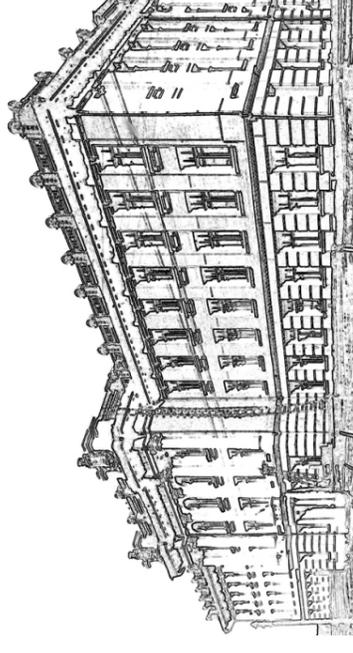
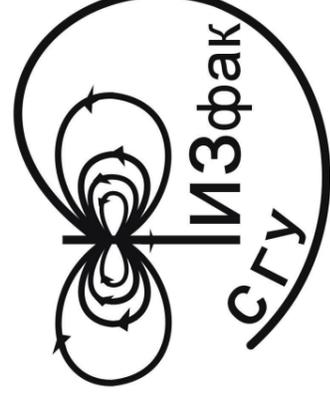


ISSN 0868-6238

ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ



ИЗДАТЕЛЬСТВО
САРАТОВСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА



Выпуск 18

2011

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ МИКРОКЛИМАТА В ПОДВИЖНЫХ СРЕДСТВАХ ГОРОДСКОГО ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТА

Постоянное повышение требований к обеспечению комфортного проезда пассажиров городского электро-транспорта, в частности, к микроклимату в салонах вагонов трамваев и троллейбусов, а также к условиям работы водителей вынуждают постоянно совершенствовать обеспечивающее эти требования климатическое оборудование.

Одновременно постоянно возрастают и требования к экономичному использованию электроэнергии. Зачастую это входит в противоречие с упомянутыми выше требованиями по повышению комфортности проезда пассажиров и работы водителей трамваев и троллейбусов.

В представленном цикле статей предлагается ряд компромиссных решений, позволяющих одновременно обеспечить выполнение этих взаимно противоречивых требований, создав максимально комфортные климатические условия для водителя и пассажиров при минимальных затратах электроэнергии.

На основе проведенных теоретических и экспериментальных исследований в представленных вниманию читателей работах разработаны как научно – технические подходы к решению этих задач (базовые подходы к организации систем климат-контроля городского электротранспорта), а также приведено описание конкретного оборудования (разработанного и проверенного в условиях эксплуатации) для реализации предложенных подходов.

УДК 62-69

КЛИМАТ – КОНТРОЛЬ, КАК НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЮ НА ГОРОДСКОМ ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТЕ

ЧАСТЬ 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ

А.В.Мирошник, В.Я. Явчуновский

Мирошник Александр Владимирович, президент международной ассоциации предприятий городского электрического транспорта (МАП ГЭТ),

председатель совета общероссийского отраслевого объединения работодателей (ОООР) ГЭТ

Явчуновский Виктор Яковлевич, д.ф.-м.н., директор ООО НПФ «Этна»

Проведен анализ энергопотребления на обогрев пассажирских салонов и кабин водителя троллейбуса в системах с автоматическим регулированием температуры. Показано, что принципиальное значение в плане энергосбережения имеет инерционность используемых в этих системах обогревательных устройств. Теоретически и экспериментально доказано значительное преимущество систем с безынерционными нагревательными элементами, как в части экономии энергии на обогрев, так и в части обеспечения наиболее комфортных условий для водителя и пассажиров.

1. Введение. Постановка задачи энергосбережения.

Проблема энергосбережения уже многие годы активно обсуждается во всем мире [1,2]. Но при этом, как известно, наиболее активно ставящийся вопрос за последнее время – это внедрение энергосберегающего освещения. Данная тема, безусловно, является актуальной. Однако для городского электротранспорта (ГЭТ) проблема эффективного использования энергии не менее актуальна.

Приближенные оценки показывают, что в целом по РФ расход электроэнергии на освещение составляет ~200 млн. кВт*ч/день. Из них с использованием энергосберегающих осветительных приборов можно экономить порядка 50%, т.е. около 100 млн. кВт*ч/день.

Сравним это с энергозатратами и возможной их экономией на горэлектротранспорте. На находящиеся в эксплуатации в РФ примерно 60 тысяч трамваев и около 12 тысяч троллейбусов, потребляющих в зимнее время на отопление до 500 кВт*ч/сутки затраты энергии на отопление в зимнее время составляют в целом ~ 35 млн. кВт*ч/день. Это меньше уже много лет обсуждаемой «общенациональной проблемы» всего в 6 раз. Отсюда следует, что проблема энергосбережения на горэ-

лектротранспорте достаточно актуальна и имеет огромное практическое значение.

По данным, предоставленным ведущим в РФ производителем троллейбусов – ЗАО «Тролза», на отопление салона и кабины водителя, обогрев стекол в кабине и т. п. уходит в зимнее время примерно половина электроэнергии (рис.1). Приведенные в настоящей работе расчеты и экспериментальные данные убедительно показывают, что при правильном построении систем нагрева воздуха и соответствующей организации климат-контроля можно ежегодно экономить до 50% энергии, затрачиваемой на отопление, и, соответственно до 25% от общей потребляемой электрическим транспортным средством энергии. Это и определяет актуальность и практическую значимость поставленной задачи.

Следует отметить, что для электротранспорта решение проблемы энергосбережения является существенно более простым по сравнению с решением проблемы снижения затрат на освещение бытовых помещений, в рамках которой нужно создавать новые заводы по производству энергосберегающего осветительного оборудования, решать очень непростые проблемы его утилизации. Для этого, конечно же, требуются огромные ин-

вестиции, которые по некоторым оценкам [3] окупятся примерно за 10÷15 лет.

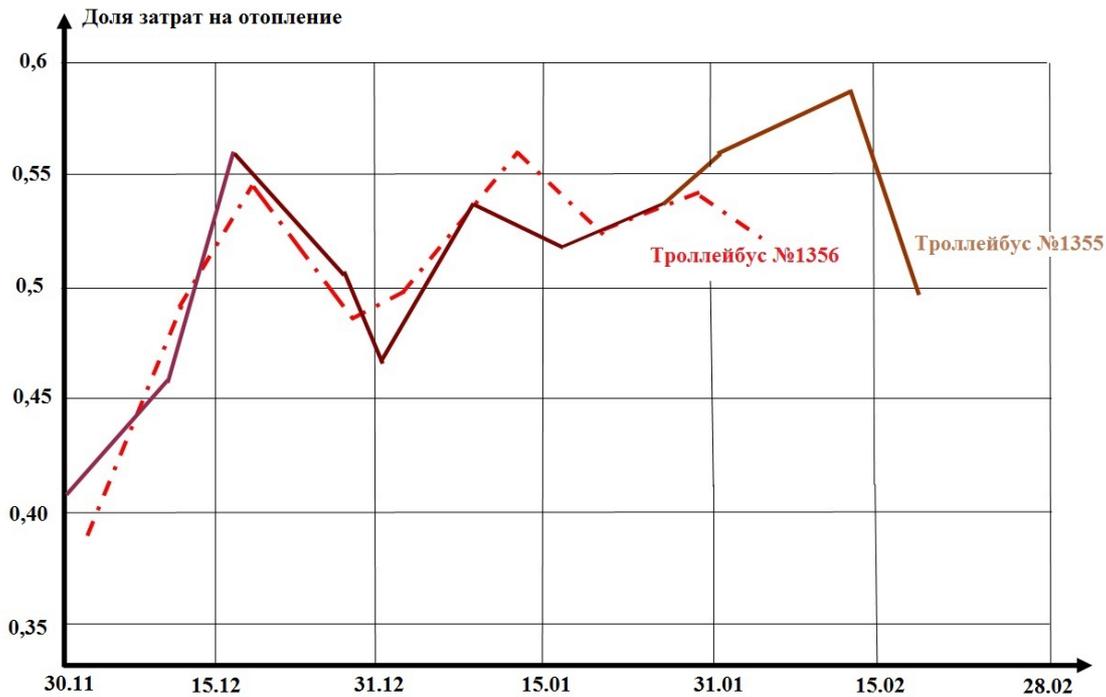


Рис.1 Доля от общего энергопотребления троллейбуса, приходящаяся на отопление (по экспериментальным данным ЗАО «ТРОЛЗА», полученным в зимнем сезоне 2009 ÷ 2010 г.г.) на двух экземплярах троллейбусов марки «Оптим». По оси абсцисс отложены даты проведения замеров энергопотребления на отопление в процессе эксплуатации троллейбусов.

Зимой в троллейбусах и трамваях, не оборудованных системами климата – контроля (а таких в настоящее время абсолютное большинство) существует две реальных проблемы, связанные с обеспечением климата: температура в салоне или слишком мала, или наоборот, слишком велика. Это связано с тем, что для обеспечения требуемого уровня температур в кабине и в пассажирском салоне в самое холодное зимнее время требуется заложить достаточно большой суммарный уровень мощности обогревательных устройств. Это не всегда удается и по техническим и по финансовым причинам. И тогда температура в салоне и кабине в этот период времени ниже установленной нормы. Зачастую в трамваях и троллейбусах в дальних северных городах суммарной установленной мощности обогревательных устройств едва хватает, чтобы согреть салон хотя бы до плюсовой температуры.

А при более высоких температурах при использовании этого же оборудования имеет место значительный перегрев и салона, и кабины, поскольку при отсутствии систем климатконтроля, мощность нагрева, рассчитанная на отопление в самую холодную погоду, используется при существенно более высоких температурах окружающей среды. При этом большое количество электроэнергии тратится на то, чтобы создать некомфортные условия для пассажиров.

Выход из этой ситуации достаточно очевиден. С учетом конкретного для каждого климатического пояса диапазона зимних температур необходимо набирать комплект обогревательного оборудования на полную мощность, необходимую для обогрева подвижного средства ГЭТ в самую холодную погоду. А при более высоких температурах обеспечивать меньшее потреб-

ление энергии, ориентируясь на фактические температуры в салоне и в кабине водителя.

Отсюда основное направление развития систем обогрева и вентиляции для подвижных средств ГЭТ можно, очевидно, сформулировать в виде компромиссной задачи: *«Создание систем климат-контроля, обеспечивающих максимально комфортные климатические условия для водителя и пассажиров при минимальных затратах электроэнергии»*. К сожалению, следует подчеркнуть, что выпускаемые в настоящее время подвижные средства ГЭТ по уровню обеспечения климатических условий проезда пассажиров значительно отстают как от своих зарубежных аналогов (по ГЭТ), так и от нашего российского железнодорожного электротранспорта.

Построению энергосберегающих систем климат-контроля, определению правил их построения и обеспечения наиболее эффективных режимов функционирования и посвящена настоящая работа. В ней последовательно рассматриваются три тесно связанные между собой задачи:

- выбор наиболее подходящего для построения систем климат – контроля электронагревательного оборудования, сравнительный анализ различных его типов;
- определение наиболее эффективных подходов к построению систем климат –контроля, разработка алгоритма поддержания климата и его реализация при разработке системы управления и пульта управления системой;
- сравнительный анализ характеристик систем климат – контроля, построенных на инерционном и безынерционном электронагревательном оборудовании.

2. Сравнительный анализ различных типов электронагревательного оборудования.

Как будет видно из дальнейшего изложения, основным параметром, определяющим пригодность различных типов электронагревательного оборудования для построения на их основе эффективных энергосберегающих систем климат – контроля, является уровень тепловой инерционности их нагревательных элементов. В этой связи представлялось необходимым, прежде всего, сравнить между собой основные комплексы характеристик отопителей с безынерционными в тепловом отношении блоками нагрева на открытых спиралях и отопителей с инерционными нагревательными блоками на основе ТЭНов. При этом представляло интерес определение и сравнительный анализ не только тех характеристик отопителей, которые влияют на эффективность реализуемых на их основе систем климат – контроля, но и прочих их электрических и эксплуатационных характеристик.

Сравнительный теоретический анализ и предварительное экспериментальное исследование специфики безынерционных в тепловом отношении систем нагрева на открытых спиралях и инерционных нагревательных систем на основе ТЭНов уже проводился ранее [4-6]. Ниже приводятся результаты экспериментального исследования 3-х типов отопителей салона:

- отопителей производства НПФ «Этна» (РФ) с безынерционными нагревательными блоками на открытых спиралях с коллекторным двигателем постоянного тока – ТРО-3500/5,0 ММД (внешний вид представлен на рис. 2);

- отопителей производства НПФ «Этна» с безынерционными спиральными нагревательными блоками и с бесколлекторным двигателем – ТРО-3500/5,0 БКД (выполненных в тех же корпусах, представленных на рис. 2);

- отопителей выпускаемых ранее (до конца 2009 г.) ЗАО «Тролза» с нагревательными блоками на основе ТЭНов (внешний вид представлен на рис. 3).

Сравнение параметров этих изделий проводилось в трех различных режимах - при типовых номинальном (табл.1), минимальном (табл.2) и максимальном (табл.3) напряжениях контактной сети горэлектротранспорта, соответственно, 550, 400 и 720В. При этом сравнивались следующие характеристики рассматриваемых устройств:



Рис. 2. Внешний вид отопителей ТРО-3500/5,0 ММД и ТРО-3500/5,0 БКД производства НПФ «Этна» с безынерционными спиральными нагревательными блоками

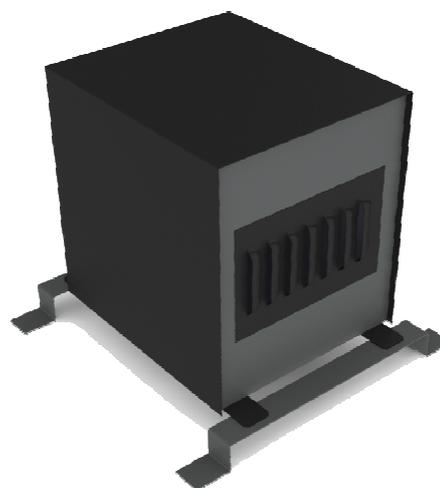


Рис. 3. Внешний вид отопителей производства ЗАО «Тролза» и инерционными в тепловом отношении нагревательными блоками на ТЭНах

- температура воздуха на выходе в установившемся температурном режиме при температуре окружающей среды (воздуха на входе) 20°C;

- время выхода в стационарный температурный режим - достижение температуры установившегося температурного режима;

- время остывания после выключения всех питающих напряжений – достижение температуры окружающей среды из разогретого состояния;

- температура корпуса;

- уровень акустического давления;

- расход воздуха через отопитель.

Таблица 1. Параметры исследуемых систем нагрева при номинальном напряжении питания (550 В)

Параметр	Тип изделия		Инерционные системы нагрева на ТЭНах
	Безынерционные системы нагрева		
	С коллекторным двигателем	С бесколлекторным двигателем	
Температура воздуха на выходе в установившемся температурном режиме, °С	77,0	70,0	89,0
Время выхода в стационарный температурный режим*, с	15	20	220

Время остывания воздуха на выходе отопителя после выключения питающего напряжения нагревательного блока, с	2	2	435
Температура корпуса в рабочем режиме, °С	34	32	42
Уровень создаваемого в рабочем режиме акустического давления, дБА	50	45	67
Расход воздуха через отопитель, м ³ /ч	539	660	463

Таблица 2. Параметры исследуемых систем нагрева при пониженном напряжении питания (400 В)

Тип изделия Параметр	Безынерционные системы нагрева		Инерционные системы нагрева на ТЭНах
	С коллекторным двигателем	С бесколлекторным двигателем	
Температура воздуха на выходе в установившемся температурном режиме, °С	52,0	45,0	64,0
Время выхода в стационарный температурный режим*, с	14	18	180
Время остывания воздуха на выходе отопителя после выключения питающего напряжения нагревательного блока, с	2	2	315
Температура корпуса в рабочем режиме, °С	31	29	61
Уровень создаваемого в рабочем режиме акустического давления, дБА	48	42	65
Расход воздуха через отопитель, м ³ /ч	368	508	463

Таблица 3. Параметры исследуемых систем нагрева при повышенном напряжении питания (720 В)

Тип изделия Параметр	Безынерционные системы нагрева		Инерционные системы нагрева на ТЭНах
	С коллекторным двигателем	С бесколлекторным двигателем	
Температура воздуха на выходе в установившемся температурном режиме, °С	89,0	82,0	116
Время выхода в стационарный температурный режим*, с	29	25	270
Время остывания воздуха на выходе отопителя после выключения питающего напряжения нагревательного блока, с	2	2	530
Температура корпуса в рабочем режиме, °С	47	42	70
Уровень создаваемого в рабочем режиме акустического давления, дБА	53	48	65
Расход воздуха через отопитель, м ³ /ч	746	934	463

Примечания.

1. Параметры табл.1÷3 приведены при температуре окружающей среды (воздуха на входе), равной 20°С.
2. *Время достижения перепада температур на входе – выходе, равном 95% от стационарного значения этой величины.

Для обсуждаемой проблемы оптимальной организации энергосберегающих систем климат - контроля наиболее принципиальным различием между безынерционными в тепловом отношении системами нагрева на открытых спиралях и инерционными нагревательными системами на основе ТЭНов представляются соотношение времен выхода в стационарный тепловой режим при включении напряжения нагрева и остывания при его выключении.

