% бензиламина и 46% четыреххлористого углерода.

Литература

- [1]. А.М. Кориков. Математические методы планирования эксперимента. Учебное пособие. – Томск, Издательство Томского университета, 1973. с. 282.
- [2]. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Аминов Р.И. Синтез N-бензилиденбензиламина из бензиламина при действии железосодержащих катализаторов в CCl₄ // Журнал органической химии. 2012. С. 1063-1065.
- [3]. Спивак С. И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. - Уфа: РИО БашГУ, 2003, 110с.

УДК 538.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗАХ И СМЕСЯХ.

Зайнулова Алёна Расимовна

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

В настоящее время моделирование изотермических процессов активно исследуется и используется на практике в различных областях науки и промышленности. Например, в популярной в настоящее время нефтегазовой промышленности. Так как благодаря моделированию можно получить максимально близкие по значению данные к реальному веществу. Однако исследователи всегда сталкиваются с рядом трудностей при моделировании сложных структур.

В ходе работе были выполнены следующие задачи: моделирование изотермических процессов газов, произведены расчеты, получены графики данных процессов для смеси реальных газов, произведена первичная обработка результатов измерений и анализ данных.

Были получены и обработаны результаты компьютерного моделирования изотермических процессов в смесях реальных газов, добываемых в нефтегазовой промышленности, в виде графиков реальных изотерм. Так же рассчитаны критические температуры для исследуемых газов. Данные газы были взяты в равных концентрациях и рассмотрены для трех значений температур – ниже критической, равной критической и выше критической.

Полученные в ходе работы результаты согласуются с основным уравнением МКТ. Если давление газа мало и температура его не слишком низка. При повышении давления поведение реальных газов отклоняется от поведения газов идеальных. Реальный газ при увеличении давления первоначально сжимается больше, чем это следует из уравнения идеальных газов. Причины подобного поведения газа легко объяснимы. Большую сжимаемость реального газа по сравнению с газом идеальным обуславливают силы межмолекулярного взаимодействия.

Литература

1. Жилин П.А. Рациональная механика сплошных сред. [Текст] / Жилин П.А. СПб.: Политехн.ун-та, 2012. - 584с.
2. Ландау Л.Д., Липшиц Е.М., Квантовая механика, нерелятивистская теория/. [Текст] / Ландау Л.Д., Липшиц Е.М ; М., Физматлит, 2008. - 384с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАРЯДА В КОМПОЗИТНОЙ СРЕДЕ, ИМЕЮЩЕЙ ВИД ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

Корчагин Сергей Алексеевич

Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А.,
г. Саратов, Россия

При создании материалов с наперед заданными свойствами, особое внимание стоит уделять эволюции динамической системы. Целью исследования является изучение динамики заряда в композитной среде, имеющего вид динамической системы с нелинейностью.

Рассмотрим композит, эквивалентная схема которого имеет вид колебательного контура с нелинейной индуктивностью. В случае периодического воздействия, динамика колебаний заряда системы описывается дифференциальным уравнением Дуффинга [1]:

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \frac{dq}{dt} + q^3 = A \sin \Omega t, \quad (1) \quad \text{где } A = \alpha \gamma^{-3}, \quad \Omega = \omega / \gamma^2, \quad \gamma \text{ - параметр диссипации, } \alpha \text{ и } \omega \text{ амплитуда и частота соответственно.}$$

В случае импульсного возбуждения динамика системы будет описываться дифференциальным уравнением Дуффинга в следующей форме:

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \frac{dq}{dt} + q^3 = \sum A(t - nT) \quad (2).$$

Построены карты динамических режимов, по осям которых находятся параметры, характеризующие амплитуду и частоту воздействия, и соответствующие разным режимам фазовые портреты. Численное интегрирование уравнения (1) проводилось методом Рунге - Кутты четвертого порядка. Выбранные случайно начальные условия $x_0 = x(t = 0)$ были нормально или равномерно распределены с различными дисперсиями. В случае импульсного возбуждения (2), в промежутках между импульсами было использовано решение для автономного осциллятора Дуффинга методом медленно меняющихся амплитуд. В качестве переменных дискретного отображения были использованы координата и скорость осциллятора сразу после очередного импульса. Построены карты динамических режимов, по осям которых находятся параметры, характеризующие амплитуду и частоту воздействия, и соответствующие разным режимам фазовые портреты. Установлено, что при малой амплитуде частота колебаний совпадает с частотой внешнего воздействия, а при увеличении этого параметра можно наблюдать более сложное динамическое поведение, включая переход к хаосу.

Литература

1. Кузнецов, С.П. Динамический хаос. М.: Физмалит, 2001. -80

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РАСПОЗНАВАНИЯ В ОРНИТОЛОГИИ

Мицуков Д.С.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Данная работа посвящена внедрению методов распознавания в естественные науки, а именно в орнитологию. Современная классификация птиц до сих пор находится на стадии формирования. Сравнительный анализ анатомии птиц, ископаемых окаменелостей и ДНК не привёл к единому мнению исследователей по этому вопросу. Поэтому идея применить компьютерное зрение в классификации птиц носит новый характер.

Программа писалась для дальнейшего её использования в качестве определителя названия птицы по перу. В этом так же заключается и своеобразная классификация по определённым критериям.

Основными элементами пера птицы являются: очин, стержень, опахало. Идеология программы базируется на следующем утверждении: название птицы можно идентифицировать по параметрам, заключённым в рассматриваемом пере. Такими параметрами могут являться: длина пера, ширина пера, ширина верхнего и нижнего опахала, кривизна стержня. То есть, найдя эти параметры, мы сможем произвести их сравнительный анализ с уже имеющимися параметрами в базе данных, и сказать, какой птице принадлежит перо. Ширина каждого опахала – это расстояние от контура стержня до контура пера. То есть задача программы заключается в том, чтобы найти координаты ствола пера и контура пера на цифровом изображении, учитывая некоторые условия: на фотографии не должно быть никаких инородных предметов и фон должен быть относительно однородным, перо должно быть расположено на фото горизонтально, слева направо. Программа писалась в пакете прикладных программ Matlab на одноимённом языке программирования Matlab. Благодаря использованию встроенных графических функций Matlab, программа стала более универсальной для различных видов перьев.

Литература

1. Потемкин В.Г. Вычисления в среде MATLAB, 2004;
2. Шутьпин Л.М. Орнитология, 1940;
3. В.Дьяконов, И.Абраменкова. MATLAB. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник, 2002;
4. Гонсалес Р.С. Цифровая обработка изображений в среде MATLAB, 2006.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛБУТЕНОВ В ИЗОПРЕН С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА

Шаймухаметова Дина Владимировна

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

Математическая модель процесса дегидрирования метилбутенов с учетом изменения активности катализатора представляет собой систему [1]:

$$r_1 = \frac{k_{+1}C_1 - k_{-1}C_2C_4}{(1 + b_{11}C_1 + b_{12}C_2 + b_{13}C_3)^2} a, \quad r_2 = \frac{k_{+2}C_2 - k_{-2}C_3C_4}{(1 + b_{21}C_2 + b_{22}C_3 + b_{23}C_4)^2} a,$$

$$r_3 = \frac{k_3C_3}{1 + b_3C_4} a, \quad r_4 = \frac{k_4}{1 + b_4C_4} a, \quad (1)$$

$$\frac{da}{dt} = -2a \frac{k_3b_{22}C_3^2}{(1 + b_{21}C_2 + b_{22}C_3 + b_{23}C_4)^2} + 2k_4(\sqrt{a} - a).$$

Начальными условия заданы в виде: $C(0, t) = C_i^0, i = 1, \dots, 6, a(\tau, 0) = 1$.

Была решена задача поиска оптимального температурного режима. В качестве критерия оптимальности выбрано требование получения максимального выхода изопрена. Полученный оптимальный температурный режим представлен на нис. 1.

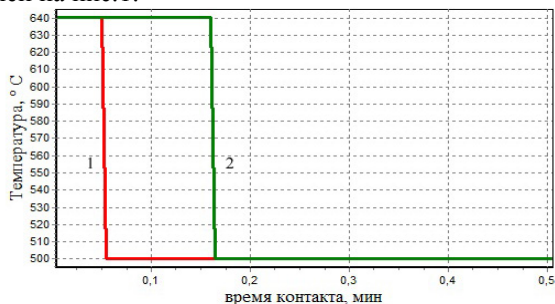


Рис. 1. Оптимальный температурный режим: 1 - на свежем катализаторе, 2 - через 2 ч работы

Литература

- [1] Берзина Д.В., Мустафина С.А. Построение математической модели процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен с учетом дезактивации катализатора // Журнал средневожского математического общества. – Саранск. 2014. Т. 16, № 3. С. 32-33.

СЕКЦИЯ «ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»

УДК 387.14

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В МАХИМА

Букушева А.В.

ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», г. Саратов, Россия

Для организации самостоятельной работы студентов по дисциплине «Компьютерная геометрия и геометрическое моделирование» удобно использовать свободно распространяемые пакеты прикладных программ, в частности Махима. Среди возможностей системы Махима – большая библиотека функций для решения задач линейной алгебры, построение двумерных и трёхмерных графиков, использование широкого спектра математических функций, дифференцирование и интегрирование функций и многое другое.

В Махима имеется несколько альтернативных библиотек для отображения графиков функций, наборов точек, трехмерных тел и т.д. По умолчанию используется библиотека plot, но для решения некоторых задач может оказаться удобнее библиотека draw. Перед использованием draw необходимо загрузить пакет командой load(draw). Для построения графиков функций, заданных неявно, используется команда implicit_plot (пакет load("implicit_plot")).

Вычислительные возможности Махима можно использовать для вычисления кривизны и кручения кривой, нахождение первой и второй квадратичных форм поверхностей, геодезической, нормальной, главных кривизн поверхностей и др. Например, вектор задается в виде списка: u:[u1,u1,u3]. Скалярное произведение векторов задается точкой: u.v. Для вычисления векторного произведения векторов загружается пакет load("vect") и используется команда express(u~v).