Физические причины того, что время выхода в стационарный тепловой режим для безынерционных систем нагрева на порядок меньше, чем для инерционных систем, подробно изложены в работах [4-6]. Основной из них является различие (для открытых спиралей и ТЭНов) тепловых сопротивлений на пути потока тепла от нагревательного элемента до потока теплоносителя (воздуха). Это в свою очередь обусловлено тем, что открытая спираль имеет прямой контакт с воздушным потоком Q (рис. 4), а нагревательная спираль внутри ТЭНа – через длинную цепочку промежуточных тепловых сопротивлений R_{T1}, \dots, R_{T5} (рис. 5).

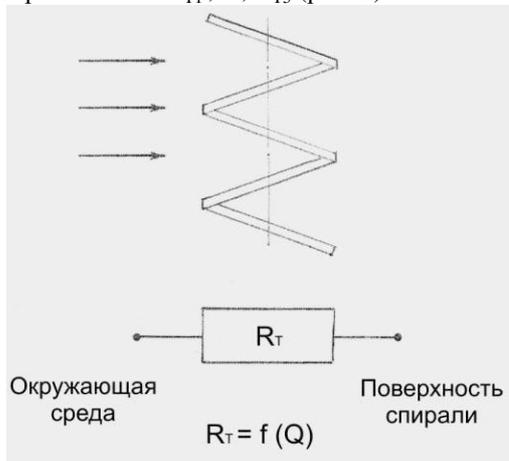


Рис.4. Эквивалентная тепловая схема открытой спирали

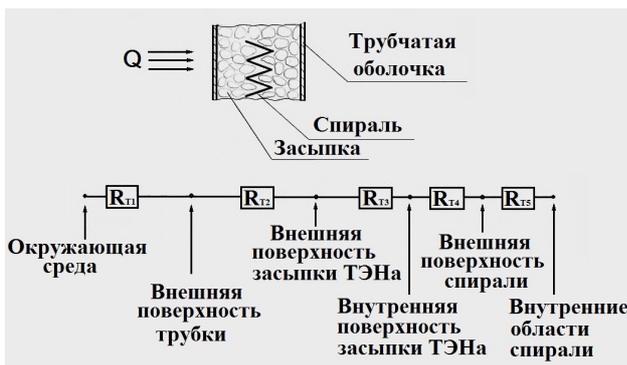
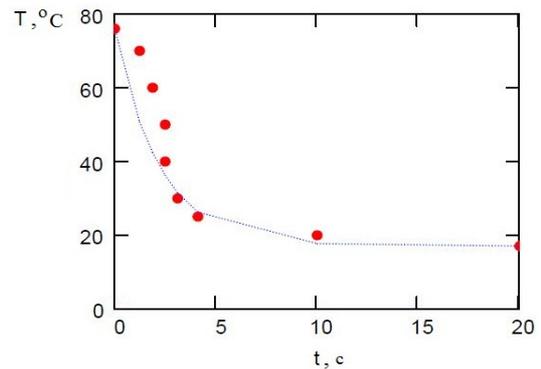


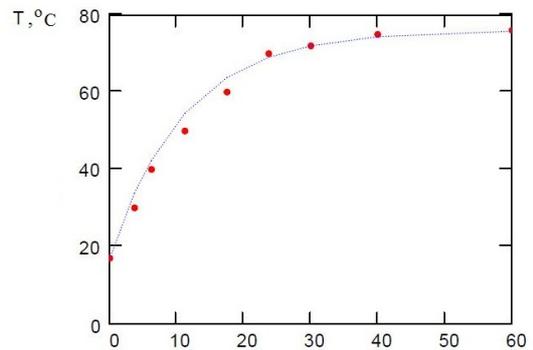
Рис. 5. Эквивалентная схема ТЭНа

В настоящей же работе приводятся более подробные экспериментальные данные, касающиеся непосредственно выхода в рабочий режим и остывания нагреваемого воздуха, необходимые для расчета энергетических характеристик электронагревательных устройств с безынерционными спиральными нагревательными элементами и устройств с инерционными нагревательными элементами на ТЭНах, а также создаваемых ими в салоне троллейбуса температурных режимов.

Фактически это кривые нарастания (рис.6) и спада (рис. 7) температуры выходящего из отопителей воздуха, получаемые при включении и выключении напряжения их нагрева.



а)



б)

Рис. 6. Временные зависимости температуры воздуха на выходе из отопителей со спиральными нагревательными элементами (а – выход в рабочий режим, б – остывание)

Для обоих типов отопителей с безынерционными спиральными нагревательными элементами (и с коллекторными двигателями постоянного тока, и с бесколлекторными двигателями) получены практически идентичные результаты по временным зависимостям нарастания и спада температуры. Поэтому на рис.6 а, б для этого типа отопителей приводится всего по одной кривой (и нарастания, и спада температуры).

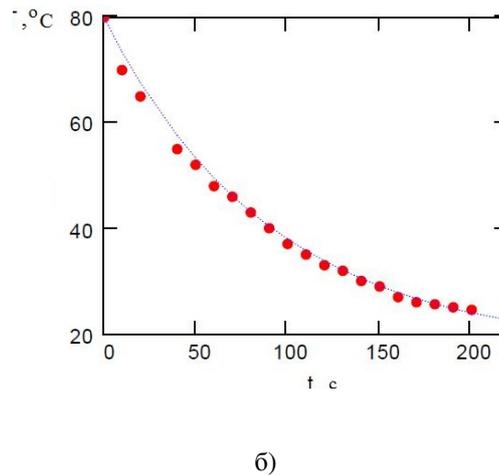
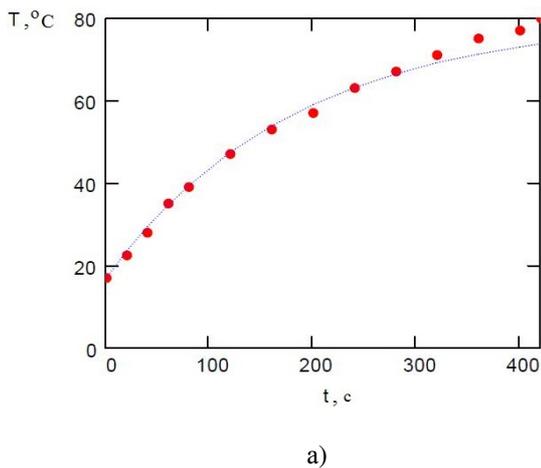


Рис.7. Временные зависимости температуры воздуха на выходе из отопителей с нагревательными элементами на ТЭНах (а – выход в рабочий режим, б – остывание)

Фактически полученные результаты сравнительных испытаний отопителей – это интегральные характеристики необходимые для расчетов энергетических и температурных режимов систем климат - контроля, осуществляющих автоматическое регулирование климата в салоне (а также в кабине водителя) троллейбуса или трамвая.

Следует еще раз отметить, что быстроедействие при включении и отключении нагрева является одним из важнейших параметров таких систем, причем само быстроедействие определяется, как видно из приведенных выше результатов, именно типом используемых нагревательных элементов. За счет этой характеристики обеспечивается оперативное переключение режимов обогрева воздуха, включение и выключение отопления на границах заданного температурного диапазона.

При использовании же инерционных нагревательных элементов в таких, по замыслу достаточно быстроедействующих системах, имеет место очень малая оперативность работы автоматики из-за медленной реакции нагревательных устройств на ее команды. Именно из-за этого при использовании систем на ТЭНах не удастся своевременно отрабатывать изменение режимов отопления на граничных температурах, что приводит и к дополнительным энергозатратам, и к снижению комфортности для пассажиров.

Имеется у них и еще один недостаток, приводящий к необходимости существенного усложнения систем управления обогревом салона и кабины. Известно, что при выключении напряжения на ТЭНах нужно в течение нескольких минут поддерживать работу вентиляторов, снимающих с ТЭНов остаточное тепло [6], что и приходится задавать в алгоритме управления этими системами, усложняя при этом и программную и аппаратную часть системы. А, кроме того, при выключении нагрева и работающем вентиляторе в салон и кабину поступает не нагретый заборный воздух, что создает максимально некомфортные условия для водителя и пассажиров.

3. Предлагаемое построение систем климат – контроля

Практически все современные системы климат - контроля строятся на включении – выключении отопителей. Это делается либо с использованием входящих в систему отопления механических контакторов, либо путем модуляции высокого напряжения, например, ШИМ – модуляции.

Самую простую и дешевую систему климат - контроля можно построить именно с использованием входящих в систему механических контакторов, ориентируясь при этом на безынерционные в тепловом отношении отопители салона и кабины. Именно на таких отопителях на открытых спиралях, со временем нагрева и остывания порядка нескольких секунд, практически мгновенно «реагирующих» на команды блока управления, такая система будет работать наиболее эффективно. На отопителях, использующих инерционные в тепловом отношении ТЭНы, такие системы либо вообще не реализуемы, либо крайне низко эффективны.

Несколько повысить эффективность систем климат – контроля, использующих отопители на ТЭНах можно при реализации схем климат – контроля, использующих ШИМ-модуляцию.

Однако, во-первых, такие системы намного дороже в силу необходимости использования в их составе электронных коммутаторов, а во-вторых, создают весьма значительные проблемы в части электромагнитной совместимости, достижение соответствия установленным нормам по которой [7] является, как правило, и без того достаточно сложной задачей при разработке новых типов трамваев и троллейбусов.

Поэтому описываемая ниже система строилась на основе механического включения – выключения отопителей кабины и салона с безынерционными нагревательными блоками.

Эта система была уже фактически реализована и прошла испытания в течение 2 зимних сезонов в троллейбусе, эксплуатируемом на одном из троллейбусных маршрутов г. Саратова. В рамках нее все элементы системы отопления и вентиляции троллейбуса были фактически объединены в единую

систему климат – контроля (см. рис. 8). В испытываемой машине в состав этой системы входили 4 отопителя салона с безынерционной нагревательной системой на открытых спиралях и отопитель кабины водителя с аналогичным блоком нагрева. Кроме того, туда входили 2 датчика температуры, расположенные, соответственно, в салоне и в кабине, и блок управления и индикации БУИ-1 (рис. 9). Задание температур воздуха в салоне и кабине осуществлялось непосредственно водителем с расположенного в кабине троллейбуса блока БУИ-1, работающего по показаниям датчиков температуры. При этом на пульте (блоке управления и индикации) отдельно задается требуемая температура воздуха в салоне и отдельно комфортная для водителя температура воздуха в кабине. При опускании любой из заданных температур на 1°C ниже установленного водителем значения пульт выдает команду на включение соответствующей группы отопителей, при подъеме ее на 1°C выше заданной – команду на ее выключение.

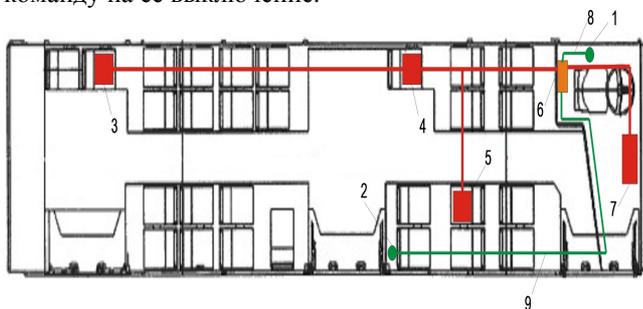


Рис. 8. Схематическое изображение разработанной системы климат - контроля для выпускаемого ЗАО «Тролза» троллейбуса « Оптима »: 1 – датчик температуры воздуха в кабине водителя, 2 – датчик температуры воздуха в салоне, 3–5 – отопители салона, 6 – блок индикации и управления БУИ-1, 7 – отопитель кабины водителя, 8,9– экранированные провода датчиков температуры



Рис. 9. Внешний вид блока управления и индикации БУИ-1 системы климат-контроля троллейбуса

Благодаря тепловой безынерционности отопителей салона и кабины водителя (время полного нагрева и полного остывания $\sim 10\div 20$ секунд – см. рис. 6), системой обеспечивалось поддержание температур воздуха в салоне и кабине водителя с точностью $\pm 1^{\circ}\text{C}$. По итогам эксплуатации этой системы (рис. 10) можно уверенно гарантировать снижение энергопотребления на отопление до $\sim 45\div 55\%$ при одновременном создании максимально комфортных климатических условий для водителя и пассажиров. Это реализуется за счет того, что система работает при полной мощности отопления лишь в самые сильные морозы (порядка $30\div 35^{\circ}\text{C}$). При более же высоких температурах окружающей среды система обеспечивает устранение перегрева воздуха в салоне и кабине (поддержание установленных водителем наиболее комфортных температур) путем включения – отключения расположенного там электронагревательного оборудования.

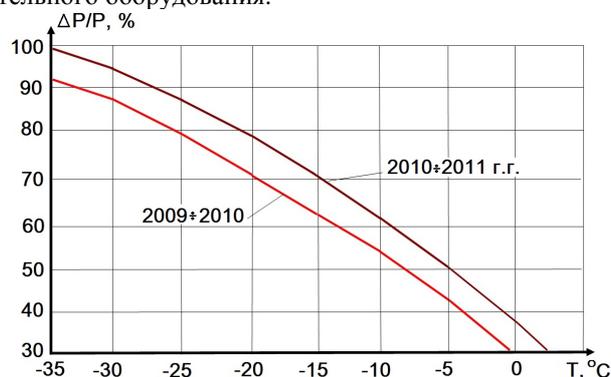


Рис.10. Зависимость доли потребляемой на отопление мощности (в процентах от суммарной установленной мощности всех отопителей) от температуры окружающей среды. На рисунке не приведена нижняя часть графика (от температуры выше 0°C до плюсовой температуры при которой производится включение отопления), поскольку эта информация не требуется для дальнейших расчетов.

Экономический эффект от внедрения такой системы можно определить, исходя из следующих данных. Максимальная энергия, расходуемая на отопление троллейбуса (салон, место кондуктора, кабина водителя) - порядка 19 кВт. Средняя экономия на уровне $9\div 10$ кВт обеспечивает при ежедневной работе в течение $16\div 18$ часов и с учетом длительности отопительного сезона около 180 дней на уровне 30 000 кВт \cdot ч.

Исходя из этих расчетов и с учетом реальной стоимости электроэнергии (с учетом КПД ее передачи), экономия за счет предлагаемых технических решений составит в денежном выражении за сезон на каждом троллейбусе до 120 тысяч рублей.

Для выяснения реальных причин полученного в эксплуатации столь значительного экономического эффекта, был предпринят расчет энергетических и тепловых режимов работы описанной выше системы климат - контроля, наглядно выявивший физические основы полученных на практике результатов по энергосбережению. Для сравнения параллельно проводился расчет для аналогичной системы, построенной на инерционных отопителях на ТЭНах.

При этом сравнении рассматривались оба аспекта изучаемой проблемы:

- определение реальных климатических условий для

пассажиrow (а по аналогии и для водителя) при включении в систему климат - контроля отопителей с безынерционными и с инерционными нагревательными элементами.

- сравнение энергозатрат при использовании в системе климат - контроля двух упомянутых выше типов отопителей.

4. Расчет энергетических и тепловых режимов систем климат – контроля с отопителями на ТЭНах и спиралях

В рамках приведенного ниже сравнительного расчета была принята следующая общая логика исследования (исходные положения):

1. Рассматриваются только стационарные режимы работы. Режим начального разогрева не рассматривается, поскольку он занимает всего несколько минут для спиральных отопителей и порядка 15÷20 минут для отопителей на ТЭНах, и очень мало влияет на общие затраты энергии на фоне последующих 15÷20 часов стационарной работы.

2. Расчет ведется для описанной выше системы климат - контроля, на которой задается требуемое среднее значение температуры воздуха в салоне троллейбуса 15±1°С. Соответственно, при температуре воздуха в салоне равной 14°С она включает нагреватели, при температуре воздуха равной 16°С - выключает.

3. В качестве нулевого отсчета принимается момент первого достижения системой температуры воздуха в салоне равной 16°С, когда блок БУИ-1 первый раз отключает напряжение нагрева.

4. Сравнивается работа в составе системы климат - контроля отопителей с безынерционными спиральными нагревательными элементами и отопителей с инерционными нагревательными элементами (ТЭНами), характеристики которых приведены во 2 разделе настоящей работы.

5. Для получения общей мощности нагрева (в данном расчете, выполняемом только для помещения салона троллейбуса, она выбиралась равной 10÷11 кВт):

- в случае безынерционных отопителей (ТРО-3500/5,0 ММД, мощность нагрева 3,5 кВт) их учитывали в расчете в количестве 3 изделий на салон;

- в случае инерционных отопителей (производства ЗАО «ТРОЛЗА», мощность нагрева 5,5 кВт) их брали в количестве 2 изделий на салон.

6. В расчете учитывается, что в силу конструктивных и схематических особенностей у отопителей ТРО-3500/ 5,0 ММД при отключении высокого напряжения отключается и питание двигателя вентилятора, а у отопителей производства ЗАО «ТРОЛЗА» вентилятор остается включенным и при включенном и при выключенном высоком напряжении.

7. При проведении расчетов учитывается, что тепловая энергия выносится из отопителя только потоком воздуха, поэтому применительно к отопителям ТРО-3500/5,0 ММД полагается, что при выключении высокого напряжения (а соответственно, и двигателя вентилятора) тепловая энергия из отопителя в салон троллейбуса не поступает.

4.1. Расчет для системы климат-контроля с отопителями с безынерционными спиральными нагревательными элементами при средне-зимней

температуре окружающей среды.

Изначально расчет проводится при средне-зимней температуре окружающей среды (для Саратовского и Московского регионов порядка минус 7÷5°С).

В соответствии с ходом кривой на рис. 10, при такой температуре имеет место экономия энергии (относительно установленной мощности отопления) порядка 50%.

Это фактически означает, что суммарные потери тепловой энергии салоном троллейбуса (и через теплоизоляцию стен и окон, и через открываемые двери) составляют примерно 50% получаемой им от отопителей (когда они находятся во включенном состоянии) суммарной тепловой энергии, т. е. примерно 5,25 кВт.

1) При температуре воздуха в салоне плюс 16°С все отопители одновременно отключаются системой климат – контроля и тепло в кабину перестает поступать. Отопители теперь не включатся до достижения температурой воздуха в салоне значения плюс 14°С.

2) Для оценки времени от выключения до включения отопителей сопоставим, прежде всего, изменение температуры воздуха в салоне с изменением его внутренней энергии. Объем салона $V \sim 65 \text{ м}^3$. Теплоемкость воздуха $C=10^3 \text{ Дж/кг}\cdot\text{К}$. Плотность воздуха $\rho = 1,225 \text{ кг/м}^3$. Соответственно подъем, или снижение температуры салона на $\Delta T = 1^\circ\text{C}$ соответствуют получению (отдаче) воздухом салона тепловой энергии

$$W = \rho * V * C * \Delta T = 82,5 \text{ кДж} \quad (1)$$

3) Соответственно снижению температуры на $\Delta T = 2^\circ\text{C}$ соответствует отдача воздухом салона тепловой энергии $W= 165 \text{ кДж}$. При мощности тепловых потерь равной $\Delta W=5,25 \text{ кВт}$ это произойдет, соответственно за время

$$\Delta t = W / \Delta W = 31,5 \text{ с} \quad (2)$$

4) За это время основная масса материала внутри нагревательного блока спирального безынерционного отопителя успеет остыть всего до 55°С, следовательно, нагреть его нужно будет всего на 25°С. В соответствии с кривой на рис.6 это займет примерно 3÷4 секунды и этим временем, а соответственно и требуемой для этого энергией можно пренебречь.

5) Что касается динамики изменения температуры воздуха в течение этого переходного процесса, то она за это время падать не будет ниже температуры плюс 14°С. Это понятно из следующего логического построения (см. ниже).

6) Энергия, которую несет в салон троллейбуса выходящий из отопителя воздух пропорциональна разности температур воздуха на выходе отопителя $T_{\text{раб}}$ и температуры на его входе (температуре воздуха в салоне) $T \sim 15^\circ\text{C}$. Поскольку при номинальной суммарной мощности отопителей 10,5 кВт температура воздуха на выходе отопителя $T_{\text{ном}}$ равна примерно 80°С, то при 55°С выносимая из отопителя тепловая мощность будет примерно равна

$$W_{55} = W_{\text{ном}} * (T_{\text{раб}} - 15) / (T_{\text{ном}} - 15) = 6,46 \text{ кВт}. \quad (3)$$

В связи с тем, что это больше усредненной мощности тепловых потерь, температура воздуха в салоне будет с самого момента его включения (при 14°С) по-

вышаться, а через несколько секунд и тепловая мощность, отдаваемая отопителями, достигнет номинального значения 10,5 кВт.

7) Таким образом, пренебрегая переходным периодом в несколько секунд, когда нарастание температуры воздуха в салоне будет идти чуть медленнее, чем в стационарном режиме работы отопителей, можно представить себе следующую временную зависимость изменения температуры воздуха в салоне (рис. 11).

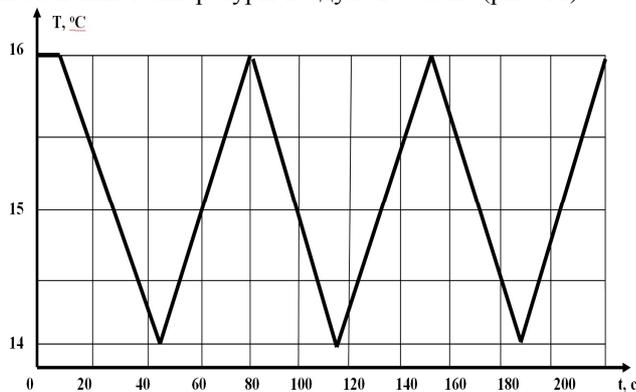


Рис. 11. Временные зависимости изменения температуры воздуха в салоне при использовании системы климат-контроля на основе отопителей с безынерционными спиральными нагревательными элементами

8) Что касается энергетической ситуации (затрат энергии на отопление), то она уже определена ранее экспериментально (см. рис. 10). Небольшие потери энергии на разогрев самого отопителя в начале цикла нагрева воздуха практически не влияют на эту картину и уже учтены в результатах, отражаемых кривой на рис. 10.

4.2. Расчет для системы климат-контроля с отопителями с инерционными нагревательными элементами (ТЭНами) при средне-зимней температуре окружающей среды.

Так же, как и в предыдущем случае, изначально расчет проводился при средне-зимней температуре окружающей среды (минус $7\pm 5^\circ\text{C}$). Это делалось для того, чтобы проводить сравнение параметров обеих систем для одного и того же троллейбуса с одинаковыми энергетическими (тепловыми) потерями через теплоизоляцию салона и открываемые двери.

Этой температуре (см. рис. 10) соответствует уровень экономии энергии порядка 50%. Исходя из условий теплового баланса, это означает, что суммарные потери тепловой энергии салоном троллейбуса составляют примерно 50% получаемой им от отопителей суммарной тепловой энергии, т. е. примерно 5,25 кВт.

1) Изначально расчет проводился в том же предположении, что начальным разогревом троллейбуса перед его выходом на линию можно пренебречь, поскольку он занимает всего 20 ± 30 минут времени по сравнению с последующими 15-20 часами непрерывной работы. Правда для спиральных отопителей начальный разогрев осуществляется существенно быстрее, примерно за 5 ± 7 минут, однако по сравнению с общим временем работы троллейбуса этим преимуществом отопителей со спиральными безынерционными нагревательными элемен-

тами при сравнительном расчете температурных и энергетических характеристик можно пренебречь.

Скорость начального разогрева троллейбуса перед его выходом на линию является самостоятельным и очень важным параметром, и тут преимущества отопителей со спиральными безынерционными нагревательными элементами неоспоримы, однако в этой задаче данное различие систем можно не учитывать.

2) Итак, при температуре воздуха в салоне плюс 16°C все отопители одновременно отключаются системой климат-контроля и тепло в кабину перестает поступать. Отопители теперь не включатся до достижения температурой воздуха в салоне значения плюс 14°C .

3) Расчет времени от выключения до включения отопителей с инерционными нагревательными блоками на ТЭНах проводился для тех же параметров теплоотдачи троллейбуса, что и в предыдущем случае, и здесь подъем, или снижение температуры салона на $\Delta T = 1^\circ\text{C}$ соответствуют получению (отдаче) воздухом салона тепловой энергии 82,5 кДж. Снижению температуры на $\Delta T = 2^\circ\text{C}$ соответствует отдача воздухом салона тепловой энергии 165 кДж. При мощности тепловых потерь равной 5,25 кВт это произойдет также за время $\Delta t = 31,5$ с.

4) Однако, в отличие от предыдущего расчета, в данном случае, после выключения напряжения нагрева, вентилятор не выключается и из отопителей будет продолжать поступать в салон тепловая энергия. Соответственно время остывания воздуха в салоне будет больше приведенного выше времени (31,5 с).

5) Опираясь на данные, представленные на рис. 7, определим, прежде всего, время, за которое перепад температуры воздуха между входом и выходом отопителя снизится вдвое (при заданных параметрах это будет соответствовать равенству отдаваемой отопителями в салон и уходящей через изоляцию троллейбуса тепловой энергии).

6) В рабочем режиме температура воздуха на выходе отопителей порядка 80°C , температура воздуха в салоне должна быть $\sim 15^\circ\text{C}$, соответственно среднее значение составляет $\sim 47,5^\circ\text{C}$. Судя по соответствующей кривой на рис. 7, этой температуры выходящий из отопителя воздух достигнет примерно за 60 секунд. Пренебрегая нелинейностью процесса в течение этого времени можно приближенно оценить среднюю мощность нагрева в течение этого периода, как 7,75 кВт, что на 2,5 кВт выше мощности тепловых потерь через изоляцию салона. Соответственно превышение энергии нагрева над энергетическими потерями через изоляцию за этот период времени составит

$$2,5 \text{ кДж/с} \cdot 60 \text{ с} = 150 \text{ кДж} \quad (4)$$

7) Это будет соответствовать дополнительному разогреву воздуха в салоне на

$$150: 82,5 = 1,8^\circ\text{C} \quad (5)$$

8) Затем температура в салоне начнет падать от величины $16 + 1,8 = 17,8^\circ\text{C}$ до температуры включения равной 14°C . Очевидно, что этот процесс будет существенно растянут во времени за счет двух факторов. Во-первых, он увеличится за счет большей начальной температуры, с которой началось ее снижение. А, во-вторых, за счет того, что после того, как поступающая в салон тепловая энергия станет равна ее потерям через изоляцию, тепло

в салон все равно будет поступать. Этот процесс будет продолжаться до тех пор, пока температура выходящего из отопителей воздуха не сравняется со средней температурой воздуха в салоне (на уровне температуры включения нагревателей – плюс 14°C).

9) В соответствие с кривой на рис. 7, это время составит примерно 350 с, однако, конечно, температура воздуха в салоне опустится до плюс 14°C гораздо раньше. Поэтому расчет нужно вести по участкам этой кривой (например, длительностью порядка 10 секунд).

10) Прежде всего, следует рассчитать, сколько энергии должен потерять воздух в салоне для снижения температуры до плюс 14°C. Это примерно

$$(17,8 - 14) \cdot 82,5 = 313,5 \text{ Дж.} \quad (6)$$

11) Из полученных результатов можно построить соответствующие временные зависимости средней температуры воздуха на выходе отопителя (рис. 12) и соответствующей ей средней мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона (рис. 13а)

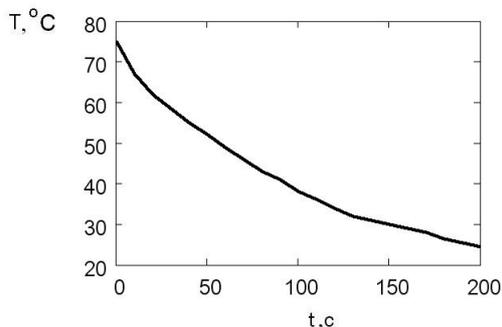


Рис. 12. Приближенный расчет временной зависимости средней температуры воздуха на выходе отопителя после отключения напряжения нагрева.

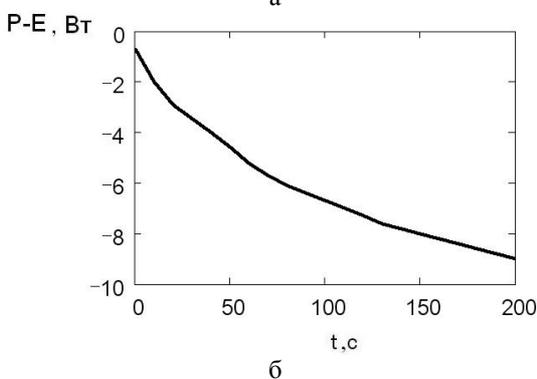
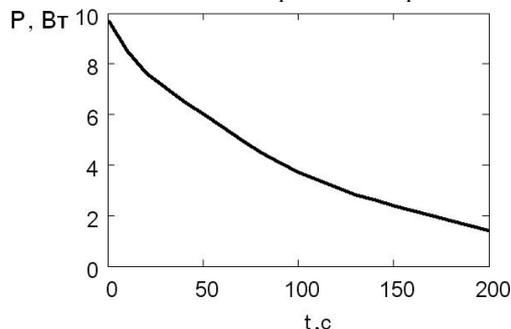


Рис. 13. Приближенный расчет временной зависимости средней мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона (а) после отключения напряжения нагрева и этой же зависимости за вычетом мощности тепловых троллейбуса (б).

12) Отсюда несложно вычислить временные зависимости разности значений мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона, и мощности тепловых потерь (рис. 13б), а затем определяемую ею зависимость от времени повышения/снижения температуры воздуха в салоне. А уже отсюда вычисляется временная зависимость собственно температуры воздуха в салоне (рис. 14). В этом и последующем расчетах фактически учитывается существенное для инерционной системы нагрева различие времен нагрева и остывания воздуха и прочие нелинейные эффекты, которыми пренебрегли в п. п. 6 и 7 данного расчета.

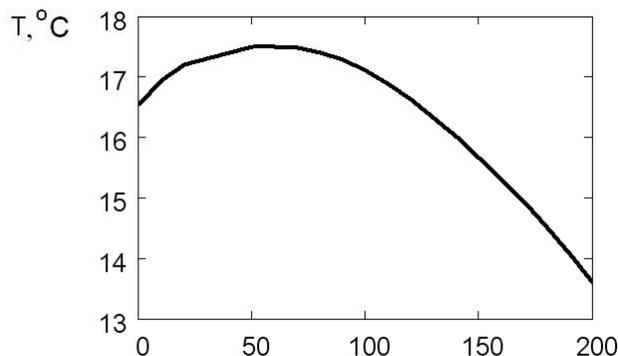


Рис. 14. Приближенный расчет динамики остывания воздуха в салоне в период между выключением и включением напряжения нагрева при реализации климата – контроля с помощью инерционных в тепловом отношении отопителей на ТЭНах.

Для лучшего понимания полученных результатов представляется необходимым дать ряд пояснений по методике расчета приведенной выше зависимости:

1. Средняя температура воздуха на выходе отопителя в процессе остывания взята из эксперимента (см. соответствующую кривую на рис. 7).
2. Расчет средней мощности нагрева в этом режиме проводился по методике п. 6.
3. Затем из полученной средней мощности нагрева вычиталась определенная выше мощность тепловых потерь. Ввиду относительного небольшого разброса температур в цикле включения выключения нагрева, эта величина полагалась постоянной.
4. Расчет прибавки температуры за выбранный временной интервал осуществлялся путем деления полученной разностной энергии (средней мощности нагрева за вычетом энергии тепловых потерь и умноженной на длительность выбранного временного интервала – 10 секунд) на энергию, требуемую для подогрева воздуха в троллейбусе на 1°C. За каждый такой интервал температура воздуха в салоне увеличивалась или уменьшалась на эту расчетную величину.

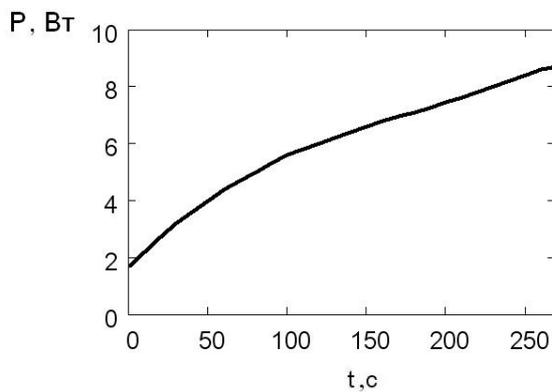
Таким образом, в соответствии с данными расчета, температура в салоне после отключения напряжения нагрева (при температуре 16°C) сначала повышалась до 17,5°C, а затем снижалась до 14,0°C в течение общего интервала времени порядка 192 с (см. рис. 14).

В этот момент система климата – контроля включает напряжение нагрева, и процесс пошел уже по иному сценарию. Рассмотрим зависимость повышения температуры воздуха на выходе отопителя с инерционной системой на ТЭНах от времени (рис. 7). Т. к. в процессе паузы при нагреве температура воздуха на выходе ото-

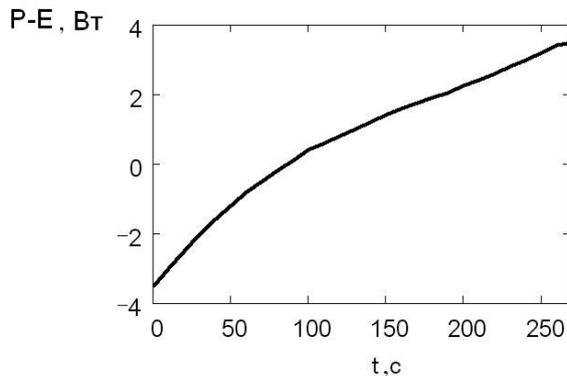
питателя снизилась не до 15°C , а до 23°C , не будем учитывать первые 20 секунд при отсчете времени нагрева (см. рис. 7).

Расчет процесса нагрева проводился по той же методике, что и в предыдущем пункте, при этом также строились временные зависимости средней температуры воздуха на выходе отопителя (рис. 15) и соответствующей ей средней мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона (рис.16а).

А далее вычислялись временные зависимости разности значений мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона, и мощности тепловых потерь (рис.16б), а затем определяемые этой зависимостью временные характеристики снижения/повышения температуры воздуха в салоне. И далее вычислялась временная зависимость собственно температуры воздуха в салоне (рис. 17).



а)



б)

Рис. 16. Приближенный расчет временной зависимости средней мощности тепловой энергии, передаваемой отопителем в помещение салона (а) после включения напряжения нагрева и этой же зависимости за вычетом мощности тепловых троллейбуса (б).

Таким образом, в соответствии с данными расчета, температура в салоне после включения напряжения нагрева (при температуре 14°C) сначала продолжала снижаться до $12,1^{\circ}\text{C}$, а затем начала повышаться и дошла до значения $16,0^{\circ}\text{C}$ в течение общего интервала времени ~ 278 с.