В качестве примера рассмотрим программу для составления уравнения эволюты кривой $x=x(t)$, $y=y(t)$ в Махима:

```
(%i1) J(a):=[-a[2],a[1]];
(%i2) v(c,t):=sqrt(diff(c(t),t).diff(c(t),t));
(%i3) kappa(c,t):=diff(c(t),t,2).J(diff(c(t),t))/(diff(c(t),t).diff(c(t),t))^(3/2);
(%i4) T(c,t):=diff(c(t),t)/v(c,t);
(%i5) evoluta(c,t):=c(t)+1/kappa(c,t)*J(T(c,t));
```

Например, для составления эволюты кривой $x=acost$, $y=bsint$ вводим: assume(a>0,b>0); c(t):=[a*cos(t),b*sin(t)]. Далее v(c,t), kappa(c,t), evoluta(c,t). Для построения кривой, заданной параметрическими уравнениями, используем команду parametric.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГИС-ПРОГРАММ ПРИ ДЕШИФРИРОВАНИИ

Максимова С.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Дешифрование – это процесс извлечения разнообразных информационных данных из фотоизображений земной поверхности. Существенное значение при дешифрировании аэрофотоснимков имеют косвенные признаки, основанные на связях и взаимозависимостях объектов местности. Зная географические закономерности, можно по прямым признакам опознать какие-то объекты и по ним выявить связанные с ними другие, хотя на снимке они не изображены.

Космическое зондирование, интенсивно развивающиеся в последние десятилетия, предоставило наукам о Земле новые возможности для исследования земной поверхности. Часть данных дистанционного зондирования сразу поступает в цифровом виде, что позволяет непосредственно использовать для их обработки современные компьютерные технологии.

Средства обработки и дешифрирования данных дистанционного зондирования – цифровые фотограмметрические станции. Предназначены для обработки обычных фотографических и цифровых изображений земной поверхности, полученных методами аэрофото- и космической съемки (OrthoBase, PhotoMod, ЦФС “Дельта”, ЦФС “Талка”, АФС SD2000).



Рис. 1. Дешифрирование аэрофотоснимка с. Ермеркеево:
А - ортофотоплан; Б - полученная карта.

На рис. 1 представлены ортофотоплан и карта, полученная мною при помощи дешифрирования данного ортофотоплана в ГИС Панорама. При дешифрировании были использованы прямые и косвенные признаки дешифрирования.

РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЙ БАЗ ДАННЫХ СРЕДСТВАМИ MICROSOFT SQL SERVER И DELPHI

Нафикова Альбина Ринатовна

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

На сегодняшний день использование баз данных и информационных систем становится неотъемлемой частью функционирования любых организаций и предприятий. В связи с этим большую актуальность приобретает освоение принципов построения и эффективного применения соответствующих технологий и программных продуктов.

В данной работе рассматриваются некоторые вопросы применения среды программирования Delphi для разработки приложений баз данных с использованием системы управления базами данных Microsoft SQL Server [1]. Выполнен обзор различных технологий доступа к данным, а также средств Delphi, используемых при создании программ для работы с базами данных: утилит, модулей данных, визуальных и не визуальных компонентов. Изложены основы построения запросов и отчетов с помощью соответствующих компонентов технологии ADO. Для разработки отчетов используется генератор FastReport, который предоставляет для этого все необходимые инструменты и среди других подобных программ занимает особое место в силу повышенного удобства для конечного пользователя

По результатам данной работы разработано учебное пособие для студентов вузов направлений «Прикладная математика и информатика», «Математическое обеспечение и администрирование информационных систем», «Бизнес-информатика».

Пособие состоит из цикла лабораторных работ, содержащих необходимые теоретические сведения по рассматриваемой теме, демонстрационные примеры, задания для самостоятельной работы и контрольные вопросы. Методика изложения материала позволяет использовать пособие для самостоятельной работы при наличии знаний среды программирования Delphi и системы управления базами данных Microsoft SQL Server.

Литература

[1] Нафикова А.Р. Практическое руководство по Microsoft SQL Server: учеб. пособие. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2014. – 137 с.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ КАТОДНОЙ ЗАЩИТЫ ТРУБОПРОВОДА

Хисаметдинов Ф.З.

Сибайский институт (филиал) Башкирского государственного университета, г. Сибай, Россия

Одним из способов борьбы с коррозией подземных трубопроводов является катодная защита (КЗ). На этапе проектирования и эксплуатации КЗ возникают задачи выбора параметров системы, обеспечивающих ее эффективность [1]. Для решения данных задач широко применяются методы математического и компьютерного моделирования.

При плановом обслуживании систем КЗ производятся контрольные измерения защитного потенциала вдоль защищаемого участка трубопровода. Правильная интерпретация результатов измерений позволяет получить объективную оценку состояния изоляции трубопровода на конкретном участке.

В работе на основе метода фиктивных источников [2] построена математическая модель, позволяющая исследовать параметры электрохимической системы катодной защиты подземного трубопровода, в частности определять на основе известных значений разности потенциалов на границе «грунт-труба» величину удельного сопротивления изоляции трубы.

На основе предложенной модели разработана программа на языке C++ для компилятора GNU GCC в интегрированной среде разработки Code::Blocks и проведены вычислительные эксперименты на основе реальных данных. Полученные результаты позволяют сделать выводы о возможности применения данного подхода для решения практических задач, связанных с интерпретацией данных контрольных измерений для систем катодной защиты подземных трубопроводов.

Литература

1. Ткаченко, В.Н. Анализ поля токов катодной защиты трубопроводной сети / В.Н. Ткаченко. // Защита металлов. – 2006 – Т.42, №5. – С.132–135.
2. Болотнов, А.М. Компьютерное моделирование электрических полей в системах катодной защиты трубопроводов / А.М. Болотнов, С.Р. Гарифуллина, Н.Н. Глазов, Н.П. Глазов, М.А. Башаев // Вестник компьютерных и информационных технологий. – 2009. №5. С. 27–32.

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ СОЗДАНИЯ КАРТ ПРИРОДЫ В ГИС-ПРОГРАММАХ

Якимов М.С.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

На рубеже тысячелетий картография испытывает серьезнейшую перестройку. Уходят в прошлое аналоговые методы создания и использования карт, уступая место новым электронным технологиям. Картографирование природы — комплексное и отраслевое — имеет в нашей стране свою историю и большой опыт. Оно возникло как логическое следствие соединения двух потоков: развития общей картографии и прогресса в изучении природных условий [1, с. 12].

Разработка и применение совершенно новой «безбумажной» информационной технологии на основе компьютеризации связано с эффективным использованием карты и содержащейся в ней информации. Современные компьютерные технологии позволяют выполнять целенаправленную обработку и автоматизированную интерпретацию огромной массы картографической информации [2, с. 23].

Электронная карта - это цифровая картографическая модель, визуализированная или подготовленная к визуализации на экране средства отображения информации в специальной системе условных знаков, содержание которой соответствует содержанию карты определенного вида и масштаба.

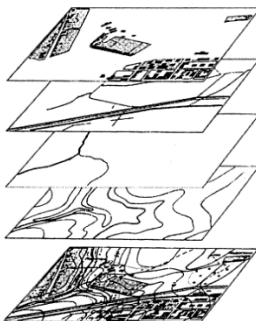


Рис. 1. Структура электронной карты

Отображение слоев идет сверху (обычно это слои с подписями, линейными или точечными знаками) вниз (слои с площадными знаками). В итоге при наложении слоев друг на друга получается карта.

Литература

1. Берлянт А.М. Геоинформационное картографирование. – М.: 1997 – 64с.
2. Леонтьев Н.Ф. Тематическая картография. – М.: Наука, 1981. – 104 с.

УДК 330.45

**ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ
ЛОТКИ-ВОЛЬТЕРРА К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭНЕРГОСИСТЕМЫ
РЕГИОНА**

Каширина Е.С.

ФГБУН Институт социально-экономических исследований Российской академии наук, г. Уфа, Россия

На сегодняшний день перед Россией и ее регионами встает угроза энергодефицитности. Одним из способов решения этой проблемы является использование возобновляемых источников энергии, при условии их грамотного вливания в энергосистему.

Энергетические системы по своей сути являются сложными системами, для которых характерны открытость, целеустремленность, динамичность и иерархичность. С учетом чего математическое описание энергосистем требует использования специфических подходов, таких, например, как синергетический.

В рамках синергетической науки выработан набор базовых математических моделей, к которым относится модель Лотки-Вольтерра. На ее основе построена система дифференциальных уравнений использования традиционных (ТИЭ) и возобновляемых (ВИЭ) источников энергии:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax - mxy, \\ \frac{dy}{dt} = kmxy - cy, \end{cases} \quad (1)$$

где x – производство электроэнергии на базе ВИЭ, y – производство электроэнергии на основе ТИЭ.

Численный расчет коэффициентов системы проводился по данным статистической отчетности Российской Федерации и Республики Башкортостан. Результаты, представленные в [1] показывают, что система (1) может быть использована для моделирования сложившегося состояния параметров энергетической системы и для прогноза поведения энергосистемы с учетом различных начальных условий.

Литература

1. Гайнанов Д.А., Кантор О.Г., Каширина Е.С. Моделирование энергетической системы Российской Федерации с помощью модели Лотки-Вольтерра // Инновационные технологии управления социально-экономическим развитием регионов России: Материалы VII Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. В 2-х частях. Часть I. – Уфа: ИСЭИ УНЦ РАН, 2015. – С. 259-264

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОРТФЕЛЯ ПРОЕКТОВ

Перемолотова Наталья Владимировна
(науч.рук. Беляева М.Б., к.ф.-м.н., доцент)

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета,
г. Стерлитамак, Россия

В работе рассматривается связь управления проектами со стратегическим планированием на основе портфельного управления.

Современная концепция управления проектами заключается в идее создания организаций, развитие, изменение деятельности, а иногда и сама деятельность которых может быть представлена как совокупность различных проектов, обеспечивающих достижение именно в совокупности стратегических целей организации.

В соответствии с [2], под проектом будем понимать «ограниченное во времени целенаправленное изменение отдельной системы с установленными требованиями к качеству результатов, возможными рамками расхода средств и ресурсов и специфической организацией». На прединвестиционной фазе жизненного цикла проекта важнейшим этапом является оценка эффективности проекта. Эффективность проекта – это категория, отражающая соответствие проекта целям и интересам его участников [1].

В построенной математической модели рассматривается совокупность проектов, каждый из которых оценивается по k критериям. Целевая функция $F(x)$, $F: \mathfrak{R}_k^+ \rightarrow \mathfrak{R}_1$ монотонно возрастает по всем переменным $x = (x_1, x_2, \dots, x_k)$ – вектор оценок. Кроме того, потребуем, чтобы критерий эффективности был согласован с отношением Парето – доминирования векторов оценок.

Задача максимизации $F(x)$ на допустимом множестве проектов является задачей дискретной оптимизации (в частном случае – при одном ограничении – задачей о ранце), для решения которой применяют метод динамического программирования.