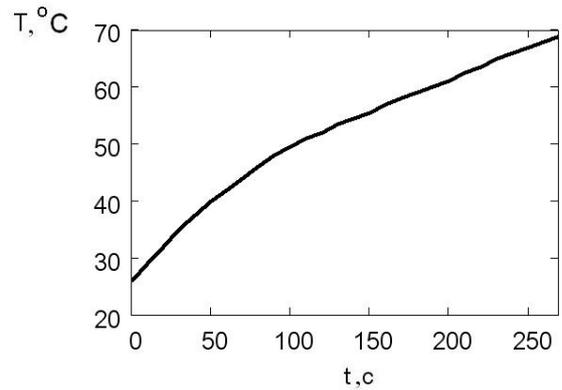


Рис. 15. Приближенный расчет временной зависимости средней температуры воздуха на выходе отопителя после включения напряжения нагрева.

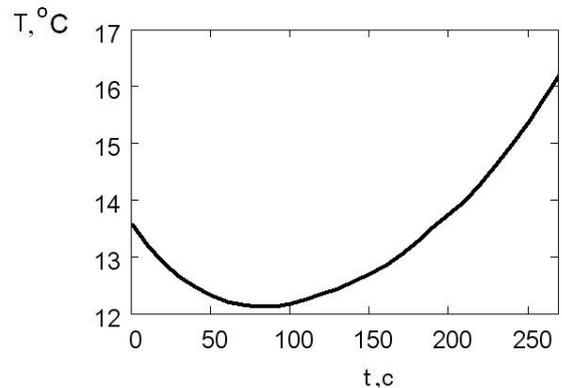


Рис. 17. Приближенный расчет динамики нагрева воздуха в салоне в период между включением и следующим выключением напряжения нагрева при реализации климат – контроля с помощью инерционных в тепловом отношении отопителей на ТЭНах.

В этот момент система климат – контроля вновь выключила напряжение нагрева, и нагрев продолжался за счет остаточного тепла.

В соответствии с изложенным выше, общий цикл нагрева – остывания будет выглядеть следующим образом:

- после выключения напряжения нагрева – сначала разогрев в течение 60 с до температуры воздуха в салоне $17,4^{\circ}\text{C}$;
- затем начинается остывание от $17,4^{\circ}\text{C}$ до 14°C (при этой температуре происходит отключение напряжения нагрева); время этого фрагмента цикла ~ 130 с;
- после включения напряжения нагрева продолжается остывание воздуха в салоне до $12,1^{\circ}\text{C}$ (в течение примерно 90 с);
- а затем вновь температура воздуха начинает повышаться и еще за 190 с доходит до 16°C , при которой опять включается напряжение нагрева.

Таким образом, общая длительность цикла нагрева – остывания составляет 470 с.

Для наглядности на графике (рис.18) представлены циклы нагрева – остывания для обеих рассматриваемых систем.

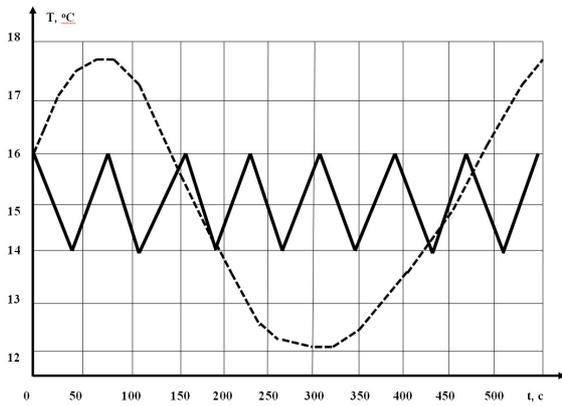


Рис. 18. Временные зависимости изменения температуры воздуха в салоне при использовании системы климат - контроля на основе отопителей с безынерционными спиральными нагревательными элементами (————) и с инерционной системой на ТЭНах (-----).

Из сравнения кривых рис.18 с очевидностью следует, что существенно более комфортные климатические условия для пассажиров (и по аналогии - для водителя троллейбуса) обеспечиваются при использовании систем климат - контроля с безынерционными спиральными отопителями. Эти системы обеспечивают поддержание температурного режима с точностью $\pm 1^\circ\text{C}$. В системах климат - контроля с инерционными отопителями на ТЭНах возможно поддержание температурного режима с изменением температуры за короткие интервалы времени не менее $\pm 3^\circ\text{C}$.

Причем, следует учитывать, что такие расчетные данные получены для температуры воздуха в месте расположения температурных датчиков – на высоте 130÷150 см от уровня пола. На уровне пола температура в паузе между циклами нагрева снижается гораздо быстрее и до существенно более низких температур, особенно при открывании дверей троллейбуса.

При этом нужно учитывать, что для отопителей со спиральными системами, у которых пауза между циклами нагрева составляет всего 30÷40 с, значительного перепада температур по высоте не успевает возникнуть. У отопителей с инерционными системами на ТЭНах эта пауза длится порядка 190 с и перепад температур по высоте, естественно существенно выше.

Несложно показать, что при такой компоновке систем климат – контроля в конце паузы между циклами нагрева, на которую придется, к тому же, как минимум, одно открывание дверей, температура у пола будет близка к 0°C даже при не очень низкой температуре окружающей среды (порядка минус $7\div 5^\circ\text{C}$, как и бра-лось в расчете).

5. Анализ энергетических затрат

Для систем климат - контроля с безынерционными спиральными отопителями в условиях проведенного расчета при температуре окружающей среды порядка минус $7\div 5^\circ\text{C}$ соотношение времен «включено – выключено» составляет 1:1. Следовательно, в таком режиме используется примерно 50% от суммарной номинальной мощности отопителей. Такие же результаты получены и экспериментальным путем (см. рис. 10).

Для систем климат – контроля с инерционными отопителями на ТЭНах приведенные выше расчеты

дают соотношение времени нагрева к паузе ~ 28:19, т.е. используется примерно 59,6% от суммарной номинальной мощности отопителей.

Это, соответственно более чем на 19% выше, чем для отопителей на спиралях.

Однако необходимо учитывать еще и тот факт, что в салоне необходимо обеспечить некую минимальную температуру, например, выбранную в расчете - плюс 14°C (что и обеспечивается в системе с безынерционными спиральными отопителями при задании температуры $15\pm 1^\circ\text{C}$). Для безынерционных отопителей в этом случае минимальная температура плюс 14°C будет поддерживаться автоматически.

Для систем с инерционными отопителями на ТЭНах, в которой разброс температур во времени составляет $\pm 3^\circ\text{C}$, минимальную температуру плюс 14°C можно обеспечить, только увеличив значение средней температуры.

Если пока не добиваться равенства для различных нагревательных систем минимальных температур воздуха на уровне пола, а обеспечивать минимальную температуру плюс 14°C на уровне расположения температурных датчиков (на высоте 130÷150 см от уровня пола), все равно среднюю точку по температуре воздуха нужно повысить минимум до плюс 17°C .

Это увеличит в среднем на $2,5^\circ\text{C}$ (при интегрировании по времени, с учетом большей, чем пауза, длительности цикла нагрева) перепад температур между окружающей средой и воздухом в салоне. Этот перепад в рассматриваемом случае (при температуре окружающей среды порядка минус $7\div 5^\circ\text{C}$) составляет порядка 20°C . Увеличение его на $2,5^\circ\text{C}$ приведет к увеличению примерно на 12÷13% мощности тепловых потерь через теплоизоляцию салона (дополнительные $2,5^\circ\text{C}$ на уровне примерно 20°C перепада температур между салоном и окружающей средой дадут дополнительно примерно пропорциональное этому увеличению потерь тепловой энергии).

В результате эффективность такого нагрева еще снизится и средняя мощность нагрева в случае использования инерционных отопителей на ТЭНах будет выше средней мощности нагрева при использовании безынерционных спиральных отопителей примерно в 1,34 раза (на 34%).

Если же пытаться в системе климат – контроля с отопителями на ТЭНах добиться такой же температуры на уровне пола, что и в системе со спиральными отопителями, то превышение расхода энергии составит по приближенным оценкам уже 55÷60%. И при этом на уровне голов пассажиров придется создать температуру воздуха на уровне 30°C .

Такой подход полностью дискредитирует идею создания энергосберегающих систем климат – контроля.

6. Общие выводы

1. Проведены экспериментальные исследования и сравнительные расчеты температурных и энергетических режимов для двух различных типов систем климат – контроля, построенных соответственно на безынерционных спиральных отопителях и на инерционных отопителях на ТЭНах. Сравнение проведено пока для единственного (среднего по

зимнему сезону) значения температуры окружающей среды порядка минус $7 \div 5^\circ\text{C}$.

Полный и более строгий расчет при всех возможных температурах окружающей среды проводится в части 2 настоящей работы. Он строится на основе интегрирования аппроксимированных температурных зависимостей. Однако и приближенные оценки показывают, что при проведении аналогичных расчетов для других температур окружающей среды, для различной суммарной мощности отопителей принципиальных отличий на качественном уровне получено не будет, а соответственно, результаты этой части работы можно считать достаточно достоверными для любых возможных зимних температур.

2. Таким образом, можно считать доказанным, что система климат – контроля с безынерционными спиральными отопителями обеспечивает существенно более комфортные климатические условия для пассажиров и для водителя троллейбуса, чем система с инерционными отопителями на ТЭНах. Самая большая разница между максимальными и минимальными значениями температуры на уровне расположения температурных датчиков (на высоте $130 \div 150$ см от уровня пола) для первой из них составляет всего 2°C , для второй же достигает практически 6°C .

3. Расчеты и приближенные оценки энергозатрат для сравниваемых систем показывают, что при задании одинаковых температур на блоке управления и индикации системы климат – контроля ($15 \pm 1^\circ\text{C}$) энергопотребление системы климат – контроля с отопителями на ТЭНах примерно на 19% выше, чем у системы с безынерционными спиральными отопителями.

С физической точки зрения это связано с тем, что при задании средней температуры на блоке управления плюс 15°C система обеспечивает фактическую среднюю температуру $\sim 15,6^\circ\text{C}$ за счет смещенных соотношений длительности времени включения и времени выключения напряжения нагрева. При этом минимальная температура на уровне расположения температурных датчиков для системы с инерционными отопителями на ТЭНах составляет всего $\sim 12^\circ\text{C}$ (на 2°C ниже, чем для системы с безынерционными спиральными отопителями).

4. С целью достижения минимальной температуры на уровне расположения температурных датчиков плюс 14°C на блоке управления системы климат – контроля следует задать среднюю температуру $\sim 17,5^\circ\text{C}$. При этом фактическое энергопотребление такой системы

повышается еще на $12 \div 13\%$. Общее превышение затрат энергии над энергопотреблением системы с безынерционными спиральными отопителями составит в этом случае уже $\sim 34\%$.

5. При попытке же обеспечить одинаковые для обеих систем минимальные температуры на уровне пола, энергопотребление системы с инерционными отопителями на ТЭНах превысит энергопотребление системы с безынерционными спиральными отопителями уже на $55 \div 60\%$.

В заключение необходимо отметить, что в основе полученных результатов по энергосбережению нет никакого «шаманства», попыток обойти закон сохранения энергии и второе начало термодинамики. В основе его совершенно понятная физическая картина протекающих в вагоне теплофизических, а также тепло - и массообменных процессов.

Если в замкнутом, ограниченном стенками объеме функционирует практически безынерционная система обогрева с активной вентиляцией воздуха, она успевает оперативно нагреть и перемешать воздух в салоне (а можно – и в кабине водителя). Кроме того, она не успевает за заданный цикл обогрева сколь либо значительно нагреть стены троллейбуса, передать через них в окружающую среду значимую долю тепловой энергии. А в полном соответствии с упомянутым выше вторым началом термодинамики, тепловой поток через любую теплоизоляцию тем сильнее, чем больше разница температур с двух сторон от нее.

В отопителях же на ТЭНах и скорость движения воздуха ниже (см. табл. 1÷3), а температура воздуха на выходе в конце циклов разогрева существенно выше фиксируемой датчиками на стене салона температуры. Вот в этот момент (до срабатывания температурных датчиков в салоне) тепло, а соответственно и затрачиваемая на его генерацию электроэнергия, и уходит на обогрев внешнего пространства. Примерно то же самое, только в значительно больших масштабах, происходит при открывании дверей, когда нагретый воздух интенсивно выбрасывается из салона и его замещает холодный воздух с улицы.

А в безынерционных системах на открытых спиралях нет ни сильных локальных перегревов самих нагревательных элементов, ни сильной неоднородности распределения температур по объему салона. Это и объясняет полученные и проверенные в эксплуатации эффекты по энергосбережению.

Библиографический список

1. Артамонов Н.А., Исаев В.В. Энергосбережение на предприятиях текстильной и легкой промышленности. Учебное пособие. РОСЗИТЛП, М., 2003.
2. Макаров А. Тенденции развития мировой энергетики и энергетическая стратегия России / А. Макаров, В. Фортов Журнал Энергорынок №7 - 2004.
3. Light's labour's lost. Policies for Energy-efficient Lighting. International energy agency- OECD/IEA, 2006.
4. Козлов А.В., Шаповалов А.С., Явчуновский В.Я. Сравнительный анализ характеристик открытых спиралей и ТЭНов в составе электронагревательных приборов. Часть 1. Расчет тепловых полей в стационарных и нестационарных тепловых режимах// Вопросы прикладной физики. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та. Вып. 15. 2008. С. 53-58.
5. Козлов А.В., Шаповалов А.С., Явчуновский В.Я. Сравнительный анализ характеристик открытых спиралей и ТЭНов в составе электронагревательных приборов. Часть 2. Экспериментальное исследование стационарных

- и нестационарных режимов// Вопросы прикладной физики. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та. Вып. 15. 2008. С. 58-63.
6. Козлов А.В. Исследование нелинейных теплофизических характеристик открытых спиралей и трубчатых электронагревателей, реализуемых в нестационарных режимах их работы.// Естественные и технические науки. 2010 г. № 4, С. 41.-45.
 7. Хабигер Э. Электромагнитная совместимость. Основы ее обеспечения в технике.//под ред. д.т.н. Б.К. Максимова. Перевод И.П. Кужекина М., Энергоатомиздат, 1995.

**CLIMATE-CONTROL AS THE MOST EFFECTIVE APPROACH TO ENERGY SAVING
IN THE URBAN ELECTRIC TRANSPORT
PART 1. THE EXPERIMENTAL DATA AND PRELIMINARY CALCULATIONS**

A.V. Miroshnik, V.Y. Yavchunovsky

The analysis of energy consumption for heating the passenger compartments and driver cabins in the systems with automatic temperature control have been carried out. It is shown that the time lag of heaters used in these systems is of fundamental importance in terms of energy efficiency. Essential advantage of systems non-inertial heating elements have been proved theoretically and experimentally both in terms of heat energy saving and in terms of ensuring the most favorable conditions for driver and passengers.

УДК 62-69

**КЛИМАТ – КОНТРОЛЬ, КАК НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД
К ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЮ НА ГОРОДСКОМ ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТЕ
ЧАСТЬ 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИЯ**

А. В. Мирошник, В.Я. Явчуновский, А. В. Козлов

Мирошник Александр Владимирович, президент международной ассоциации предприятий городского электрического транспорта (МАП ГЭТ)

Явчуновский Виктор Яковлевич, – д.ф.-м.н., директор ООО НПФ «Этна»

Козлов Андрей Владимирович, к.ф.-м.н., ведущий специалист ООО НПФ «Этна»

Проведен строгий расчет энергопотребления на обогрев пассажирских салонов и кабин водителя троллейбуса в системах с автоматическим регулированием температуры. Показано, что для любых температур окружающей среды, ниже критического значения, возможно получение значительной экономии энергии, используемой на отопление, тем большее, чем выше температура окружающей среды. На основе проведенного расчета окончательно подтверждено значительное преимущество систем с безынерционными нагревательными элементами, как в части экономии энергии на обогрев, так и в части обеспечения наиболее комфортных условий для водителя и пассажиров.

1. Введение. Постановка задачи.

В первой части настоящей работы [1] проведено экспериментальное исследование и приближенный теоретический анализ возможности существенной экономии энергии при использовании систем климат – контроля, управляющих средней мощностью нагревательных устройств, используемых для обогрева салона и кабины водителя троллейбуса, обогрев стекол в кабине и т. п.

Приведенные в этой работе расчеты и экспериментальные данные убедительно показали, в частности, что наиболее эффективным вариантом организации таких систем является их построение на основе безынерционного в тепловом отношении электронагревательного оборудования. Результаты по энергосбережению, получаемые при использовании инерционных в тепловом отношении электронагревательных приборов на основе ТЭНов существенно хуже, причем, при их использовании обеспечиваются существенно менее комфортные климатические условия для водителя и пассажиров.

В предлагаемой второй части настоящей работы для подтверждения полученных ранее результатов проводится строгий расчет температурных режимов и затрат энергии на обогрев троллейбуса для обоих

упомянутых выше типов нагревательного оборудования в широком диапазоне температур окружающей среды.

2. Исходные ограничения.