Литература

1. Коссов В.В., Лившиц В. Н., Шахназаров А. Г. Методические рекомендации по оценке эффективности инвестиционных проектов.: – М.: ОАО «НПО «Изд-во «Экономика», 2000. – 421 с.
2. Новиков Д. А. Теория управления организационными системами. – М.: ИПУ РАН, 2005. – 472 с.

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ»

УДК 371.261

ЗАМЕЩЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ФУНКЦИЙ ПРЕПОДАВАТЕЛЯ ТЕХНОЛОГИЯМИ В СИСТЕМЕ СОВРЕМЕННОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Павленко Виктор Александрович , Атнагулов Арсэн Ильгизович
Башкирский государственный аграрный университет, г.Уфа, Россия

Развитие и изменение современного образования в наше время определяются несколькими основными тенденциями. Одной из них, несомненно, является повышение роли техники и различных программ и приложений, которые способны изменить подход к преподаванию отдельных дисциплин, как в части работы с теоретическим материалом, так и при проверке знаний обучаемых.

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. Одной из них является система 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.

Помимо этого, различные приложения, например, eauthor, позволяют создавать не просто электронные версии бумажных учебников, а вполне себе современные учебные пособия, в которых возможно не просто изучение, а структурирование информации и проведение промежуточного контроля в различных формах, от результатов которого зависит перемещение между изучаемыми темами.

Авторами возможности обоих этих вариантов модернизации обучения опробованы, выявлены свои плюсы и минусы, оценены перспективы.

Литература

[1] Анисимов А.М. Работа в системе дистанционного обучения Moodle. Учебное пособие. 2-е изд. испр. и дополн.– Харьков, ХНАГХ, 2009. - 292 стр.

УДК 004.728.4

МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ ТЕМЫ «ПРОЕКТИРОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ СЕТЕЙ»

Зиангирова Л.Ф.

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

В соответствии с ФГОС ВПО по направлению подготовки «Прикладная информатика» выпускник должен обладать определенными профессиональными компетенциями в проектировании компьютерных сетей: способностью ставить и решать прикладные задачи с использованием современных ИКТ технологий, эксплуатировать и сопровождать информационные системы и сервисы.

Рассмотрим в качестве примера методику использования образовательного комплекса «Вычислительные системы, сети и телекоммуникации» при изучении темы «Проектирование компьютерных сетей». Согласно учебному плану и программы дисциплины «Вычислительные системы, сети и телекоммуникации» на данную тему отведено 4 часа лекций и 10 часов лабораторных работ [1].

В образовательном комплексе представлены теоретические сведения по проектированию компьютерных сетей. В частности, при изучении темы «Проектирование компьютерных сетей» применяется компьютерная система NetCracker Technology. При выполнении лабораторных работ студенты: самостоятельно создают модели сети, задают трафики и получают результаты моделирования; знакомятся с распространенными конфигурациями сетей; применяют NetCracker для анализа поведения существующего сетевого проекта в различных сценариях прохождения трафика; знакомятся с типовыми многоуровневыми конфигурациями корпоративных сетей.

После рассмотрения индивидуального задания и вопросов для самостоятельного освоения целесообразно предложить задание на сбор сети с заданной топологией и спецификациями.

Применяя данную методику при изучении темы «Проектирование компьютерных сетей» можно создавать проекты вычислительных сетей различной сложности/топологий и проводить анализ, используя технологию имитационного моделирования.

Литература

1. Зиангирова, Л.Ф. Методика изучения темы «Проектирование компьютерных сетей» при обучении студентов по направлению подготовки «Прикладная информатика» / Л.Ф. Зиангирова // Информатика и образование. 2014. №9(258). С. 62-63.

ФОРМИРОВАНИЕ НАУЧНОЙ КАРТИНЫ МИРА НА ПРИМЕРЕ ЛИТЕРАТУРНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

Канафина Г.В.

Башкирский Государственный Университет, г. Уфа, Россия

Современные уроки естествознания нацелены не только на передачу и усвоение знаний о природе, но и на формирование на их основе первоначальных представлений и понятий о научной картине мира, интеллектуальное развитие, приобщение школьников к культуре и систематической творческой деятельности.

Рассмотрим, как можно формировать понятия об опасных атмосферных явлениях. Опасные явления в атмосфере в кучево-дождевых облаках кристаллы льда, капли воды и другие частицы все время находятся в движении, сталкиваются друг с другом, вырабатывая и накапливая электричество. Начинается гроза - опасное атмосферное явление, которое всегда сопровождается многократными электрическими разрядами-молниями и громом. Звук грома распространяется на расстояние до 18 км. При грозе бывают молнии, сильные шквалистые ветры и ливневые осадки с градом. Ребята могут делиться своими впечатлениями, мыслями, воспоминаниями об этом грозном явлении. Для усиления ими восприятия понятий гроза, молния можно использовать отрывок из произведения "Детские годы Багрова-внука" С.Т. Аксакова. "В это время, кажется 1-го июня, случилась жестокая гроза, которая произвела на меня сильное впечатление страха. Гроза началась вечером, часу в десятом; мы ложились спать; прямо перед нашими окнами был закат летнего солнца и светлая заря озаряла розовым светом нашу обширную спальню, то есть столовую; я стоял возле моей кровати и молился богу. Вдруг страшный громовой удар потряс весь дом и оглушил нас; я бросился в свою кровать и очень сильно ушиб себе ногу. Несколько минут я не мог опомниться; опомнившись, я увидел что сижу на коленях у Евсеича, что дождь льет как из ведра и что комната освещена не зарею, а заревом от огня. Евсеич рассказ мне, что это горит соборная Троицкая колокольня, которую зажгла молния." [1].

Далее можно предложить сравнить 2 текста: первый - научный (из учебника), второй - литературный, что позволит учащимся лучше усвоить материал. Такой подход к изучению, на наш взгляд, позволит сделать обучение более эффективным, ибо происходит формирование понятийного аппарата как визуального (наглядного), так и интерактивного (как действовать во время грозы).

Литература

1. Аксаков С.Т. Детские годы Багрова-внука. Семейная хроника. Уфа: Башкирское книжное издательство, 1991. 448 с.

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Синицын В.Е.	3
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В СОВРЕМЕННОЙ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКЕ: ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ	
Синицын Вл.Е., Овчинников А.С., Бострем И.Г., Кишине Дж.	4
РЕЗОНАНСНОЕ УВЕЛИЧЕНИЕ СДС В СОЛИТОННОЙ РЕШЕТКЕ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА ПРИ НЕ ЖЕСТКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ	
Лукманова Р.Ф., Лукманов А.Р., Измаилов Р.Н., Янбеков А.А.	6
ШВАРЦШИЛЬД - ФАНТОМНАЯ КРОТОВАЯ НОРА С ТОНКОЙ ОБОЛОЧКОЙ: АНАЛИЗ СТАБИЛЬНОСТИ РЕШЕНИЯ	
Гумеров А.М., Кудрявцев Р.В., Абакумова Н.Н.	7
РЕЗОНАНСНЫЕ КИНК-ПРИМЕСНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МОДЕЛИ СИНУС-ГОРДОНА С УЧЁТОМ ВНЕШНЕЙ СИЛЫ И ЗАТУХАНИЯ	
Викулин Д.В., Работягова И.С.	8
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА СКАЛЯРНОГО ПОЛЯ ДЛЯ КОНЕЧНОГО ЧИСЛА ЗАМКНУТЫХ НУЛЬ-СТРУН ПОСТОЯННОГО РАДИУСА НАХОДЯЩИХСЯ В ОДНОЙ ПЛОСКОСТИ И ДВИЖУЩИХСЯ В ОДНОМ НАПРАВЛЕНИИ	
Степанов С.В., Екомасов А.Е., Альмухаметов А.Р.	9
ДИНАМИКА И ТРАНСФОРМАЦИЯ ВИХРЕЙ В ПРОВОДЯЩИХ НАНОСТОЛБЧАТЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ	
Мажитова Ф.А., Гареева З.В.	10
ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ДВУХСЛОЙНОЙ ПЛЕНКЕ	
Халилова Я.А.	11
ФЛЕКСОМАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ ДОМЕННОЙ СТЕНКИ В ОДНООСНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ	
Фахретдинов М.И., Закирьянов Ф.К.	12

ДИСКРЕТНЫЕ БРИЗЕРЫ В НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ ДНК ПЕЙРАРА-БИШОПА

Кулбакова А.К., Валитова А.Ф., Янбеков А.А., Измаилов Р.Н.....13
ОСОБЕННОСТИ ГРАВИТАЦИОННОГО МИКРОЛИНЗИРОВАНИЯ
КРОВОТЫМИ НОРАМИ ЭЛЛИСА

**Абакумова Н.Н., Кудрявцев Р.В., Гумеров А.М.,
Муртазин Р.Р., Васильева Ю.С.....14**
РЕЗОНАНСНАЯ ДИНАМИКА ДОМЕННЫХ СТЕНОК В
МНОГОСЛОЙНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ СТРУКТУРАХ

**Смолякова Е.Е., Загребин М.А., Соколовский В.В.,
Бучельников В.Д.....15**
ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ,
МАГНИТНЫХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ
NI-CO-MN-CR-SN

Валитова А.Ф., Кулбакова А.К., Янбеков А.А., Измаилов Р.Н.....16
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОСМОЛОГИЧЕСКОЙ КОНСТАНТЫ НА
УГОЛ ОТКЛОНЕНИЯ СВЕТА

Янбеков А.А., Султанов И.Ф., Измаилов Р.Н., Лукманова Р.Ф.....17
ПАРАМЕТРЫ ГРАВИТАЦИОННОГО ЛИНЗИРОВАНИЯ
СВЕРХМАССИВНЫХ ОБЪЕКТОВ В ЦЕНТРЕ ГАЛАКТИКИ

Яфизова Р.А., Измаилов Р.Н.....18
ОЦЕНКА ПЛОТНОСТИ МАТЕРИИ В ТЕОРИИ ГРАВИТАЦИИ
ЭДДИНГТОНА-БОРНА-ИНФИЛЬДА

Балашова В.Н., Закирьянов Ф.К., Якушевич Л.В.....19
УПРАВЛЕНИЕ ДВИЖЕНИЕМ КИНКОВ В НЕОДНОРОДНОЙ МОДЕЛИ
МОЛЕКУЛЫ ДНК