В работе [1] в качестве исходных ограничений были приняты:

1. Рассматривались только стационарные режимы работы (без учета относительно кратковременного начального разогрева).
2. Расчеты проводились для поддерживаемой системой климат – контроля температуры воздуха в салоне троллейбуса $15 \pm 1^\circ\text{C}$.
3. За нулевой отсчет времени принимался момент первого достижения системой температуры воздуха в салоне равной 16°C (первое автоматическое отключение напряжения нагрева).
4. При проведении анализа сравнивались две нагревательных системы (с безынерционными спиральными нагревательными элементами и с инерционными нагревательными элементами на основе ТЭНов) с равными суммарными установленными мощностями нагрева (~11 кВт).
5. В расчете учитывалось, что у безынерционных нагревательных устройств при отключении напряжения нагрева отключается и

питание двигателя вентилятора, а у инерционных устройств вентилятор остается включенным и при включенном, и при выключенном высоком напряжении.

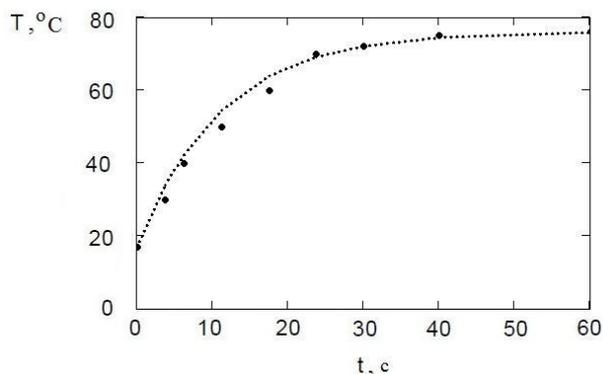
При этом полагалось, что тепловая энергия выносится из нагревательных устройств только потоком воздуха, поэтому при выключении питания вентилятора тепловая энергия из него в салон троллейбуса не поступает.

Аналогичные ограничения были приняты и в настоящей работе.

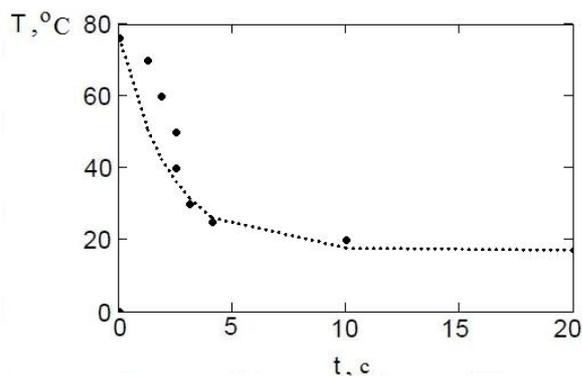
3. Исходные данные.

В качестве основных исходных данных, как и в предыдущей части работы использовались экспериментальные кривые нарастания и спада температуры воздуха на выходе отопителей при их включении – выключении:

- для устройств с безынерционными спиральными нагревательными элементами (рис. 1);
- для устройств с инерционными нагревательными элементами на ТЭНах (рис. 2).



а)



б)

Рис. 1. Временные зависимости температуры воздуха на выходе из устройств с безынерционными спиральными нагревательными элементами (а – выход в рабочий режим, б – остывание); точками показаны полученные экспериментальные данные, сплошной линией – аппроксимация данных эксперимента.

Для проведения относительно строгих расчетов температурных режимов и затрат энергии на обогрев эти кривые аппроксимировались следующими математическими зависимостями:

- для выхода в рабочий режим устройств с безынерционными нагревательными элементами:

$$T(t) = 17 \cdot e^{-0,09 \cdot t} + 76 \cdot (1 - e^{-0,09 \cdot t}) \quad (1)$$

- для остывания устройств с безынерционными нагревательными элементами:

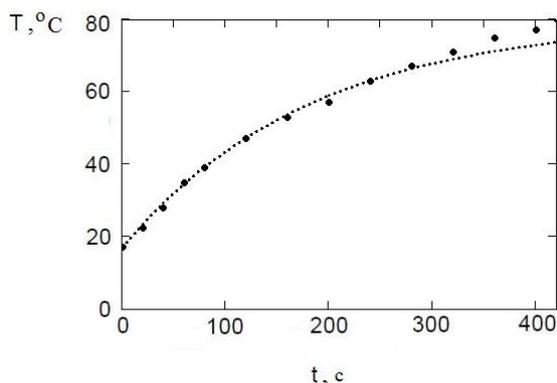
$$T(t) = 76 \cdot e^{-0,45 \cdot t} + 17 \cdot (1 - e^{-0,45 \cdot t}) \quad (2)$$

- для выхода в рабочий режим устройств с инерционными нагревательными элементами:

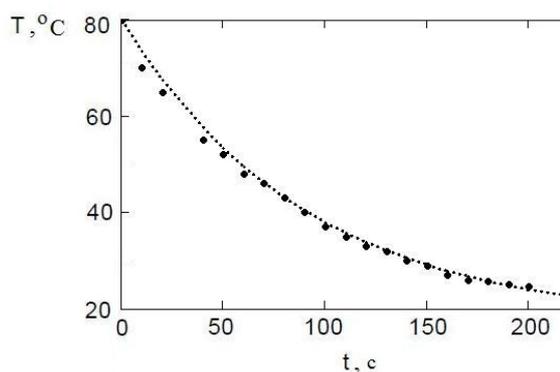
$$T(t) = 17 \cdot e^{-0,0055 \cdot t} + 80 \cdot (1 - e^{-0,0055 \cdot t}) \quad (3)$$

- для остывания устройств с инерционными нагревательными элементами:

$$T(t) = 80 \cdot e^{-0,011 \cdot t} + 17 \cdot (1 - e^{-0,011 \cdot t}) \quad (4)$$



а)



б)

Рис.2. Временные зависимости температуры воздуха на выходе из устройств с инерционными нагревательными элементами на ТЭНах (а – выход в рабочий режим, б – остывание); точками показаны полученные экспериментальные данные, сплошной линией – аппроксимация данных эксперимента.

На интегрировании этих зависимостей и строится последующий анализ температурных режимов и затрат энергии на их реализацию. На рис. 1, 2 приведены результаты сравнения данных расчета температурных зависимостей по приведенным выше

выражениям (1) – (4) с экспериментальными данными. Оно подтвердило, что различие расчетных и экспериментальных значений температуры (погрешность аппроксимации) во всех режимах и для обоих типов рассматриваемых нагревательных

устройств не превышает $\pm 1,0^\circ\text{C}$, что позволяет провести достаточно строгие последующие расчеты с их использованием.

Учет тепловых потерь салона троллейбуса при различных температурах окружающей среды проводился на основе экспериментальных данных, полученных по итогам эксплуатации этой системы (рис. 3) в течение двух зимних сезонов (в полном диапазоне осенне – зимне – весенних температур наружного воздуха). Это потери энергии, обусловленные теплообменом салона троллейбуса с окружающей средой (через теплоизоляцию салона и при прямом контакте воздуха в салоне с окружающим троллейбус воздухом при открывании дверей).

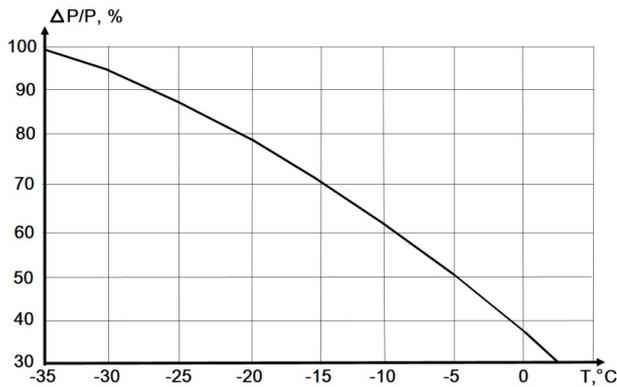


Рис.3. Зависимость доли потребляемой на отопление мощности (в процентах от суммарной установленной мощности всех отопителей) от температуры окружающей среды.

Такой подход представляется абсолютно правильным. Ведь фактически, при работе системы климат – контроля отношение используемой мощности нагревательных устройств к их установленной мощности полностью характеризует фактические тепловые потери салона при любой температуре окружающей среды. Это обусловлено тем, что требуемая для поддержания заданной температуры салона суммарная мощность как раз и компенсирует данные тепловые потери. Соответственно, для достижения теплового баланса (поддержания относительно постоянной заданной температуры в салоне троллейбуса) суммарная мощность всех электронагревательных устройств должна быть равна потерям тепловой энергии за счет теплообмена салона троллейбуса с окружающей средой.

4. Выбор расчетной схемы.

Общая логика расчета при проведении данных расчетов полностью соответствует алгоритму расчета, принятому в первой части настоящей работы.

Расчет зависимостей температуры воздуха на выходе отопителя для режимов с работающими нагревательными устройствами и при их выключении проводился по соотношению

$$\bar{T} = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} T(t) \cdot dt, \quad (5)$$

При этом интегрирование проводилось по малым интервалам времени

$$\Delta t_i = t_{i+1} - t_i, \quad 0 \leq i \leq n \quad (6)$$

Для режима нагрева в качестве t_0 выбиралось время, при котором температура воздуха в салоне опускалась до нижней границы заданного диапазона поддержания температуры воздуха в салоне (при которой включалось напряжение нагрева). Соответственно, за t_n принималось время, при котором температура воздуха поднималась до верхней границы этого диапазона (отключение напряжения нагрева).

В режиме остывания, границы t_0 и t_n задавались, наоборот:

- t_0 - время, при котором температура воздуха в салоне поднималась до верхней границы диапазона (отключение напряжения нагрева);

- t_n - время, при котором температура воздуха в салоне опускалась до нижней границы диапазона (включение напряжения нагрева).

В соответствии с изложенным выше, величина T_i в выражении (5) – это средняя температура на выходе отопителя на интервале Δt_i и, соответственно, выражение (5) нужно переписать в виде:

$$\bar{T}_i = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} T(t) \cdot dt, \quad (7)$$

Для расчетов температурных зависимостей на временных интервалах «нагрева» и «остывания» и для обоих типов (инерционных и безынерционных) нагревательных устройств расчетное выражение (7) с учетом (1) – (4) преобразовывалось к виду:

- для выхода в рабочий режим устройств с безынерционными нагревательными элементами:

$$\bar{T}_i = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (17 \cdot e^{-0,09 \cdot t} + 76 \cdot (1 - e^{-0,09 \cdot t})) dt \quad (8)$$

- для остывания устройств с безынерционными нагревательными элементами:

$$\bar{T}_i = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (76 \cdot e^{-0,45 \cdot t} + 17 \cdot (1 - e^{-0,45 \cdot t})) dt \quad (9)$$

- для выхода в рабочий режим устройств с инерционными нагревательными элементами:

$$\bar{T}_i = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (17 \cdot e^{-0,0055 \cdot t} + 80 \cdot (1 - e^{-0,0055 \cdot t})) dt \quad (10)$$

- для остывания устройств с инерционными нагревательными элементами:

$$\bar{T}_i = \frac{1}{\Delta t_i} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (80 \cdot e^{-0,011 \cdot t} + 17 \cdot (1 - e^{-0,011 \cdot t})) dt \quad (11)$$

Далее определялась энергия ΔW_i , выделяемая в салон нагревательным устройством на каждом малом интервале времени Δt_i :

$$\Delta W_i = \frac{\bar{T}_i - \bar{T}_{вс}}{T_{max} - T_{вс}} \cdot P_{\Sigma_{ny}} \cdot \Delta T_i \quad (12)$$

где $T_{вс}$ – температура воздуха в салоне,
 T_{max} – максимально достижимая температура

воздуха на выходе из отопителя,

$P_{\Sigma_{\text{нп}}}$ – суммарная мощность находящихся в салоне нагревательных устройств.

Тогда прирост температуры воздуха в салоне за интервал времени Δt_i составит:

$$\Delta T_{\text{вс}} = (\Delta W_i - P_{\text{ТП}i} \cdot \Delta t_i) / C_{\text{в}} \cdot \rho_{\text{в}} \cdot V_{\text{в}}, \quad (13)$$

где $C_{\text{в}}$ и $\rho_{\text{в}}$ – соответственно теплоемкость и плотность воздуха,

$V_{\text{в}}$ – объем салона,

$P_{\text{ТП}i}$ – мощность тепловых потерь за счет теплообмена салона с окружающей средой на расчетном интервале времени Δt_i :

$$P_{\text{ТП}i} = P_{\text{ТП}0} \cdot (T_{\text{ВС}(i-1)} - T_{\text{ОС}}) / (T_{\text{ВСзад}} - T_{\text{ОС}}), \quad (14)$$

где $P_{\text{ТП}0}$ – тепловые потери при температуре воздуха в салоне ($T_{\text{вс зад}} = 15^\circ\text{C}$), задаваемой с пульта управления системы (определяются по кривой на рис. 3 для рассматриваемой в расчете температуры окружающей среды),

$T_{\text{вс}(i-1)}$ – температура в салоне на предыдущем данному временном интервале Δt_{i-1} ,

$T_{\text{ОС}}$ – температура окружающей среды.

5. Основные результаты расчета.

Расчет по выражениям (8) – (13) для различных температур окружающей среды, соответственно, минус 5°C , минус 15°C и минус 25°C , проведенный для обоих типов нагревательных устройств (рис. 4 а, б, в), позволил определить реальные перепады температур в салоне в процессе цикла «нагрев – остывание». Данные расчеты проводились в соответствии с логикой построения системы климат – контроля при задании температуры на уровне расположения датчика температуры (на высоте 130÷150 см от пола салона), причем средняя заданная температура выбиралась одинаковой для обоих типов систем.

Из зависимостей, представленных на рис. 4, следует, что разброс температур в салоне, обеспечиваемый системами с различными типами нагревательных устройств весьма значительно отличается друг от друга.

При температуре окружающей среды минус 5°C система с безынерционными нагревательными устройствами поддерживает в процессе цикла «нагрев – остывание» разброс температур в салоне на уровне $2,2^\circ\text{C}$ (от $13,8$ до $16,0^\circ\text{C}$). В системе же с инерционными нагревательными устройствами при тех же условиях получен втрое больший разброс температур в цикле – он составляет $6,1^\circ\text{C}$ (от $11,5$ до $17,7^\circ\text{C}$).

При температуре окружающей среды минус 15°C для системы с безынерционными нагревательными устройствами разброс температур в салоне практически остается неизменным и составляет $2,4^\circ\text{C}$ вокруг средней заданной температуры (от $13,6$ до $16,0^\circ\text{C}$).

В системе же с инерционными нагревательными устройствами разброс температур в цикле при такой температуре окружающей среды достигает уже $7,8^\circ\text{C}$ (от $8,8$ до $16,6^\circ\text{C}$). При этом средняя температура фактически смещается относительно заданной температуры (15°C) на минус $2,3^\circ\text{C}$ (до $12,7^\circ\text{C}$).

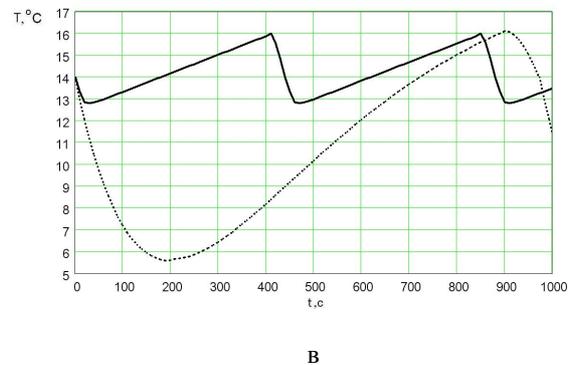
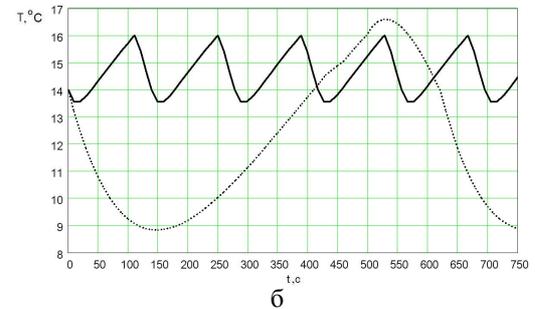
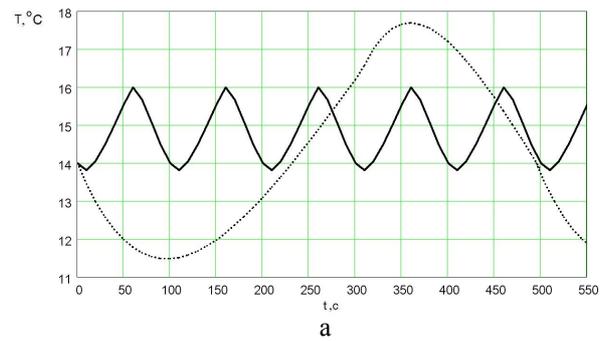


Рис. 4. Расчетные временные зависимости изменения температуры воздуха в салоне при использовании системы климат – контроля на основе безынерционных спиральных нагревательных устройств (—) и инерционной системы на ТЭНах (-----). Температуры окружающей среды соответственно минус 5°C (а), минус 15°C (б), минус 25°C (в).

При самой низкой расчетной температуре окружающей среды (минус 25°C) система с безынерционными нагревательными устройствами поддерживает разброс температур в салоне в течение цикла на уровне $3,2^\circ\text{C}$ (от $12,8$ до $16,0^\circ\text{C}$). При этом фактическая средняя температура смещается всего на $0,6^\circ\text{C}$. Система же с инерционными нагревательными устройствами при такой температуре уже практически не способна обеспечить сколь либо комфортные условия для пассажиров троллейбуса:

- разброс температур в цикле «нагрев – остывание» составляет $10,5^\circ\text{C}$ (от $5,6$ до $16,1^\circ\text{C}$);
- средняя температура в цикле снижается до $10,8^\circ\text{C}$;
- минимальная же в цикле температура снижается до плюс $5,6^\circ\text{C}$.