Нугуманов А.Г.....20
ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И КРИТИЧЕСКИХ
ЯВЛЕНИЙ В НАНОПЛЕНКАХ МУЛЬТИФЕРРОИКОВ МЕТОДАМИ
МОНТЕ-КАРЛО

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА И НАНОФИЗИКА»

Адамова М.Е., Жуков Е.А.....21

АНАЛИЗ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВОЛН ЛЭМБА В КРИСТАЛЛЕ FeVO_3

Комина О.Ю., Жуков Е.А., Щербаков Ю.И......22
СКОРОСТЬ ДОМЕННОЙ ГРАНИЦЫ В YFeO_3 ПРИ ЕЁ ДВИЖЕНИИ В ПОСТОЯННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Акбутин Г.Д., Шарипов Т.И......23
АРТЕФАКТЫ, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МОЛЕКУЛ ДНК МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Беленков М.Е., Чернов В.М......24
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ МОНОАТОМНЫХ СЛОЕВ ГРАФЕНА И НИТРИДА БОРА

Полетаев Д.А......25
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ НАНОАНТЕНН ДЛЯ ЗАЩИТЫ ОТ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

СЕКЦИЯ «НАНОМАТЕРИАЛЫ И НАНОЭЛЕКТРОНИКА»

Горбачук В.В., Стойков И.И., Ризванов И.Х......26
СООТНЕСЕНИЕ ПИКОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ПОЛИАНИЛИНА, ПОЛУЧЕННОГО ОКИСЛИТЕЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИЕЙ АНИЛИН-ЗАМЕЩЕННЫХ ТИАКАЛИКСАРЕНОВ

Рысаева Л.Х., Баймова Ю.А., Дмитриев С.В......27
АЛМАЗОПОДОБНЫЕ УГЛЕРОДНЫЕ ФАЗЫ И ИХ МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Габдрахманова Л.А., Альмухаметов Р.Ф......28
ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КОБАЛЬТЕ

Гайнетдинова Ю.М......30
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ПЕРОКСИДОМ КАЛЬЦИЯ

Юнусова А.В......31
НАНОРАЗМЕРНЫЙ ГЕТИТ В СОСТАВЕ ПИТАТЕЛЬНОЙ СМЕСИ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ СОДЕРЖАНИЯ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ В РАСТИТЕЛЬНЫХ ТКАНЯХ

Киан М., Юсупов А.Р., Сатыев А.И.....	32
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЧЕСКОГО И ГИДРОСТАТИЧЕСКОГО ДАВЛЕНИЯ НА СВОЙСТВА ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА	
Сатыев А.И., Набиуллин И.Р., Гадиев Р.М., Киан М.....	33
РАЗРАБОТКА ВАКУУМНОГО ТЕРМОСТАТА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ	
Абдрахманов Э.К, Грешняков В.А., Беленков Е.А.....	34
РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ БИНАРНЫХ ГРАФАНОВЫХ СЛОЕВ НА ОСНОВЕ СЛОЕВ ГРАФЕНА L_{4-8} , L_{4-6-12} и L_{3-12}	
Беленкова Т.Е., Чернов В.М.....	35
СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СЛОЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ДВУХ- И ТРЕХКООРДИНИРОВАННЫХ АТОМОВ УГЛЕРОДА, ПОЛУЧАЮЩИХСЯ ИЗ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ L_{4-8}	
Бухалов А.В., Беленков Е.А.....	36
МОДЕЛИРОВАНИЕ УГЛЕРОДНЫХ НАНОСТРУКТУР ИЗ АТОМОВ В $SP+SP^3$ ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЯХ	
Коченгин А. Е., Беленков Е.А.....	37
РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТ ПОЛИМОРФОВ ГРАФЕНА	
Шаповалова К.Э., Беленков Е.А.....	38
РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ОСНОВЕ ГРАФЕНОВЫХ СЛОЕВ L_{4-8} , L_{4-6-12} и L_{3-12}	
Тиньгаев М.И., Беленков Е.А.....	39
ГИБРИДНЫЕ ФАЗЫ, ПОЛУЧАЕМЫЕ ИЗ ЖГУТОВ ЗИГЗАГООБРАЗНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	
Якупов Л.Ф., Лачинов А.Н.....	40
ОСОБЕННОСТИ ЭФФЕКТА ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ ПО ДАВЛЕНИЮ В ТОНКИХ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ	
Муллагалиев И.Н., Салихов Р.Б.....	41
ОРГАНИЧЕСКИЕ ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ	

Фазылов Ф.И., Гарифуллин Э.Д., Юсупов А.Р.....42
ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА CELIV ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ
ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

Салихов Т.Р., Юмагузин Ю.М.....43
ТОНКИЕ ПЛЕНКИ ПОЛИАНИЛИНА В ЭЛЕКТРОНИКЕ

Егоров А.А.....44
ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДОВ НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛОУГЛЕРОДНОГО
МАТЕРИАЛА И МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

**Корнилов В.М., Карамов Д.Д., Габидуллина Г.Ш.,
Габидуллина Г.Г., Гибадуллин В.В., Гимазетдинова Л.Р.....45**
АТОМНО-СИЛОВАЯ МИКРОСКОПИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ
ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Камалеев М.Ф., Бадретдинов Б.Р., Салихов Р.Б.....46
ПОЛИМЕРНЫЕ ДАТЧИКИ ВЛАЖНОСТИ

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКОЕ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ»

Замковская А.И., Максимова Е.М.....47
СИММЕТРИЯ ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

Мукашев К.М.....48
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ РАДИАЦИОННОЙ
ПОВРЕЖДАЕМОСТИ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ

Хазгалиев Р.Г., Халиков А.Р., Дмитриев С.В.....49
МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА НА ГРАНИЦЕ
КОНТАКТА АТОМОВ ТИТАНА И НИКЕЛЯ

Швец К.С., Халикова Г.Р., Корзникова Е.А., Трифонов В.Г.....52
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА
СТРУКТУРУ И МИКРОТВЕРДОСТЬ АЛЮМИНИЕВОГО
КОМПОЗИЦИОННОГО СПЛАВА АЛ30/18SiC_p

**Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Скоков К.П., Карпенков Д.Ю.,
Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.....53**
ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА
МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДАХ

$Gd_{100-x}Ga_x$ ($x = 0..10$)

**Ульянов М.Н., Таскаев С.В., Скоков К.П., Карпенков Д.Ю,
Ховайло В.В., Батаев Д.С., Пелленен А.П.....54**

**ВЛИЯНИЕ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА
МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ
 $Gd_{100-x}B_x$ ($x = 0, 10, 15$)**

Абдрафикова Р.И., Ишембетов Р.Х., Кубенова М.М.....55

**ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Ag_xCu_{(2-x)}Se$
($x=0,01;0,02;0,03;0,04,$) ПРИ ИЗМЕНЕНИИ СОСТАВА МЕТОДАМИ
КУЛОНОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ**

Бикбулатов А.И., Ишембетов Р.Х., Кутербекоев К.А.....56

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЭФФЕКТ ПЕЛЬТЬЕ В $Ag_{0.03}Cu_{1.97}Se$, $Ag_{0.04}Cu_{1.96}Se$

Шарипов Х.А., Ишембетов Р.Х., Кутербекоев К.А., Кубенова М.М.....57

**ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕНОС В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Ag_xCu_{(2-x)}Se$
($x=0,01;0,02;0,03;0,04,$) В НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ**

Шираев А.А., Ишембетов Р.Х., Нурахметов Т.Н.....58

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ $Li_{0,06}Cu_{1,94}S$, $Li_{0,1}Cu_{1,9}S$

Юнусов Р.В., Ишембетов Р.Х., Нурахметов Т.Н.....59

**ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ И ИОННАЯ ТЕРМО-ЭДС СПЛАВА
 $Li_{0,04}Cu_{1,96}S$**

Абдрафикова Р.И., Ишембетов Р.Х., Жунусбеков А.А.....60

ЭЛЕКТРОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ СПЛАВОВ $Li_{0,06}Cu_{1,94}S$ и $Li_{0,1}Cu_{1,9}S$

Басырова Е.Р., Тимиров Ю.И., Скалдин О.А.....61

**СТРУКТУРА И ДИНАМИКА ДЕФЕКТОВ ХИРАЛЬНОГО НЕМАТИКА В
ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

Мухаметдинова О.Э., Автократова Е.В., Ситдиков О.Ш.,

Маркушев М.В.....62

**СВЕРХПЛАСТИЧНОСТЬ ТЕРМИЧЕСКИ НЕУПРОЧНЯЕМОГО
АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА 1570С, ПОДВЕРГНУТОГО
РАВНОКАНАЛЬНОМУ УГЛОВОМУ ПРЕССОВАНИЮ И
ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ПРОКАТКЕ**

Ильясов Р.Р., Автократова Е.В., Крымский С.В.,

Ситдиков О.Ш., Маркушев М.В. Михайловская А.В., Кищик М.С.....63
ЭФФЕКТ ГЕТЕРОГЕНИЗАЦИИ ПО ОСНОВНЫМ УПРОЧНЯЮЩИМ
ФАЗАМ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ КРИОПРОКАТАННОГО
АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА Д16

**Крымский С.В., Михайловская А.В., Котов А.Д., Яковцева О.А²,
Автокротова Е.В., Ситдиков О.Ш., Маркушев М.В.....64**
ЭФФЕКТ РАЗМЕРА ЧАСТИЦ Т-ФАЗЫ НА СТРУКТУРУ И ТВЕРДОСТЬ
КРИОПРОКАТАННОГО И СОСТАРЕННОГО АЛЮМИНИЕВОГО
СПЛАВА Д16

Степанов Ю.М., Хуснутдинов Д.М.....65
ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ИОННЫЙ ПЕРЕНОС

**Сафаргалиев Д.И., Курбангулов А.Р., Биккулова А.В.,
Нигматуллина Г.Р.....66**
СТРУКТУРА В ИНТЕРКАЛАТНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ НА ОСНОВЕ
ДИХАЛЬКОГЕНИДА ЦИРКОНИЯ

Ахметгалиев Б.М.....67
ВОЗДЕЙСВИЕ РАДИОВОЛН МИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА НА
БИОЛОГИЧЕСКУЮ ТКАНЬ

СЕКЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ РАДИОТЕХНИКИ И СВЯЗИ»

Лопатюк А.В.....68
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ВОСП-СР, В С И L
ДИАПАЗОНАХ

Салимгареев Р.Р., Лопатюк А.В.....70
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕХНОЛОГИИ WDM