Из полученных расчетных зависимостей можно сделать выводы и о реальных энергозатратах на отопление для систем с различными типами нагревательных устройств.

При температуре окружающей среды минус 5°C для системы с безынерционными нагревательными устройствами среднее время нагрева и среднее время

остывания соотносятся примерно, как 1:1. Для системы же с инерционными нагревательными устройствами среднее время нагрева и среднее время остывания соотносятся, как 59:40. Это означает, что система с безынерционными нагревательными устройствами функционирует при этой температуре с уровнем средней мощности, составляющим примерно 50% от ее установленной мощности. Система же с инерционными нагревательными устройствами использует в тех же условиях порядка 59,6 % установленной мощности, т. е. на 19,2 % больше.

Расчет для температуры окружающей среды минус 15°C для системы с безынерционными нагревательными устройствами дает соотношение среднего времени нагрева и среднего времени остывания примерно, как 11:3, т. е. используется порядка 78% от установленной мощности системы. Для системы с инерционными нагревательными устройствами это соотношение составляет 27:6, что означает, что используется порядка 82% от установленной мощности. Таким образом, в этом режиме система с инерционными нагревательными устройствами использует на 5% больше мощности, чем система с безынерционными нагревательными устройствами. При этом она обеспечивает и недостаточно комфортные климатические условия для пассажиров.

И, наконец, при температуре окружающей среды минус 25°C обе системы потребляют порядка 92-93% от установленной мощности. Однако система с безынерционными нагревательными устройствами обеспечивает для пассажиров троллейбуса практически столь же комфортные климатические условия, что и при более высоких температурах наружного воздуха (не ниже 12,8°C). В то же время система с инерционными нагревательными устройствами обеспечивает в нижней части цикла «нагрев - остывание» лишь небольшую плюсовую температуру (5,6°C).

Еще более корректным представляется сравнение систем с инерционными и безынерционными нагревательными устройствами при задании не одинаковой средней температуры салона, а одинаковом минимальном ее значении. Для этого, как следует из полученных выше результатов (рис 4 а, б, в), нужно сместить температуру, задаваемую на пульте системы с инерционными нагревательными устройствами (относительно системы с безынерционными нагревательными устройствами), соответственно:

- для температуры окружающей среды минус 5°C - примерно на 3°C (до 18°C),
- для температуры окружающей среды минус 15°C - на 5,2°C (примерно до 20°C),
- для температуры окружающей среды минус 5°C - на 8,2°C (примерно до 22°C).

Разумеется, задание средних температур салона на уровне до 20°C (при этом верхняя достигаемая в салоне температура составит ~ 22°C), а тем более на уровне до 22°C создаст достаточно дискомфортные условия для пассажиров троллейбуса. Поэтому сравнительный расчет для примерно одинаковых минимальных температур в салоне (рис. 5) проводился только для средне-зимней температуры окружающей среды минус 5°C (при задании средней температуры на пульте системы с инерционными нагревательными устройствами 18°C, а на пульте системы с безынерционными нагревательными устройствами - 15°C).

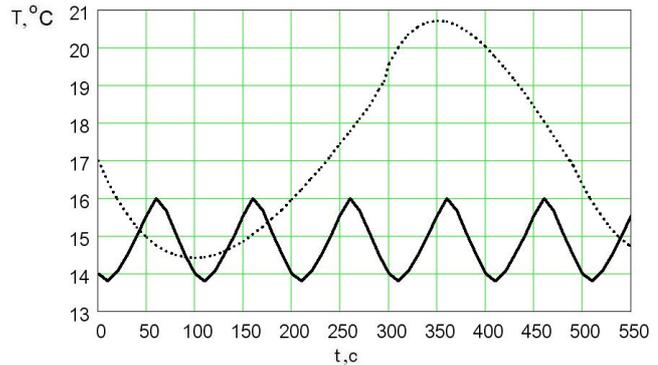


Рис. 5. Расчетные временные зависимости изменения температуры воздуха в салоне при использовании системы с безынерционными нагревательными устройствами (—) и с инерционной системой на ТЭНах (-----). Температура окружающей среды минус 5°C (а). Заданная средняя температура салона для системы с безынерционными нагревательными устройствами – плюс 15°C, для системы с инерционными нагревательными устройствами – плюс 18°C.

Этот расчет показал (рис 5), что в этом случае для системы с инерционными нагревательными устройствами минимальная в цикле температура действительно достигает тех же значений, что и для системы с безынерционными нагревательными устройствами (~14°C). Однако верхняя температура в этом цикле достигает примерно 21°C, что достаточно некомфортно для находящихся там в верхней одежде пассажиров троллейбуса.

При этом в такой системе потребление мощности на нагрев составляет порядка 69% от установленной мощности отопления салона, т. е. энергия, затрачиваемая на отопление, примерно на 38% выше, чем в случае использования системы с безынерционными нагревательными устройствами.

Сравнительный анализ параметров двух типов систем при температуре окружающей среды от средне-зимней (минус 5°C) до близкой к предельно возможной (минус 25°C) представлен на рис. 6 а, б и 7 а, б).

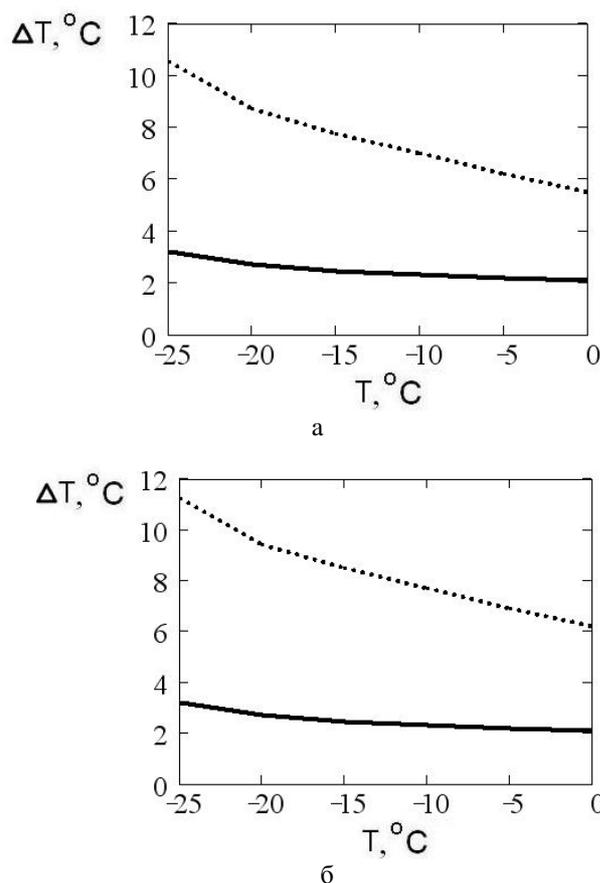


Рис. 6. Сравнение зоны изменения температуры в салоне при различных температурах окружающей среды для системы с безынерционными нагревательными устройствами (—) и для инерционной системы на ТЭНах (-----):

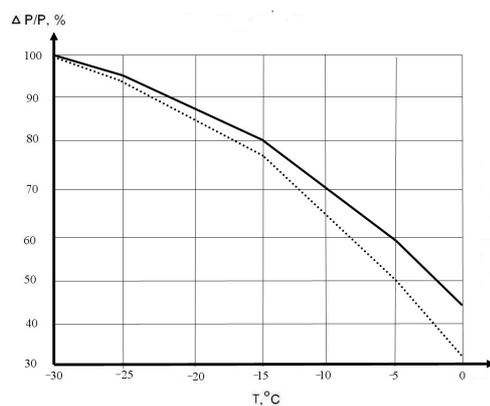
а - при задании для обоих типов систем одинаковых средних температур салона (плюс 15°C);

б - при задании разных для этих типов систем средних температур салона (соответственно плюс 15°C и плюс 18°C).

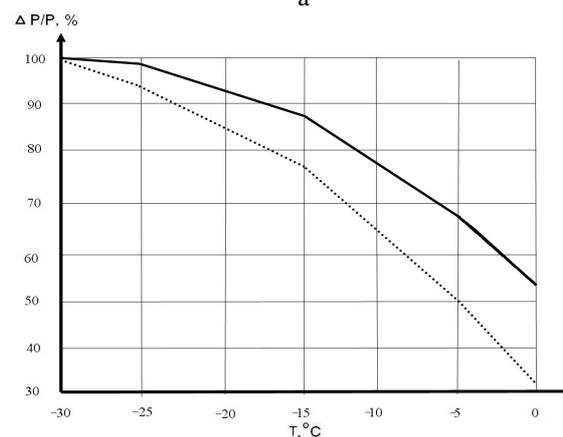
Из представленных данных видно, что по мере понижения температуры различие в величинах энергопотребления систем постепенно вырождается (рис. 7). Это и понятно – при достаточно низких температурах окружающей среды обе системы работают практически постоянно, а начиная с температуры порядка минус 30°C, вообще не будут отключаться. При этом потребление обеих систем сблизится и фактически будет равно установленной мощности обогрева троллейбуса.

Наоборот, при относительно высокой температуре окружающей среды обе системы будут все чаще выключаться и включаться, и здесь преимущество системы с безынерционными нагревательными устройствами, мгновенно реагирующими на команды блока управления на границах заданного диапазона температур, проявится в наибольшей степени.

Что касается комфортности климатических условий, то, наоборот, при относительно высоких температурах наружного воздуха, при относительно коротких циклах «нагрев - остывание», ширина зоны температур, обеспечиваемая инерционными системами на ТЭНах, не столь значительно превышает разброс тем-



а



б

Рис. 7. Сравнение доли использования мощности на отопление салона от полной установленной мощности обогрева при различных температурах окружающей среды для системы с безынерционными нагревательными устройствами (-----) и для инерционной системы на ТЭНах (—): а - при задании для обоих типов систем одинаковых средних температур салона (плюс 15°C); б - при задании разных для этих типов систем средних температур салона (соответственно плюс 15°C и плюс 18°C).

ператур обеспечиваемый системами с безынерционными нагревательными устройствами. Для средней температуры окружающей среды минус 5°C это различие составляет не более 3 раз, а нижняя температура салона в процессе цикла «нагрев - остывание» для инерционных систем на ТЭНах составляет примерно 12°C, что еще относительно приемлемо. При более низких температурах ширина зоны температур, обеспечиваемая инерционными системами на ТЭНах, значительно возрастает. При этом в относительном выражении он превышает аналогичный разброс для безынерционных систем также примерно в 3 раза, однако абсолютный разброс нижней и верхней температур достигает уже 11÷13°C. При этом нижняя граница диапазона температур в цикле, обеспечиваемая инерционными системами опускается практически до 5°C и ниже даже на уровне датчиков температуры. На уровне же пола на таких системах почти наверняка будут получены нулевые, а может быть, даже и отрицательные температуры воздуха.

6. Выводы и обобщения.

Как и предполагалось в первой части настоящей работы, при относительно строгом расчете по построен-

ным во второй части моделям получились результаты, качественно очень близкие к оценкам, сделанным в первой части настоящей работы.

Из полученных результатов видно, что при относительно небольших отрицательных температурах (близких к средне – зимней температуре в средней полосе РФ), когда система климат – контроля обеспечивает очень значительную экономию расходуемой на отопление троллейбуса электроэнергии, значительный эффект по энергосбережению получается именно при использовании безынерционных нагревательных устройств. При использовании инерционных нагревательных устройств этот эффект практически вдвое меньше.

При работе вблизи самых низких температур, когда для качественного обогрева требуется мощность обогрева, близкая к установленной мощности нагревательных устройств, эффект энергосбережения для обоих типов нагревательных устройств практически отсутствует.

Однако следует при этом помнить, что среднегодовой эффект по энергосбережению, обеспечиваемый при использовании рассматриваемых систем климат – контроля эквивалентен как раз расчетным и экспериментальным данным по энергосбережению, реализуемым при средне – зимних температурах. А, соот-

ветственно, он будет различен для рассматриваемых типов нагревательных устройств. Если в системах климат – контроля с безынерционными нагревательными устройствами можно экономить порядка 50% энергии, то в системах с инерционными нагревательными устройствами экономия составит не более 30%, а в относительно теплых регионах – и того меньше.

Что же касается комфортности для пассажиров (и водителя) троллейбуса, то при относительно высоких температурах окружающей среды (от 0 до минус 5°C) использование систем с инерционными нагревательными устройствами еще относительно допустимо, хотя и хуже варианта использования безынерционных систем. При низких же температурах их использование просто недопустимо, поскольку это приводит и к очень низким минимальным температурам в цикле «нагрев - остывание», и к очень дискомфортным перепадам температур (до 11÷13°C в течение относительно небольших интервалов времени).

Системы же климат – контроля с безынерционными нагревательными устройствами обеспечивают гораздо более комфортные, практически идеальные климатические условия для пассажиров и водителя, поддерживая температуру в течение любого интервала времени с точностью $\pm 1,0 \div 1,6^\circ\text{C}$ относительно заданной водителем температуры салона и кабины.

Библиографический список

1. Мирошник А.В., Явчуновский В.Я. Климат – контроль, как наиболее эффективный подход к энергосбережению на городском электротранспорте. Часть 1. Экспериментальные данные и предварительные расчеты// Вопросы прикладной физики. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та. Вып. 18. 2012. С.
2. Козлов А.В., Шаповалов А.С., Явчуновский В.Я. Сравнительный анализ характеристик открытых спиралей и ТЭНов в составе электронагревательных приборов. Часть 1. Расчет тепловых полей в стационарных и нестационарных тепловых режимах// Вопросы прикладной физики. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та. Вып. 15. 2008. С. 53-58.
3. Козлов А.В., Шаповалов А.С., Явчуновский В.Я. Сравнительный анализ характеристик открытых спиралей и ТЭНов в составе электронагревательных приборов. Часть 2. Экспериментальное исследование стационарных и нестационарных режимов// Вопросы прикладной физики. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та. Вып. 15. 2008. С. 58-63.

CLIMATE-CONTROL AS THE MOST EFFECTIVE APPROACH TO ENERGY SAVING IN THE URBAN ELECTRIC TRANSPORT PART 2. THEORETICAL EVALUATION OF ENERGY CONSUMPTION.

A.V. Miroshnik, V.Y. Yavchunovsky, A.V.Kozlov

The rigorous calculation of energy consumption for heating the passenger compartments and driver cabins in the systems with automatic temperature control have been carried out. It was shown, that at any temperatures of environment which are lower than its critical value, a significant saving of energy used for heating, is possible, and it is greater at the higher ambient temperatures. The significant advantage of the systems with non-inertial heating elements both in terms of energy saving and in terms of ensuring the most favorable conditions for driver and passengers was finally confirmed on the basis of that calculation.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОДИФфуЗИИ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР
ЭЛЕКТРОКОНВЕКТИВНОГО ТЕЧЕНИЯ

И. А. Ермолаев

Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского,
Ермолаев Игорь Анатольевич, к.ф.-м.н., вед. инженер, р.т. (8452) 51-48-52.

Методами численного моделирования изучается влияние величины коэффициента диффузии ионов на границы устойчивости пространственно-периодических вихревых структур электроконвективного течения.

Электрическое поле плоского конденсатора может приводить к возникновению электроконвективного течения жидкого диэлектрика, напоминающего ячейки Бенара. Течение возникает кризисным образом в результате потери устойчивости равновесия плоского слоя при изотермических условиях. Причиной, вызывающей конвективное течение в однородном электрическом поле, является униполярная инжекция зарядов с катода [1]. Вследствие чего около электрода образуется одноименный электрический заряд, который или успевает релаксировать за счет омического тока и взаимодействия с противоположными ионами жидкости, либо провоцирует электроконвективное движение в виде пространственно-периодических стационарных двухмерных вихрей.

При описании электрогидродинамических явлений в слабопроводящих жидкостях считается, что полная плотность тока в жидкости является суммой независимых токов проводимости, диффузии и конвекции:

$$\vec{j}_i = b_i q_i \vec{E} - D_i \text{grad } q_i + \vec{V} q_i,$$

где \vec{j}_i – плотность тока, b_i – подвижность ионов, q_i – объёмная плотность ионов, \vec{E} , \vec{V} – векторы напряжённости электрического поля и механической скорости жидкости, D_i – коэффициент электродиффузии.

В большинстве работ, посвященных численному моделированию электроконвекции, например [2], а также исследованию устойчивости слабопроводящих жидкостей в электрическом поле, например [3], эффект электродиффузии считается пренебрежимо малым.

При оценке величины D_i обычно используется соотношение Эйнштейна, эмпирически оправданное для водных электролитов:

$$D_i = \frac{kT b_i}{e z_i}, \quad \frac{kT}{e} \equiv \varphi_0,$$

где φ_0 – характеристический (специфический осмотический) потенциал, k – постоянная Больцмана, T – температура, e – модуль заряда электрона, z_i – валентность ионов. Величина характеристического потенциала при комнатной температуре составляет примерно 0.026 В на единицу обратной валентности, что при подвижности ионов 10^{-8} м²/В·с обеспечивает порядок величины коэффициента диффузии 10^{10} м²/с. Это позволяет считать эффект электродиффузии пренебрежимо малым, поскольку

$$D_i |\nabla q| \ll q b_i |E|.$$

Однако в настоящей работе показано, что столь малая величина электродиффузионного тока может оказывать влияние вблизи критических точек системы, например, вблизи границ устойчивости.

Плоскопараллельный бесконечный слой слабопроводящей жидкости моделировался прямоугольной ячейкой шириной L , высотой H , с условиями симметрии на боковых границах. На нижнем электроде (катоде) был задан линейный закон инжекции зарядов [4], на аноде разрядка ионов считалась мгновенной. На твердых непроницаемых границах (электродах) обеспечивались условия «прилипания» вязкой жидкости, граничные условия для вихря скорости вычислялись по формуле Вудса. Для описания течения и поля объёмной плотности зарядов использовалась декартова система координат.

В качестве масштабов расстояния, времени, скорости, заряда и напряженности поля были выбраны: H , H^2/ν , ν/H , $\varepsilon E_0/(4\pi H)$, E_0 , тогда безразмерные переменные: $X=x/H$, $Y=y/H$, $\tau=\nu/H^2$, $U=uH/\nu$, $V=vH/\nu$, $Q=q(4\pi H)/\varepsilon E_0$, $e_x=E_x/E_0$, $e_y=E_y/E_0$. Здесь x , y – координаты; t – время; ν – коэффициент кинематической вязкости; ε – абсолютная диэлектрическая проницаемость, E_x , E_y – составляющие вектора напряженности электрического поля, q – объёмная плотность зарядов, u , v – составляющие скорости в проекции на оси x , y соответственно. Безразмерные уравнения изотермической электроконвекции были записаны в переменных "вихрь скорости–функция тока–объёмная плотность зарядов" как

$$\frac{\partial \omega}{\partial \tau} + \frac{\partial \psi}{\partial Y} \frac{\partial \omega}{\partial X} - \frac{\partial \psi}{\partial X} \frac{\partial \omega}{\partial Y} = \Delta \omega + Gr_e \cdot e_x \cdot \frac{\partial Q}{\partial Y} - Gr_e \cdot e_y \cdot \frac{\partial Q}{\partial X},$$

$$\Delta \psi = \omega,$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \tau} + \frac{\partial \psi}{\partial Y} \frac{\partial Q}{\partial X} - \frac{\partial \psi}{\partial X} \frac{\partial Q}{\partial Y} = -\frac{1}{Pr_e} Q + \frac{1}{Pr_d} \Delta Q,$$

где $Gr_e = \varepsilon E_0^2 H^2 / 4\pi \rho \nu^2$ – электрический аналог числа Грасгофа, $Pr_e = \varepsilon \nu / \sigma_0 H^2$ – электрический аналог числа Прандтля, $Pr_d = \nu / D_i$ – диффузионное число Прандтля.

Задача решалась методом конечных элементов Галеркина, на линейных треугольных конечных элементах, по неявной двухслойной временной схеме. Вычислительный эксперимент проводился для слабопроводящей жидкости с $Pr_e = 0.15$ и безразмерной инжекцией зарядов с катода 7.85 . Эти величины соответствуют раствору молекулярного йода в трансформаторном масле при $\sigma_0 = 10^{-10}$ (Ом·м)⁻¹. Значение числа Грасгофа $Gr_e = 4 \cdot 10^2$ эквивалентно напряженности электри-

ческого поля 10 кВ/см , что позволяло считать течение ламинарным и обеспечивало достаточно широкий интервал устойчивости.

Определялись границы устойчивости вихревых структур. Стационарное надкритическое течение моделировалось методом установления, как результат временной эволюции начального двухвихревого возмущения. Горизонтальный масштаб, описывающий пространственно–периодическую структуру течения $l=2\pi/k$ варьировался с шагом 0.05, где k – волновое число. Фиксировалось значение l , соответствующее

потере устойчивости и разрушению двухвихревого течения.

При $Di=0$ интервал устойчивости составлял $2.5 \leq k \leq 15.7$. С увеличением коэффициента диффузии до $Di=10$ интервал устойчивости уменьшался и смещался в сторону меньших волновых чисел $1.9 \leq k \leq 4.0$. Таким образом, вблизи критических точек электроконвективной системы столь малый диффузионный ток снижает устойчивость пространственно–периодических структур течения и должен учитываться при теоретических исследованиях.

Библиографический список

1. Жакин А.И., Тарапов И.Е. // Изв. АН СССР Механика жидкости и газа. 1981. №4. С.20–26.
2. Тарунин Е.Л., Ямшинина Ю.А // Изв. РАН Механика жидкости и газа. 1994. №3. С.23–29.
3. Жакин А.И. // Изв. АН СССР Механика жидкости и газа. 1979. №4. С.137–142.
4. Ермолаев И.А., Жбанов А.И. // Изв. РАН Механика жидкости и газа. 2003. №6. С. 3–7.

THE EFFECT OF ELECTRODIFFUSION ON THE STABILITY OF VORTEX STRUCTURES OF THE ELECTROCONVECTION FLOW

I.A. Ermolaev
Saratov State University

The methods of numerical simulation were applied to study the influence of the value of the coefficient of diffusion of ions on the boundaries of stability of spatially periodic vortex structures in electroconvective flow.

К МЕТОДИКЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ КАТОДНОГО УЗЛА ЭВП

В.С. Кошелев

Саратовский государственный университет

Кошелев Василий Сергеевич, д.т.н., профессор

Представлены методические подходы к исследованию термомеханической оптимизации катодного узла электровакуумных приборов (ЭВП.)

Термоупругая модель с релаксацией – ключ к пониманию формоизменения и разрушения сверхдолговечных катодов. Модель позволяет определить место расположения опасных областей, упругие напряжения и деформации в них, описать процесс образования пластической деформации в течение одного цикла нагрева и проследить кинетику накопления пластических деформаций последовательно цикл за циклом в течение всего времени эксплуатации узла.

С помощью ЭВМ модель позволяет предсказать эффект формоизменения и разрушения узла при сложном характере термоциклирования, когда амплитуда и длительность термоцикла изменяются по заранее выбранной программе.

Реализация модели на ЭВМ даёт уникальную возможность оптимизации катодного узла по геометрическим параметрам путём перебора возможных геометрий конструкции и выбора той из них, которая при заданной программе термоциклирования обеспечивает заданный ресурс.

Типичная модель сверхдолговечного катода приведена в [1,2]. Эта конструкция используется для расчёта упруго-напряжённого состояния держателя «вдали» от места крепления камеры катода с держателем, где влияние особенностей способа соединения пренебрежимо мало. Для определения упруго-напряжённого состояния в месте крепления и «вблизи» него используется конструкция с точечной сваркой по окружности держателя. Ограниченный ресурс таких катодных узлов связан с формоизменением и разрушением керна катода и держателя [1-3]. Главной причиной этого является накопление пластической деформации, приводящее к увеличению диаметра керна катода, возрастанию стрелы прогиба керна и рекристаллизация материалов катодного узла. Здесь будет подробно рассмотрен только случай, когда главным является лишь механизм образования и накопления пластических деформаций, а рекристаллизацией можно пренебречь.

Существуют два физических механизма образования пластической деформации, когда термические напряжения превышают предел упругости материала при данной температуре и механизм постепенного образования пластической деформации в течение термоцикла путём релаксации упругих термонапряжений.

Известно, что эксплуатация конструкций, находящихся в зоне пластического деформирования при высоких температурах, в течение длительного времени невозможна, так как в области высоких температур металлы и сплавы, используемые в катодах, теряют свойства пластической приспособляемости. В связи с этим эволюция узла во времени может идти двумя путями. Подвергаясь в каждом цикле деформированию в зоне пластичности, узел может или накапливать пластическую деформацию прогрессирующими темпами, или через определённое число циклов из-за интенсивно протекающей при высоких температурах релаксации перейти в упругую область деформирования. В первом случае узел оказывается недолговечным, во втором – он перейдёт в упругое состояние с менее интенсивным процессом релаксации упругих термонапряжений, так как уровень напряжений в этой области всегда меньше таковых в области пластичности.

Таким образом, становится очевидным, что катодные узлы, претендующие на сверхдолговечность, должны деформироваться в течение основного времени работы упруго. В этом случае единственным механизмом образования и последующего накопления пластической деформации является механизм релаксации упругих термонапряжений путём перехода части упругой деформации в пластическую. Возникая в течение каждого термоцикла и накапливаясь от цикла к циклу, такая релаксационная пластическая деформация неизбежно приводит к формоизменению (и разрушению) катодного узла.

Библиографический список

1. Скапцов А.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 1998. Вып. 4. С. 40-42.
2. Никонов Б.П., Судакова Л.Н., Свешникова Н.М. // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. М., 1980. Вып. 12. С. 27.
3. Балабакин В.Е. и др. // Электронная техника. Сер. Электроника СВЧ. М., 1970. Вып. 9.

THE METHODS OF STUDY OF THERMOMECHANICAL OPTIMIZATION OF CATHODE UNITS OF VACUUM TUBES

V.S. Koshelev

Saratov State University, Saratov

The methodical approaches to the study of thermomechanical optimization of the cathode unit of the electrovacuum devices.

ОБ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ЭНЕРГИИ ПОЛЯ И ВЕЩЕСТВА

М.В. Давидович

Саратовский государственный университет

Давидович Михаил Владимирович, д.ф.-м.н., профессор кафедры радиотехники и электродинамики

E-mail: davidovichmv@info.sgu.ru

Рассмотрены подходы к корректному определению энергии системы электромагнитное поле–вещество с учетом нестационарности и дисперсии. Отмечены неточности, допущенные в работах Краснова И.П., посвященных этому вопросу (Письма в ЖТФ: 2009 В. 3 и 2010, В. 16).

По теме настоящей заметки недавно опубликован ряд работ, в частности, [1-5] (см. также литературу в [5]). Названия работы [2] и настоящей совпадают. В [1-2] акцентируется внимание на то, что используемое в большинстве монографий, учебников и статей соотношение для плотности электромагнитной энергии в веществе

$$u = u_e + u_m = (1/2)(\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}) + (1/2)(\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}) \quad (1)$$

не является верным. Этот факт впервые был отмечен и обсужден в работе [3], а также в [4,5]. Хотя в [2] есть ссылка на [3] (правда, в другом контексте), в предшествующей статье [1] ссылки на публикацию [3] нет. Далее, в работах [1,2] предпринята попытка корректного определения плотности энергии системы “электромагнитное поле - вещество” (СЭПВ), используя теорему Пойнтинга.

Для корректного введения плотностей энергии, импульса (количества движения) и момента импульса следует, вообще говоря, сначала определить, плотности каких субстанций мы хотим найти, и какие взаимодействия мы учитываем. Простейшая модель – это учет только электромагнитного взаимодействия поля и вещества. Скажем, можно рассматривать электромагнитное взаимодействие поля с заряженной частицей (или с несколькими частицами) в нерелятивистском пределе (число частиц сохраняется, и методы квантовой электродинамики привлекать не нужно). Тогда результат хорошо известен: строится симметричный тензор энергии-импульса (ТЭИ) поля (в форме Абрагама) и ТЭИ вещества [6,7,8]. При этом поле воздействует на частицы вещества (заряды), ускоряя их, а они в свою очередь могут генерировать поле. В этом случае энергия взаимодействия поля и вещества обычно пренебрежимо мала (нет актов рождения и уничтожения частиц), и полную энергию можно разделить на энергию поля и вещества. В электродинамике сплошных сред решить уравнения движения свободных и связанных зарядов в поле не представляется возможным, и они заменяются некими материальными соотношениями (или уравнениями для поляризации, как в [2]). Последние в среднем характеризуют указанное движение частиц, при этом вводятся индукции \mathbf{D} и \mathbf{B} . Собственно, их появление указывает на то, что мы определяем плотности для СЭПВ. Рассмотренная система поле плюс одна или несколько заряженных частиц была замкнутой. Замкнутость весьма важна, коль скоро мы привлекаем законы сохранения. Спрашивается, замкнута ли СЭПВ? Можно считать, что нет [5]. Именно, существующее в веще-

стве электромагнитное поле (ЭМП) могло быть создано сторонними источниками, не относящимися к рассматриваемому веществу. Например, электромагнитная волна (ЭМВ) создается в далеком прошлом удаленными источниками, а в некоторый момент t соответствующий ей нестационарный волновой пакет (импульс или цуг) входит в рассматриваемое вещество (или в объем с таким веществом) и распространяется в нем. Вполне законен вопрос об энергии, импульсе (моменте количества движения) СЭПВ и скоростях их переноса. Часто пользуются понятием стационарной монохроматической (гармонической) ЭМВ в веществе. Она, как и среда, бесконечна в пространстве, а процесс периодический (бесконечный во времени). Естественно, это абстракция. В ее рамках невозможно определить плотности энергии и импульса СЭПВ [9,10] (запасенная энергия может быть произвольной). Однако в ряде случаев рассмотрение квази-монохроматических процессов, приближающихся к гармоническим, позволяет провести такое определение [3,4,9-11]. Любое вещество обладает дисперсией и, следовательно, потерями [10] (за исключением некоторых гипотетических сред, например, бесстолкновительной плазмы). Введение в большом числе учебников, монографий и статей плотности энергии по Бриллюэну [10] для монохроматической ЭМВ

$$u = u_e + u_m = (1/2)[\epsilon_0 |E(\omega, r)|^2 (\partial/\omega)(\omega \epsilon(\omega, r)) + \mu_0 |H(\omega, r)|^2 (\partial/\omega)(\omega \mu(\omega, r))] \quad (2)$$

(как альтернатива соотношению (1)) тоже некорректно. Плотность (2) вводится так же, как первое приближение теории дисперсии (групповая скорость). Оно, собственно, и было призвано “доказать” что “групповая скорость есть скорость движения энергии”. Вывод (2) (как и групповой скорости) основан на асимптотическом разложении спектральных интегралов и использовании в нем нулевого и первого членов при полном отсутствии потерь [10]. Последнее обстоятельство весьма существенно, но о нем часто забывают. Асимптотические разложения могут, вообще говоря, расходиться, а отсутствия потерь в диспергирующей среде быть не может. Оно в конечной полосе частот ведет и к отсутствию дисперсии [3,11,12]. Таким образом, (2) есть тривиальный результат для недиспергирующих сред. Ущербность определения (2) и в том, что оно усреднено по времени (периоду) и в него явно входит частота, а не время. Но его нельзя обратить по Фурье, т.е. получить зависящие от координат и времени плотности, что предполагает (и требует) произвольный нестационарный процесс.

ЭМВ есть перенос энергии и импульса фотонами между актами их взаимодействия с частицами вещества, что эквивалентно движению квазифотонов [8]. Это квазичастицы, обусловленные коллективными эффектами. Частицы вещества под действием волны обычно движутся с весьма малыми скоростями (за исключением ряда космологических эффектов). Формулы (1), (2) вообще относятся к неподвижному веществу. Поэтому процессами переноса вещества часто пренебрегают. Поле разогревает вещество и ускоряет его частицы, что обуславливает неравновесность и нестационарность. При весьма медленной поляризации, когда нагревом можно пренебречь, (1) есть верное соотношение в статике [3-6,9-11,13,14]. Естественно, строго статических процессов нет, но производную по времени можно сделать малой, а процесс установления поляризации весьма длительным и с неизменной температурой. Тогда (1) есть свободная энергия СЭПВ [6,10]. В [1] выдвинуто утверждение, что соотношение (1) ошибочно и в статике. Однако не вызывает сомнения, что ошибочно не соотношение (1) в статике, а утверждение из [1]. Доказательство верности (1) для электростатики проведено, например, в монографии [6]. Автор [1] ссылается на работу Максвелла [13] и монографию Джексона [14], где рассматривается энергия намагниченного тела (магнита) в отсутствии внешнего поля, и показано, что она равна нулю. Однако ясно, что энергию магнита (системы магнитов) нельзя напрямую отождествлять с энергией единицы объема магнитной среды (магнетика). Автор [1] утверждает, что интеграл от (1) по всему бесконечному пространству конечен, и определяет полную статическую энергию системы поляризованных и намагниченных тел. Но никто же не запрещает рассматривать как модель бесконечную среду (например, однородный диэлектрик с проницаемостью ϵ) в постоянном внешнем электрическом поле, скажем $\mathbf{E}(\mathbf{r})=z_0\mathbf{E}$. Интеграл от (1) по всему пространству расходится, но для конечного объема V конечен и равен $(\epsilon_0\epsilon\mathbf{E}^2/2)V$, где множитель перед объемом есть плотность энергии. Кстати, автор (1) противоречит сам себе: немного ранее на той же стр. 222 (формула (5) из [13]) Максвеллом получена формула

$$U_e = 1/2 \int \mathbf{D}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) d^3r = \epsilon_0 / 2 \int \epsilon(\mathbf{r}) \mathbf{E}^2(\mathbf{r}) dV > 0. \quad (3)$$

Здесь $U_e > 0$, поскольку в статике дисперсии нет, а $\epsilon > 0$. Автор работ [1,2] путает понятия постоянной намагниченности (магнитов) и спонтанной поляризации (пироэлектриков и сегнетоэлектриков) в отсутствии полей с откликом поляризации на действие внешних статических полей, а также понятие о плотности энергии поляризованной среды с энергией поляризованных тел во внешних полях или в их отсутствии. Энергия системы подобных тел будет зависеть от многих факторов, в частности от того, имеют ли тела резкую границу (скачки ϵ и μ). Это приводит к связанным поверхностным зарядам и к возникновению в соотношениях типа (3) поверхностных интегралов (при выводе (3) Максвелл предполагал непрерывное распределение их плотности). Аналогично по поверхности магнетика циркулируют поверхностные токи, и тоже возникают поверхностные интегралы. В процес-

се создания поля в веществе следует рассматривать накопление и диссипацию энергии при нелокальных во времени и в пространстве материальных уравнениях. Такой подход рассмотрен в [5]. В общем (глобальном) балансе следует учитывать энергию (отрицательную) сторонних источников, затраченную на работу $\mathbf{W}=\mathbf{w}d\mathbf{V}$ по созданию поля в элементе объема $d\mathbf{V}$, а также импульс и момент импульса, полученные этими источниками. Указанная работа расходуется собственно на запасенную энергию $\mathbf{U}=\mathbf{u}d\mathbf{V}$, плотность диссипированной энергии $\mathbf{Q}=\mathbf{q}d\mathbf{V}$ (тепло), а также на вытекание энергии из объема. Уносить энергию из объема могут как фотоны, так и частицы вещества. Разогретое вещество излучает во всем диапазоне, при этом даже для плоской монохроматической волны в однородной среде разогрев неоднородный. В общем случае процесс нестационарный, неравновесный и нелинейный. В линейном случае слабой плоской монохроматической волны в однородной среде с заданной дисперсией и неизменной плотностью в пренебрежении процессами разогрева и ускорения среды можно на основе балансных соотношений получить указанные выше плотности [3,4].