Хайруллин Т.Н., Лопатюк А.В.....71
ИССЛЕДОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК
X-ОБРАЗНОГО МНОГОСЛОЙНОГО ПЛАНАРНОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ

Рыжиков О.А., Лопатюк А.В.....72
ПРОЕКТИРОВАНИЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ЛИНИИ СВЯЗИ ДЛЯ
НУЖД ОАО РЖД НА УЧАСТКЕ УФА-КРОПАЧЕВО

Борисова Р.В., Лопатюк А.В.....72

ИССЛЕДОВАНИЕ НАПРАВЛЕННОГО ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ОТВЕТВИТЕЛЯ

Валиуллин А.Ф......74
АНАЛИЗ ДИСПЕРСИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ МИКРОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ОПТИЧЕСКИХ ВОЛОКОН ПРИ ДЕФЕКТАХ КОНСТРУКЦИИ

СЕКЦИЯ «ГЕОФИЗИКА»

Гонцова С.С., Максимова Е.М......76
МИНЕРАЛЫ ВНЕЗЕМНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Гаврилов А.К., Викторов С.В......77
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ ЭЛЕКТРОКАРОТАЖА ВЕРТИКАЛЬНОЙ СКВАЖИНЫ

СЕКЦИЯ «ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА»

Сарапулова В.В......78
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РОСТА ЗАТРУБНОГО ДАВЛЕНИЯ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ГДИС В ДОБЫВАЮЩЕЙ СКВАЖИНЕ С ВЫСОКОЙ ОБВОДНЕННОСТЬЮ ПРОДУКЦИИ

Бобренёва Ю.О., Иткулова Ю.А., Марьин Д.Ф., Давлетбаев А.Я......79
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СКИН-ЗОНЫ НА ОСНОВЕ ТЕРМОГДИС ОСТАНОВЛЕННЫХ НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИН*

Шарипов Р.А......80
ЗУБНЫЕ ИМПЛАНТАТЫ ЧУЛОЧНОГО ТИПА

Рабцевич Ю.А., Иткулова Ю.А., Давлетбаев А.Я......81
ДИНАМИКИ ТЕМПЕРАТУРЫ В НАГНЕТАТЕЛЬНЫХ СКВАЖИНАХ НА ОСНОВЕ ТРЕХМЕРНОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Русинов А.А., Чиглинцева А.С......82
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАГНЕТАНИЯ МЕТАНА В СНЕГ, СОПРОВОЖДАЕМОЕ ГИДРАТООБРАЗОВАНИЕМ

Рафикова Г.Р......83
ЗАМЕЩЕНИЕ МЕТАНА ДИОКСИДОМ УГЛЕРОДА В ГАЗОГИДРАТЕ ПРИ ДОБЫЧЕ МЕТАНА ИЗ ГИДРАТНОГО ПЛАСТА

Сельтикова Е.В., Иткулова Ю.А., Мусин А.А., Давлетбаев А.Я.....	84
АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЭФФЕКТОВ НА ИЗМЕНЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ В ПРИЗАБОЙНОЙ ЗОНЕ ПЛАСТА	
Султанова А.Р.....	85
ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ В ПЛАСТЕ ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ ТЕПЛООБМЕНЕ С ОКРУЖАЮЩИМИ ПОРОДАМИ	
Евграфов Н.А.....	86
НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ПРИТОК ЖИДКОСТИ ИЗ ПЛАСТА В СКВАЖИНУ ЧЕРЕЗ ТРЕЩИНУ ГИДРОРАЗРЫВА	
Шангареев И.И., Назарова А.Ю.....	87
ОЦЕНКА ФАКТОРА СНИЖЕНИЯ ПРОВОДИМОСТИ РАСКЛИНИВАЮЩЕГО МАТЕРИАЛА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ЖИДКОСТИ ГИДРОРАЗРЫВА НА МЕСТОРОЖДЕНИЯХ ЗАПАДНОЙ СИБИРИ	
Тухбатова Э.Р.....	89
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЧ ЭМ ВОЗДЕЙСТВИЯ НА ВОДО- НЕФТЯНЫЕ ЭМУЛЬСИИ	
Петрова Е.Ю.....	90
ТЕМПЕРАТУРНОЕ ПОЛЕ ПЛАСТА ПРИ ЗАКАЧКЕ ЖИДКОСТИ С УЧЕТОМ ТЕПЛООБМЕНА С ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДОЙ	
Кабанова П.К., Картавцева И.А.....	91
ИЗУЧЕНИЕ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДОПИРОВАННЫХ НЕПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЯХ МЕТОДОМ ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	
Хисамов А.А.....	92
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕРМОЗАВОДНЕНИЯ НЕФТЯНОГО ПЛАСТА НА ОСНОВЕ СХЕМЫ ЛОВЕРЬЕ	
Гильманова Г.И.....	93
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ НЕСКОЛЬКИХ ТЫСЯЧ ПУЗЫРЬКОВ В БЕЗГРАНИЧНОЙ ЖИДКОСТИ	
Габбясова А.Р.....	94

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОБЛЕМЫ РЕМАСШТАБИРОВАНИЯ
СКВАЖИННЫХ ДАННЫХ ПРИ ПОСТРОЕНИИ СЕТОЧНОЙ
ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Бухмастова С.В......95
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ
ВЫСОКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА
НЕФТЕШЛАМОВЫЕ РЕЗЕРВУАРЫ

Ишкин Д.З., Нуриев Р.И......96
АНАЛИЗ КРИВЫХ ПАДЕНИЯ ДОБЫЧИ НА ГАЗОВЫХ СКВАЖИНАХ

Аминев Т.Р......97
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КИСЛОТНЫХ
СОСТАВОВ НА ФИЛЬТРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ГОРНЫХ ПОРОД В
УСЛОВИЯХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ
ЗАПАДНОЙ СИБИРИ

Саббахов А.Б......97
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ТЕПЛА В
ТРЕХСЛОЙНОЙ СРЕДЕ

Батырова Л.Д......99
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПРИТОКА ФЛЮИДА К СКВАЖИНЕ В
КОЛЛЕКТОРЕ ТРЕЩИНОВАТОГО ТИПА

Мирошниченко В.Ю......100
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ТЕЧЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ
УГЛЕВОДОРОДОВ В ТРУБОПРОВОДЕ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ
НАГРЕВАТЕЛЕМ

Хабибуллин И.Л., Нигаметьянова Г.А......101
ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ
МНОГОСЛОЙНЫХ СКЛОНОВ КРИОЛИТОЗОНЫ

Белова С.В., Чиглинцева А.С......103
ПРОЦЕСС ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА ИЗ СНЕГА В
ЗАМКНУТОМ ОБЪЕМЕ

Исмагилова И.Р......104

**ЗАДАЧА О ЗАКАЧКЕ МЕЧЕНОЙ ЖИДКОСТИ В СКВАЖИНУ С
ТЕХНОГЕННОЙ ТРЕЩИНОЙ ГИДРОРАЗРЫВА**

Сельтикова Е.В.....106
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И БЕЗРАЗМЕРНЫЙ АНАЛИЗ
ПРОЦЕССА ВНУТРИПЛАСТОВОГО ГОРЕНИЯ

Султангужин Р.Ф.....107
ВОЗДЕЙСТВИЕ СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ НА ВОДНО-
УГЛЕВОДОРОНЫЕ СИСТЕМЫ В ЦЕНТРОБЕЖНОМ ПОЛЕ

Давлетбакова Л.А.....108
ГЕОЛОГИЧЕСКОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОЛЕОТЛОЖЕНИЯ В
СКВАЖИНАХ

Дударева О.В.....109
ОСОБЕННОСТИ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ
НЕЛИНЕЙНОМ ЗАКОНЕ ФИЛЬТРАЦИИ

Шепелькевич О.А., Юмагулова Ю.А.....110
ДИФФУЗИОННАЯ СХЕМА ПРОЦЕССА ГИДРАТООБРАЗОВАНИЯ В
ВОДНОМ РАСТВОРЕ ГАЗА

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ»

Хайдар Г.М., Екомасов Е.Г.....111
ПРОВЕДЕНИЕ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ ПО РАЗДЕЛУ
“УРАВНЕНИЯ ЛАГРАНЖА 2 РОДА” КУРСА “ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
МЕХАНИКА. ОСНОВЫ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД”

Абдуллин А.У., Акманова Г.Р.....112
ПЕРСПЕКТИВЫ СОВЕРШЕНСТВОВАНИЯ МОДУЛЬНО-
РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЫ ОБУЧЕНИЯ И ОЦЕНКИ УСПЕВАЕМОСТИ
СТУДЕНТОВ В КУРСАХ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

Акманова Г.Р., Хизбуллина Р.З.....113
МЕЖПРЕДМЕТНЫЕ СВЯЗИ ДИСЦИПЛИН ЕСТЕСТВЕННО-НАУЧНОГО
ЦИКЛА

ХИМИЯ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ»

- Васильев Е.В.**.....114
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БИС-
ФЕНАТРОЛИНОВЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕТАЛЛЫ ГРУППЫ ХРОМА И
ИХ ОКСОДИЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
- Василюк К.С., Диниахметова Д.Р., Фризен А.К.**.....115
РАДИКАЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ МЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В
ПРИСУТСТВИИ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀
- Диниахметова Д.Р., Фризен А.К.**.....116
ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ СТИРОЛА В ПРИСУТСТВИИ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀
- Ильина М.Г., Хамитов Э.М.**.....117
СТУКТУРА УРАЦИЛА И ЕГО 5,6-ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПРИ
ДЕПРОТОНИРОВАНИИ
- Мирзаянов И.И.**.....118
ДЕФОРМАЦИЯ 1-ГЕТЕРО-1,3-ДИЕНОВ МЕТАЛЛОЦЕНТРОМ КАК
МЕРА ИЗМЕНЕНИЯ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ
КООРДИНИРОВАННЫХ ГЕТЕРОДИЕНОВ
- Плотникова А.В.**.....119
КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КИСЛОТНОСТИ
ГИДРОКСИТАУТОМЕРНОЙ ФОРМЫ ДИМЕТИЛФОСФИТА,
КООРДИНИРОВАННОГО С МЕТАЛЛКАРБОНИЛЬНЫМ ОСТОВОМ
ЭЛЕМЕНТОВ 6 ГРУППЫ
- Шаяхметова Р.Х., Хамитов Э.М.**.....120
НЕКОВАЛЕНТНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СЕТОЧНЫХ И
ЛЕНТОЧНЫХ СТРУКТУРАХ ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА И ЕГО
АНАЛОГОВ
- Шишкина А.Н.**.....121
АЛКОКСИДЫ ИЗОНИТРОЗИЛА КАК СОЕДИНЕНИЯ С
УНИКАЛЬНЫМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ ХИМИЧЕСКОЙ ВЯЗИ

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Абдуллин М.И.....122
ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ ФЕНОЛЬНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ПЛОДОВЫХ ОБОЛОЧЕК ГРЕЧИХИ

Билалова Р.В., Ганиева А.Г., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.....124
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ СОРБЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ
МОЛЕКУЛ МОДИФИЦИРОВАННЫМ УРАЦИЛОМ МИКРОПОРИСТЫМ
ПОЛИМЕРНЫМ СОРБЕНТОМ

**Васильев М.Н., Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я.,
Зигангиров А.С., Цыпышева И.П., Зарудий Ф.С.....125**
КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК ЭФФЕКТИВНЫХ АНТОГОНИСТОВ
АЦЕТИЛХОЛИНОВОГО РЕЦЕПТОРА СРЕДИ ПРОИЗВОДНЫХ
МЕТАНПИРИДО[1,2-А][1,5]ДИАЗОЦИНА [(-)-ЦИТИЗИНА]

**Васильев М.Н., Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я.,
Зигангиров А.С., Зарудий Ф.С.....127**
ОЦЕНКА СТЕРИЧЕСКОЙ КОМПЛЕМЕНТАРНОСТИ НЕКОТОРЫХ
ПРОИЗВОДНЫХ (-) ЦИТИЗИНА С АКТИВНЫМИ ЦЕНТРАМИ 5-
ЛИПОКСИГЕНАЗЫ И ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ

Габидуллина Г.Г., Гайнетдинов В.Р.....129
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ПОЛИМЕРОВ КЛАССА
ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ

Гайнетдинов В.Р. Янов Д.Ф. Габидуллина Г.Г.....131
МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЫ ФОРМАЛЬДЕГИДА
В РАСТВОРЕ АЦЕТОНИТРИЛА

Гайнуллина Ю.Ю.....133
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СОРБЦИИ
ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ НА ПИРИМИДИНОФАНЕ

Шарипова Г.М., Любимова К.С., Ахатова Г.Р., Герчиков А.Я.....134
АНТИОКИСЛИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛОВ
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С РАДИКАЛАМИ И ПЕРОКСИДНЫМИ
СОЕДИНЕНИЯМИ

Ганиева А.Г., Билалова Р.В., Гуськов В.Ю., Кудашева Ф.Х.....135

ПОЛЯРНОСТЬ ПОРИСТЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СОРБЕНТОВ ПРИ
РАЗЛИЧНЫХ ЗАПОЛНЕНИЯХ ПОВЕРХНОСТИ

Р. Р. Гарипова, Д. Ш. Сабиров.....136
DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПРИСОЕДИНЕНИЯ ПЕРОКСИЛЬНЫХ
РАДИКАЛОВ К ФУЛЛЕРЕНАМ C_{60} И C_{70}

Мурзакова Л.И., Зимин Ю.С.....137
КОМПЛЕКСЫ β -ЦИКЛОДЕКСТРИНА С 4- И 5-
АМИНОСАЛИЦИЛОВЫМИ КИСЛОТАМИ: СОСТАВ, УСТОЙЧИВОСТЬ
И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ

Насырова Р.Ф., Хайруллина В.Р., Герчиков А.Я.....138
ОЦЕНКА КОМПЛЕМЕНТАРНОСТИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ
СЕЛЕНОФЕНА С АКТИВНЫМ ЦЕНТРОМ ТОПОИЗОМЕРАЗЫ-1

Панкратова А.П., Зимин Ю.С.....139
КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ОЗОНА С УРАЦИЛАМИ

Петрова А.В., Гарифуллина Г.Г.....140
ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕННЫХ ФЕНОЛОВ НА ИНИЦИИРОВАННОЕ
ОКИСЛЕНИЕ 1,4-ДИОКСАНА

Раянова Ю.Р., Кинзябулатова Г.С.....141
ПРЕВРАЩЕНИЕ КАРБАМИДА В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА
КАРБОАММОФОСФАТА

Сафарьянова Э.Р., Кинзябулатова Г.С.....143
ПОЛУЧЕНИЕ ФТОРОСИЛИКАТА НАТРИЯ НА ОСНОВЕ СУЛЬФАТНО-
СОДОВОЙ СМЕСИ И СУЛЬФАТНОГО РАССОЛА

Смирнов П.С., Гизатова Э.Р.....145
ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ CHEMICAL_DIF_SOLUTION

Терентьев А.О., Сабиров Д.Ш.....146
АНИЗОТРОПИЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ БИСАДДУКТОВ ФУЛЛЕРЕНОВ
 C_{60} И C_{70} , ЭЛЕКТРОНОАКЦЕПТОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ
ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

Тухбатуллина А.А., Сабиров Д.Ш.....147
ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ [2+1]-ЦИКЛОАДДУКТОВ ФУЛЛЕРЕНА $C_{60}X_n$

А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, Н. Н. Агапкина.....148
ОСОБЕННОСТИ КОРРОЗИОННО-ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО
ПОВЕДЕНИЯ СВИНЦА В СУЛЬФАТСОДЕРЖАЩИХ СРЕДАХ

А. Г. Тюрин, А. И. Бирюков, В. С. Мухаметьянов.....149
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СУЛЬФАТ-ИОНОВ НА КОРРОЗИОННО-
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ СТАЛЕЙ С РАЗЛИЧНЫМ
СОДЕРЖАНИЕМ ХРОМА

**Хайруллина В.Р., Васильев М.Н., Герчиков А.Я., Зигангиров А.С.,
Насртдинова Т.Р., Зарудий Ф.С.....150**
МОДЕЛИРОВАНИЕ СВЯЗИ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» В РЯДУ
РАЗНЫХ КЛАССОВ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ВЫРАЖЕННОЙ
НООТРОПНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Шагиева Л.С., Берестова Т.В.....153
ИК-ХАРАКТЕРИСТИКИ БИС- И РАЗНОЛИГАНДНЫХ
АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Ni(II)

Григорьев И.В., Мифтахов Э.Н., Мустафина С.А.....154
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛИМЕРИЗАЦИИ
СТИРОЛА С МАЛЕИНЫМ АНГИДРИДОМ

Икрамов Р.Д., Мустафина С.А.....155
УТОЧНЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ
ОРЕГОНАТОРА

СЕКЦИЯ «ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ»

Аллаяров И.Р., Тухватуллин Р.Ф.....156
ОСОБЕННОСТИ РЕОЛОГИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ РАСТВОРОВ
СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В СМЕСЯХ ЭТАНОЛ-ВОДА

**Ваганова Л.Б., Лизякина О.С., Чегерев М.Г.,
Пискунов А.В., Гришин Д.Ф.....157**
СИНТЕЗ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА С УЧАСТИЕМ *o*-
ИМИНОХИНОНОВ И *o*-ИМИНОСЕМИХИНОНОВ ОЛОВА(IV)*

Biglova Yu.N., Zagitov V.V.....158
METATHESIS POLYMERIZATION OF NEW FULLERENE-CONTAINING
NORBORNENES BY CATALYST GRUBBS 1ST GENERATION

Валиев Д.Р., Шарипова Э.А.....	159
ПРОЦЕССЫ САМООРГАНИЗАЦИИ ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА С МИЦЕЛЛАМИ ЛИОФОБНЫХ ЗОЛЕЙ	
Валиуллина И.И.....	161
ГИДРОЛИЗ ХИТОЗАНА В АЦЕТАТНОМ БУФЕРЕ	
Вильданова Р.Р., Сигаева Н.Н., Валиев Д.Р.....	162
ГИДРОГЕЛЕВЫЙ ДРЕНАЖ НА ОСНОВЕ ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТЫ И ХИТОЗАНА ДЛЯ КОНТРОЛИРУЕМОЙ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ	
Гарифуллина М.Р.....	163
ФЕРМЕНТАТИВНАЯ ДЕСТРУКЦИЯ СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В ПРИСУТСТВИИ НЕОРГАНИЧЕСКОГО ЗОЛЯ ЙОДИДА СЕРЕБРА	
Гимаева Ф.Р., Мустакимов Р.А.....	164
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОГЕННЫХ И НЕИОНОГЕННЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ С МИЦЕЛЛАМИ ЗОЛЯ ЙОДИДА СЕРЕБРА	
Громько Н.В., Ямансарова Э.Т., Зворыгина О.Б., Куковинец О.С., Абдуллин М.И.....	165
МАТЕРИАЛЫ ИЗ ВТОРИЧНОГО РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ ДЛЯ УДАЛЕНИЯ ИОНОВ СВИНЦА ИЗ ВОДЫ	
Загитов В.В., Биглова Ю.Н.....	166
РАДИКАЛЬНАЯ ГОМОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ФУЛЛЕРЕНСОДЕРЖАЩИХ МЕТАКРИЛАТОВ С ВИНИЛОВЫМИ МОНОМЕРАМИ	
Загитов В.В., Базунов А.А.....	167
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОТОРНОГО МАСЛА НА ОСНОВЕ СВОЙСТВ БАЗОВЫХ МАСЕЛ	
Курзова В.В., Шуршина А.С.....	168
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЕКТИНА С НЕКОТОРЫМИ АНТИБИОТИКАМИ	
Лизякина О.С., Ваганова Л.Б., Чегерев М.Г., Пискунов А.В., Гришин Д.Ф.....	169

ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫЕ О-ИМИНОХИНОНЫ В КАЧЕСТВЕ РЕГУЛЯТОРОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ МАССЫ В СИНТЕЗЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА*

Миниахметова С.Р., Чернова В.В.....170
ИЗУЧЕНИЕ РАСТВОРОВ ХИТОЗАНА И СУКЦИНАМИДА ХИТОЗАНА В ПРИСУТСТВИИ ЗОЛЕЙ ЙОДИДА СЕРЕБРА

Мухаммадеева З.В.....171
МОДИФИКАЦИЯ В ТУРБУЛЕНТНЫХ ПОТОКАХ ТИТАНОВЫХ И НЕОДИМОВЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ СИНТЕЗА ПОЛИИЗОПРЕНА

Никитина Д.В.....172
ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛА ИОНИЗАЦИИ И СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ДЛЯ РЯДА МОЛЕКУЛ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩИХ СОБОЙ ПРОИЗВОДНЫЕ ФТАЛЕВОГО АНГИДРИДА

Rikhter N.A., Timerbaeva D.A.....174
Hopfenberg- Hixson-Crowell model

Рязанов К.С., Габитов И.Т., Мустафин А.Г., Ахметханов Р.М.....175
НЕКОТОРЫЕ УРАЦИЛЫ В КАЧЕСТВЕ СТАБИЛИЗАТОРОВ ДЛЯ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

Timerbaeva D.A., Rikhter N.A.....177
KINETIC MODELING ON DRUG RELEASE FROM CONTROLLED DRUG DELIVERY SYSTEMS

Шарипова Э.А., Жукова А.Н.....178
СТАБИЛИЗАЦИЯ ЗОЛЕЙ ЙОДИДА СЕРЕБРА АМФИФИЛЬНЫМИ СОПОЛИМЕРАМИ НА ОСНОВЕ МЕТИЛАКРИЛАТА И ХИТОЗАНА

СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Апаева А.В., Ямансарова Э.Т., Куковинец О.С., Зворыгина О.Б.....179
ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА ДВУХФАЗНУЮ ЭКСТРАКЦИЮ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Борисов И. М., Газизова З.Ш., Фазрахманов И.С., Клецкова Д.И.....180
КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСХОДОВАНИЯ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА В РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДА В ПРИСУТСТВИИ МОЛИБДЕНОВОЙ И ВОЛЬФРАМОВОЙ КИСЛОТ

- Борисова Ю.Г., Мавлеткулова Р.Р., Андреева М.Д.,
Раскильдина Г.З.....182**
АЛКИЛИРОВАНИЕ 1,3-ДИОКСАЦИКЛОАЛКАНОВ ЦИС-1,4-
ДИХЛОРБУТЕНОМ-2
- Борисова Ю.Г., Мавлеткулова Р.Р., Андреева М.Д.,
Раскильдина Г.З.....183**
ЦИКЛОПРОПАНИРОВАНИЕ ЦИС- 1,4-ДИХЛОРБУТЕНА-2
- Будагова Р.Н., Зейналов С.Б., Ходжаев Г.Х.....184**
КРАУН-ЭФИРЫ НА ОСНОВЕ АЛИЦИКЛИЧЕСКИХ ДИОКСИМОВ
- Вакулин И.В., Белкина Н.А., Латыпова Э.Р., Вакулина А.И.....186**
НЕОБЫЧНОЕ КОНФОРМАЦИОННОЕ СТРОЕНИЕ (R)-4-МЕНТЕНОНА
- Валеева Э.С., Вакулин И.В., Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф.....187**
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АЛКЕНОВ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ
МАННИХА
- Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Миракян С.М., Раскильдина Г.З....189**
СИНТЕЗ N-БЕНЗИЛ-1-(2,2-ДИХЛОРОЦИКЛОПРОПИЛ)-МЕТИЛАМИНА
- Валиев В.Ф., Мавлеткулова Р.Р., Мукминов Ф.Х., Раскильдина Г.З...190**
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ 1,2-
И 1,3-ДИОЛОВ КАТАЛИТИЧЕСКИМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ
ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ЭФИРОВ
- Ишмуратов Г.Ю., Вакулин И.В., Тухватшин В.С., Горских В.А.,
Исламова Г.И., Талипов Р.Ф.....192**
НЕТРИВИАЛЬНАЯ ТРАНСФОРМАЦИЯ 3-МЕНТЕНОВЫХ СУЛЬФИДОВ
В МЕНТАНОВЫЕ СУЛЬФОНЫ
- Клецкова Д.И., Борисов И.М., Файзрвхманов И.С., Газизова З.Ш.....193**
ВОДОРОДА КАТАЛИЗИРУЕМОЕ ОКСИДОМ МОЛИБДЕНА
- Колпакова Е.В.....195**
КВАНТОВОХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ТРАНС-ВЛИЯНИЯ ХАЛКОНА,
ТИОХАЛКОНА И α -ЕНИМИНА В КАРБОНИЛТРИАЗИНАНОВЫХ
КОМПЛЕКСАХ МОЛИБДЕНА(0)
- Кравченко А.А., Выдрин В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю.....196**

ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ВОССТАНОВЛЕНИЯ
ИЗОМЕНТОЛАКТОНА ДИИЗОБУТИЛАЛЮМИНИЙГИДРИДОМ В
 CH_2Cl_2

Люткин А.С., Волков Е.М., Орлов В.Ю.198
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ГЕМАТИТА
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ФЕНОЛОВ
С КАРБОНАТОМ КАЛИЯ

Носов Р.В., Стойков И.И.199
СИНТЕЗ АМИНОПРОИЗВОДНЫХ П-ТРЕТ-
БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, В КАЧЕСТВЕ ПРЕКУРСОРОВ
МУЛЬТИМАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Нуриахметова З.Ф., Биглова Р.З.200
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФУЛЛЕРЕНА C_{60} С ЛЕВОМИЦЕТИНОМ

Овчинников Г.А., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.201
ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА ПОР (СО)КАТАЛИЗАТОРА НА СКОРОСТЬ
ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА

Петрова П.Р., Лобов А.Н., Цыпышева И.П.202
3-ФОРМИЛ-12-*N*-МЕТИЛЦИТИЗИН: СИНТЕЗ И НЕКОТОРЫЕ
ПРЕВРАЩЕНИЯ

**Тухватшин В.С., Кириллов Д.А., Овчинников Г.А.,
Талипов Р.Ф., Ишмуратов Г.Ю.203**
ЭПОКСИДЫ (*R*)-4-МЕНТЕНОНА И (*R*)-КАРВОНА В
КАТАЛИЗИРУЕМОЙ $\text{VF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ РЕАКЦИИ РИТТЕРА

Шабалин К.В., Стойков И.И.204
ДИЗАЙН И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА БИС(1-
АМИНО)ФОСФОНАТОВ НА ОСНОВЕ ДИЭТИЛЕНТРИАМИНА

СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

**Аничкова Ю.Г., Яркаева Ю.А., Зильберг Р.А.,
Сидельников А.В., Хаблетдинова А. И.205**
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКИСЛЕНИЯ БИСОПРОЛОЛА НА
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭЛЕКТРОДАХ

- Аничкова Ю.Г., Яркаева Ю.А., Хаблетдинова А. И.,
Зильберг Р.А., Сидельников А.В.....206**
МЕТОД ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ ПРИ ИДЕНТИФИКАЦИИ
АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ
- Вакулин И.В., Зильберг Р.А., Хаблетдинова А.И., Миргалеев Д.Н.....207**
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ РЯДА ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ
С ПАФК
- Нигматзянова А.И, Лутфуллина Г.У., Ширяева Р.Н.....208**
РЕГУЛИРОВАНИЕ РЕАЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОВЯЗКОЙ
НЕФТИ ПОВЕРХНОСТНО – АКТИВНЫМИ ВЕЩЕСТВАМИ
- Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Газизов Э.Р., Батыров Т.И.....209**
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ПОЛУАВТОМАТИЧЕСКОГО
ТИТРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ
- Сидельников А.В., Дубровский Д.И., Мухамедьяров Т.Н.,
Батыров Т.И.....210**
ИМПЕДАНСОМЕТРИЧЕСКИЙ СПОСОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ
НИТРОСОЕДИНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГИБРИДНОЙ
МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМЫ С PLS-DA
- Хаблетдинова А.И., Вакулин И.В., Зильберг Р.А.,
Миргалеев Д.С., Крайкин В.А.....211**
ОСОБЕННОСТИ КОНФОРМАЦИОННОГО СТРОЕНИЯ
ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДКЕТОНОВ
- Яркаева Ю.А, Аничкова Ю.Г., Хаблетдинова А.И,
Зильберг Р.А., Сидельников А.В.....212**
ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДАМИ
СТЕКЛОУГЛЕРОДНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ ДЛЯ
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ПРЕПАРАТОВ
- Яркаева Ю.А, Аничкова Ю.Г., Хаблетдинова А.И.,
Зильберг Р.А., Сидельников А.В.....213**
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-ИМПУЛЬСНОЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ
ОПРЕДЕЛЕНИЕ БИСОПРОЛОЛА РАЗЛИЧНЫХ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ

СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ХИМИИ»

- Тухватшин В.С., Талипова Г.Р., Талипов Р.Ф.....214**
ПРЕПОДАВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»
СТУДЕНТАМ НАПРАВЛЕНИЯ ПОДГОТОВКИ «ЭКОЛОГИЯ И
ПРИРОДОПОЛЬЗОВАНИЕ» БАШКИРСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА
- Абдуллина А.Р., Ильясова Р.Р.....215**
ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ДЛЯ КОНТРОЛЯ РЕЗУЛЬТАТОВ
ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ В ВЫСШЕМ УЧЕБНОМ ЗАВЕДЕНИИ
- Биглова Р.З.....216**
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ В КУРСЕ
МЕДИЦИНСКОЙ ХИМИИ НА ХИМИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ
- Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.....217**
АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ ЕДИНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ЭКЗАМЕНА
ПО ХИМИИ В РБ ЗА 2015 ГОД
- Салахутдинов Р.Р., Саяхов Р.Р., Искакова М.М., Талипова Г.Р.....219**
ИЗУЧЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА CHEM CALCULATOR
- Тухватуллин Р.Ф.....220**
МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ РЕОЛОГИЧЕСКОГО
МЕТОДА В ИССЛЕДОВАНИЯХ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА И ОЦЕНКИ
СВОЙСТВ ПОЛИМЕРОВ

МАТЕМАТИКА

СЕКЦИЯ «КОМПЛЕКСНЫЙ АНАЛИЗ И ТЕОРИЯ ФУНКЦИЙ»

- Бадахов М.Ш.....221**
ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С
ДЕЛЬТАОБРАЗНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ
- Билалов Б.Т., Садыгова С.Р.....222**
О ФРЕЙМАХ ИЗ ЧАСТЕЙ СИСТЕМЫ ЭКСПОНЕНТ С
ВЫРОЖДАЮЩИМСЯ КОЭФФИЦИЕНТОМ В КЛАССАХ ХАРДИ
- Дашкин А.Р., Баландин С.П.....223**

МАТРИЧНАЯ ЗАПИСЬ КОМПЛЕКСНЫХ ЧИСЕЛ

Кузоватов В.И......224
ОБ ОДНОМ ИНТЕГРАЛЬНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ДЗЕТА-ФУНКЦИИ
КОРНЕЙ ГОЛОМОРФНОЙ ФУНКЦИИ

Мышкина Е.К......225
НАХОЖДЕНИЕ СТЕПЕННЫХ СУММ КОРНЕЙ СИСТЕМ
НЕАЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ СПЕЦИАЛЬНОГО ТИПА

Рахимова А.И., Напалков В.В......227
ОПЕРАТОР ОБОБЩЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

Файзуллина А.М......229
ОСОБЕННОСТИ ПРОЯВЛЕНИЯ ФЛЕКСОМАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО
ЭФФЕКТА В (111)-ОРИЕНТИРОВАННЫХ ПЛЕНКАХ ФЕРРИТОВ-
ГРАНАТОВ

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ»

Васильев М.А., Вильданова В.Ф......230
ТЭКЛИНДОВСКИЙ КЛАСС ЕДИНСТВЕННОСТИ ДЛЯ
ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ЧЕРЕДОВАНИЕМ ТИПА
КРАЕВОГО УСЛОВИЯ

Гадыльшин Р.Р., Кожевников Д.В......231
ОБ АСИМПТОТИКЕ КРАТНОГО СОБСТВЕННОГО ЗНАЧЕНИЯ
ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА ПРИ ПЕРФОРАЦИИ ВДОЛЬ ГРАНИЦЫ

Ершов А.А......232
АСИМПТОТИКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА
ВНЕ МАЛОЙ ОКРЕСТНОСТИ ОТРЕЗКА

Кожевникова Л.М., Каримов Р.Х., Хаджи А.А......233
ОЦЕНКИ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ С
НЕСТЕПЕННЫМИ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ В НЕОГРАНИЧЕННЫХ
ОБЛАСТЯХ

Муллюков А.Л......237
ПОСТРОЕНИЕ АСИМПТОТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ
КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ С БЫСТРО ОСЦИЛЛИРУЮЩИМИ
КОЭФФИЦИЕНТАМИ

Фазлытдинов М.Ф......238
БИФУРКАЦИЯ СУБГАРМОНИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ СИСТЕМ
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Юрьева А.М......240
ОБ ОДНОМ КЛАССЕ ГИПЕРБОЛИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С
ИНТЕГРАЛАМИ ВТОРОГО ПОРЯДКА

СЕКЦИЯ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ГЕОМЕТРИЯ»

Шарипов Р. А......241
О КЛАССИФИКАЦИИ КУБИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ \mathbb{R}^2

СЕКЦИЯ «СПЕКТРАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ ОПЕРАТОРОВ»

Атнагулов А.И......242
О ФОРМУЛЕ СЛЕДОВ ДЛЯ ВОЗМУЩЕННОГО ОПЕРАТОРА ЛАПЛАСА-
БЕЛЬТРАМИ

Ахтямов А.М., Ахметвалиева Э.Н......243
ИДЕНТИФИКАЦИЯ ВИДА ДЕФЕКТА СТЕРЖНЯ

Akhtyamov A.M., Mamedov Kh.R., Cetinkaya A.F......244
INVERSE STURM-LIOUVILLE PROBLEM WITH SPECTRAL
POLINOMIALS IN BOUNDARY CONDITIONS

Валиуллина Л.Г......245
РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЙ СЛЕД ОПЕРАТОРА ШТУРМА – ЛИУВИЛЛЯ С
ЛОГАРИФМИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Павленко В.А......246
ФОРМУЛЫ ЛЕФШЕЦА ДЛЯ ПОТОКОВ С НЕПОДВИЖНЫМИ
ТОЧКАМИ.

Репьевский С.В., Гадыльшин Р.Р., Шишкина Е.А......247
АСИМПТОТИКА СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЛАПЛАСИАНА В КРУГЕ
С ГРАНИЧНЫМ УСЛОВИЕМ ДИРИХЛЕ НА КОНЕЧНОМ ЧИСЛЕ
МАЛЫХ УЧАСТКОВ ГРАНИЦЫ

Хуснуллин И.Х......249

О ВОЗМУЩЕНИИ ОПЕРАТОРА ХИЛЛА КОМПЛЕКСНЫМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ

СЕКЦИЯ «МЕХАНИКА»

Аитбаева А.А., Султанова А.А......250
ОБ ОДНОЗНАЧНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРЕХ ПАРАМЕТРОВ ЗАКРЕПЛЕННОСТИ И НАГРУЖЕННОСТИ ОДНОГО ИЗ КОНЦОВ БАЛКИ ЭЙЛЕРА-БЕРНУЛЛИ

Ахтямов А.М., Галеева Д.Р......251
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА УТОНЕНИЯ МАТЕРИАЛА, ПОДВЕРГШЕГОСЯ КОРРОЗИОННОМУ ВОЗДЕЙСТВИЮ.

Гайнетдинов А.Р., Иткулова Ю.А......252
ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОДИНОЧНОГО ПУЗЫРЬКА С ТВЁРДОЙ ЧАСТИЦЕЙ

Кунсбаева Г. А., Чиглинцева А.С......253
ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА В ГАЗОВОЙ СРЕДЕ ПРИ ИНЖЕКЦИИ КАПЕЛЬ ВОДЫ

Масалимов Р.Б., Зарипов Р.М......254
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ПРЯМОЛИНЕЙНЫХ И КРИВОЛИНЕЙНЫХ УЧАСТКОВ НЕФТЕПРОВОДА, ДЕФОРМИРУЮЩЕГОСЯ СОВМЕСТНО С ГРУНТОМ

Масалимов Р.Б., Зарипов Р.М......255
НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ КРИВОЛИНЕЙНОГО УЧАСТКА НЕФТЕПРОВОДА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОМПЕНСИРУЮЩИХ УСТРОЙСТВ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА»

Егоров А.А......256
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ НА НИЗКОТЕМПЕРАТУРНУЮ ПЛАЗМУ

Коробейников А.С......257

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ МОДЫ НЕЛОКАЛЬНОГО ДИСКРЕТНОГО НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С НАСЫЩЕНИЕМ

Лебедев М. Е......258
СТАЦИОНАРНЫЕ МОДЫ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ПРИСУТСТВИИ ЛИНЕЙНОГО И НЕЛИНЕЙНОГО ПОТЕНЦИАЛОВ

СЕКЦИЯ «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Арисова О.Г......259
ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОДУ

Kizin P. P......261
CODING AND COMPUTATION FOR LOCALIZED NONLINEAR STATES OF NLS WITH ADDITIONAL PERIODIC POTENTIAL

Хайбуллина Г.Б......262
РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА МЕТОДА ВАРИАЦИЙ В ПРОСТРАНСТВЕ УПРАВЛЕНИЙ

Яковлева Е.П., Михайлова Т.А......264
ПОИСК НЕИЗВЕСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ РИЧАРДСОНА

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И СТАТИСТИКА»

Арсланова Р.Р......265
РАСЧЕТ СТРАХОВЫХ ТАРИФОВ В МЕДИЦИНСКОМ СТРАХОВАНИИ

Билалов Б.Т. Забидов З.Д......267
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕЙВЛЕТ АППАРАТА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ В ГОРОДСКОЙ АТМОСФЕРЕ

Булатов И.М., Абзалилова Л.Р., Мустафина С.А......268
РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ СОСТАВОВ РЕАГИРУЮЩИХ ВЕЩЕСТВ СИНТЕЗА БЕНЗИЛИДЕНБЕНЗИЛАМИНА РЕАКЦИЕЙ БЕНЗИЛАМИНА С ЧЕТЫРЕХХЛОРИСТЫМ УГЛЕРОДОМ ПОД ДЕЙСТВИЕМ $FeCl_3 \cdot 6H_2O$

Зайнулова А.Р......272

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ГАЗАХ И СМЕСЯХ.

Корчагин С.А......273

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ЗАРЯДА В КОМПОЗИТНОЙ СРЕДЕ, ИМЕЮЩЕЙ ВИД ДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ С НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

Мицуков Д.С......274

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РАСПОЗНАВАНИЯ В ОРНИТОЛОГИИ

Шаймухаметова Д.В......275

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ДЕГИДРИРОВАНИЯ МЕТИЛБУТЕНОВ В ИЗОПРЕН С УЧЕТОМ ИЗМЕНЕНИЯ АКТИВНОСТИ КАТАЛИЗАТОРА

СЕКЦИЯ «ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ»

Букушева А.В......276

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В МАХИМА

Максимова С.В......277

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ГИС-ПРОГРАММ ПРИ ДЕШИФРИРОВАНИИ

Нафикова А.Р......278

РАЗРАБОТКА ПРИЛОЖЕНИЙ БАЗ ДАННЫХ СРЕДСТВАМИ MICROSOFT SQL SERVER И DELPHI

Хисаметдинов Ф.З......279

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ КАТОДНОЙ ЗАЩИТЫ ТРУБОПРОВОДА

Якимов М.С......280

НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ СОЗДАНИЯ КАРТ ПРИРОДЫ В ГИС-ПРОГРАММАХ

СЕКЦИЯ «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ЭКОНОМИКЕ»

Каширина Е.С......281

ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ЛОТКИ-ВОЛЬТЕРРА К МОДЕЛИРОВАНИЮ ЭНЕРГОСИСТЕМЫ РЕГИОНА

Перемолотова Н.В......282

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ
ПОРТФЕЛЯ ПРОЕКТОВ

**СЕКЦИЯ «МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ МАТЕМАТИКИ И
ИНФОРМАТИКИ»**

Павленко В.А., Атнагулов А.И.....283
ЗАМЕЩЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ФУНКЦИЙ ПРЕПОДАВАТЕЛЯ
ТЕХНОЛОГИЯМИ В СИСТЕМЕ СОВРЕМЕННОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Зиангирова Л.Ф.....284
МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ ТЕМЫ «ПРОЕКТИРОВАНИЕ
КОМПЬЮТЕРНЫХ СЕТЕЙ»

Канафина Г.В.....285
ФОРМИРОВАНИЕ НАУЧНОЙ КАРТИНЫ МИРА НА ПРИМЕРЕ
ЛИТЕРАТУРНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЙ

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ В ЕСТЕСТВОЗНАНИИ**

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

**27 сентября - 1 октября 2015 г.
г. Уфа**

*Редактор Е.В. Полякова
Корректор А.И. Николаева*

*Лицензия на издательскую деятельность
ЛР № 021319 от 05.01.99 г.*

Подписано в печать 25.09.2015 г. Формат 60x84/16.
Усл. печ. л. 17,48. Уч.-изд. л. 19,79.
Тираж 100 экз. Изд. № 215. Заказ 421.

*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.*