Далее, в [1] утверждается, что вместо формулы (1) следует принять формулу, соответствующую плотности энергии ЭМП в вакууме: $\mathbf{u}_0=\mathbf{u}_{0e}+\mathbf{u}_{0m}$, $\mathbf{u}_{0e}=(1/2)(\epsilon_0\mathbf{E}^2)$, $\mathbf{u}_{0m}=(1/2)(\mu_0\mathbf{H}^2)$. Это ошибка, т.к. эта формула не может характеризовать плотность энергии СЭПВ (в нее даже не входят параметры среды), а разделить плотность энергии на "полевую" и "вещественную" части в общем случае невозможно (см. [5]). Затем в [1] вводится плотность импульса $\mathbf{G}=\mathbf{G}^A=\epsilon_0\mu_0\mathbf{E}\times\mathbf{H}=\mathbf{S}/c^2$ "исходя из общепринятого его определения", т.е. в форме Абрагама (ФА). Хотя ФА достаточно широко распространена в литературе, но она не является общепринятой. С таким же (и даже большим) успехом для конденсированных сред используется форма Минковского (ФМ), а соответствующей дискуссии более ста лет (см., например, [5,8,15]). Для конденсированных сред ФМ $\mathbf{G}=\mathbf{G}^M=\mathbf{D}\times\mathbf{B}$ непосредственно следует из закона сохранения импульса СЭПВ (в том числе с использованием Лагранжиана и теоремы Нётер), является более предпочтительной, и, по-видимому, единственно правильной, поскольку ФА требует введения гипотетической силы Абрагама [8]. Она вводится для сред без дисперсии, когда ϵ и μ константы, но возникает проблема ее введения в диспергирующих средах, а также и проблема ее экспериментальной верификации. ФА соответствует свободному ЭМП в вакууме. Эксперименты по давлению квазифотонов среды на микрочастицы подтверждают правильность ФМ. В [1] есть ссылка на монографию Новожилова Ю.В. и Яппа Ю.А. (Электродинамика), где из балансного соотношения выводится именно ФМ. В работе [2] предпринята попытка определить плотность энергии СЭПВ как сумму энергии поля и вещества, и даже рассматриваются нелинейные среды. Следует отметить, что энергия СЭПВ не аддитивна: в общем случае следует учитывать энергию взаимодействия [5]. Автор [2] исходит из классической формы теоремы Пойнтинга, вводя ток проводимости и относя токи поляризации в

правую часть. Плотность потерь (скорость генерации тепла) он берет в виде $\mathbf{q} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}$. В общем случае плотность тока \mathbf{J} связана с электрическим полем \mathbf{E} интегральным соотношением (пример – интегральное обращение спектральной формулы Друде), а все эффекты, связанные с проводимостью (с движением свободных зарядов) следует включать в вектор индукции \mathbf{D} . Потери связаны не только с проводимостью, но и с запаздыванием поляризации во времени. Это, в частности, справедливо для дистиллированной воды, спиртов, газов и ряда других веществ с ориентационным механизмом поляризации, ферритов и т.п. Следует отметить, что цель работы [2] (отказ от формулы (1) и попытка построить плотности энергии в диспергирующих средах) весьма актуальна. Хотя в [2] и имеют место существенные неточности, ряд ее конечных результатов может соответствовать плотностям энергии сред для некоторых простых законов дисперсии. Основные неточности в [2] следующие. Это уже упоминавшаяся невозможность разделения энергии на энергию поля и вещества (при поляризации необходим учет вкладов дипольных и высших мультипольных моментов в энергию взаимодействия [5,16]). На квантовом уровне это соответствует учету матричных элементов соответствующих переходов. Используемые в [2] материальные уравнения не являются общими (см., например, [5]). В общем случае следует рассматривать движущуюся среду и соответ-

ствующие релятивистски ковариантные материальные уравнения. Используемые в [2] материальные уравнения разбиты на три типа: для тока проводимости, электрической поляризации и магнитной поляризации (намагниченности). Ошибочно утверждается, что все эти три материальные уравнения одновременно не выполняются: первое выполняется в плазме и металлах (собственно, металл и есть плазма, если пренебречь дисперсией кристаллической решетки), второе – в диэлектриках, а третье – в магнетиках. Уже это говорит о приближенности используемых материальных соотношений, т.к. такое разделение весьма условное.

Цель настоящей работы в том, чтобы показать, что вопрос о плотности энергии СЭПВ (виде ТЭИ) весьма непросто. Для его решения недостаточно привлекать балансные соотношения. Важна и форма материальных соотношений. В сильных полях эти соотношения нелинейные. Известны линейные материальные уравнения в форме Ландау-Лифшица и Казимира [17]. Их можно обобщить на произвольные бианизотропные нелинейные среды [5,18]. От формы материальных уравнений и от характера нестационарного процесса зависит вид плотности электромагнитной энергии СЭПВ (вид ТЭИ). Важен не вид ТЭИ, а именно законы сохранения [8]. Один из подходов к введению ТЭИ рассмотрен в [5].

Библиографический список

1. Краснов И.П. // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. В. 3. С. 89–96.
2. Краснов И.П. // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36. В. 16. С. 34–40.
3. Давидович М.В. // Письма в ЖТФ. 2006. Т.32. В. 22. С. 53–63.
4. Давидович М.В. // ЖТФ. 2010. Т. 80. В. 5. С. 40–44.
5. Давидович М.В. // УФН. 2010. Т. 180. № 6. С. 623–638.
6. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1976. 616 с.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1973. 504 с.
8. Гинзбург В.Л. // УФН. 1973. Т. 110. Вып. 2. С. 309–319.
9. Вайнштейн Л.А. Электромагнитные волны. М.: Радио и связь, 1988. 440 с.
10. Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1982. 624.
11. Ахиезер А.И., Ахиезер И.А. Электромагнетизм и электромагнитные волны. М: Высшая школа, 1985. 504 с.
12. Давидович М.В. // Вопросы прикладной физики. Межвузовский научный сборник. Саратов. Изд-во Саратовского ун-та. 2009. Вып. 16. С. 16–18.
13. Максвелл Дж. К. Трактат об электричестве и магнетизме. Т. II. М.: Наука, 1989. 437 с.
14. Джексон Дж. Классическая электродинамика. М.: Мир, 1965. 702 с.
15. Макаров В.П., Рухадзе А.А. // УФН. 2009. Т. 179. № 9. С. 995–1027.
16. Raab R.E., de Lange O.L. Multipole theory in electromagnetism. Classical, quantum, and symmetry aspects, with applications. Clarendon Press, Oxford, 2005. 235 p.
17. Виноградов А.П. // УФН. 2002. Т. 172. № 3. С. 363–370.
18. Davidovich M.V., Stephuk J.V. Homogenization of periodic metamaterials // Mathematical Methods in Electromagnetic Theory. Proceedings of 12-th International Conference (MMET'2008). Odessa, Ukraine. 2008. P. 527–529.

ON THE ELECTROMAGNETIC ENERGY OF FIELD AND MATTER

M.V. Davidovich

Saratov State University

The approaches to correct energy density definition for system an electromagnetic field–substance with the account of nonstationary and dispersion are considered. Several errors admitted in the works [1, 2], devoted to this question, are discussed.

АНАЛИЗ КОЭФФИЦИЕНТОВ КОЛЛЕКТИВНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ АМПЛИТУДНЫХ И АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ ФЛУКТУАЦИЙ МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ

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

Саратовский государственный университет

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор кафедры прикладной физики
Portland State University, USA

Минкин Леонид Моисеевич, профессор

Саратовское электроагрегатное производственное объединение

Шаповалов Степан Александрович, инженер

Анализируются особенности трансформации амплитудных и амплитудно-частотных спектров флуктуаций ансамбля генерирующих диодных модулей в шумы выходного сигнала многодиодного СВЧ генератора. Исследуются зависимости коэффициентов коллективной трансформации амплитудных и амплитудно-частотных шумов от частоты, числа диодов генератора, свойств его электродинамической системы, стратегии настройки.

В работе [1] показано, что для анализа физического механизма и особенностей трансформации низкочастотных и СВЧ шумов генерирующих диодных модулей в амплитудно-частотные флуктуации выходного сигнала многодиодного СВЧ генератора (сумматора мощности) целесообразно вводить в рассмотрение коэффициенты коллективной трансформации (ККТ) флуктуаций. В указанной работе введены десять коэффициентов, представляющих собой отношения собственных и взаимных спектров амплитудных и частотных флуктуаций сигналов соответственно многодиодного и однодиодного генераторов. Таким образом, по физическому смыслу они являются коэффициентами подавления или усиления шумов отдельных модулей в процессе их трансформации в шумы выходного сигнала многодиодного генератора. Это обстоятельство вызывает практический интерес к этим коэффициентам.

Выражения для ККТ шумов зависят, прежде всего, от стратегии настройки генератора в процессе увеличения числа диодов. В [1] рассмотрены два способа настройки. Первым (наиболее простым) способом является подстройка за счёт изменения связи суммирующего резонатора с нагрузкой. Второй способ – это настройка генератора путём изменения связи диодных модулей с суммирующим резонатором. Комбинированные способы настройки не рассматривались.

При втором способе настройки генератора все ККТ шумов одинаковы и равны $1/N$, где N – число диодов. При первом способе настройки все ККТ определяются достаточно сложными выражениями, зависящими не только от числа диодов, но и от круговой частоты отстройки Ω шума от несущей, числа диодов, прочности предельного цикла однодиодного генератора p_1 ; параметра фиксирующей способности контура $q_\Phi = X'_p/X'_1$, равно отношению фиксирующей способности суммирующего резонатора X'_p к внесённой фиксирующей способности диодного модуля X'_1 в однодиодном генераторе [2] (здесь X_p – реактивная часть импеданса суммирующего резонатора, X_1 – реактивная часть импеданса диодного модуля, пересчитанная в контур суммирующего резонатора; штрих над символами означа-

ет производную по частоте (фиксирующую способность). Сложность выражений для ККТ шумов при первом способе настройки генератора требует их специального анализа. Этот анализ облегчается тем, что выражения для ряда коэффициентов совпадают, и вся система ККТ распадается на четыре отличающихся друг от друга группы [1]. Каждая группа характеризуется единым значением ККТ. В данной работе проводится анализ коэффициентов двух групп, описывающих трансформацию амплитудных и амплитудно-частотных спектров флуктуаций.

Коэффициенты коллективной трансформации первой группы

Условно к первой группе отнесём совпадающие между собой коэффициенты, характеризующие соответственно трансформацию спектров амплитудных флуктуаций сверхвысокочастотного происхождения $G_{\alpha hf}(\Omega)$, спектров амплитудных флуктуаций низкочастотного (модуляционного) происхождения $G_{\alpha lf}(\Omega)$, мнимой части взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций низкочастотного происхождения $G_{i\alpha v lf}(\Omega)$, корреляционной составляющей $G_{r\alpha v hf}^{cor}(\Omega)$ действительной части взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций высокочастотного происхождения, которая зависит от корреляции квадратурных компонент собственных шумов диодов. Поскольку указанные коэффициенты одинаковы, в дальнейшем для краткости обозначим их единым символом $G_\alpha(\Omega)$, то есть в рамках данной работы

$G_\alpha(\Omega) = G_{\alpha hf}(\Omega) = G_{\alpha lf}(\Omega) = G_{i\alpha v lf}(\Omega) = G_{r\alpha v hf}^{cor}(\Omega)$.

Выражение для коэффициентов коллективной трансформации первой группы имеет вид [1]

$$G_\alpha(\Omega) = \frac{a^2}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (1)$$

где $a = N(q_\Phi + 1)/(q_\Phi + N)$ – параметр, определяемый числом диодов и фиксирующей способностью контура. Этот параметр характеризует изменение прочности предельного цикла генератора при

увеличении числа диодов. Его численное значение равно отношению прочности предельного цикла N -диодного генератора p_N и однодиодного p_1

Проанализируем частотную зависимость коэффициента $G_\alpha(\Omega)$. На рис. 1 приведены кривые зависимости $G_\alpha(\Omega/p_1)$ от приведённой (безразмерной) частоты Ω/p_1 для двухдиодного сумматора мощности при значениях параметра фиксирующей способности контура $q_\phi = 0,5; 1; 2; 4; 6; 10; \infty$.

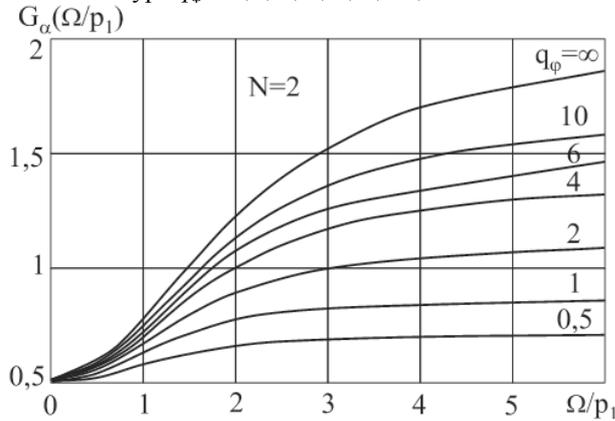


Рис. 1.

Как следует из (1), при $\Omega=0$ коэффициент $G_\alpha(\Omega/p_1)$ равен $1/N$. Поэтому все кривые начинаются в точке $G_\alpha(0)=0,5$. Приведённые кривые иллюстрируют монотонный рост $G_\alpha(\Omega/p_1)$ с увеличением приведённой частоты Ω/p_1 и параметра фиксирующей способности контура q_ϕ . Характерно, что для достаточно больших значений параметра q_ϕ и приведённой частоты отстройки Ω/p_1 кривые пересекают уровень $G_\alpha=1$, и G_α становится больше 1. Это означает, что при указанных условиях увеличение числа диодов (в данном случае до 2) приводит не к подавлению, а к увеличению уровня шумов. Так, при $q_\phi=2$ приведённая частота отстройки, при которой $G_\alpha=1$, равна 3. Частоту Ω_i , при которой $G_\alpha(\Omega/p_1)=1$, можно назвать частотой инверсии. Из кривых следует, что с ростом q_ϕ частота инверсии уменьшается и, следовательно, сужается полоса частот отстройки, в пределах которой наблюдается эффект подавление шума, вызываемый увеличением числа диодов генератора. Действительно, при увеличении q_ϕ до 4 единиц приведённая частота инверсии, при которой $G_\alpha=1$, уменьшается до 2. Отмеченное сужение полосы подавления является ограниченным. По мере роста q_ϕ процесс сокращения полосы замедляется и даже при $q_\phi \rightarrow \infty$ ширина полосы остаётся достаточно большой и равной 1,41.

На рис. 2,3 представлены аналогичные кривые соответственно для четырёхдиодного и восьмидиодного генераторов. Кривые указанных рисунков отвечают $q_\phi = 0,5; 2; 4; 6; 10; \infty$.

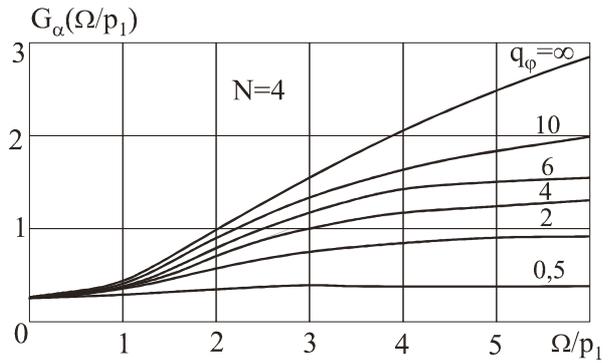


Рис. 2.

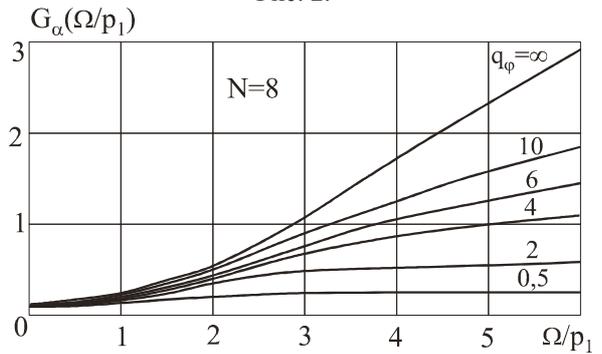


Рис. 3.

Кривые рис 2,3 показывают, что закономерности поведения коэффициента $G_\alpha(\Omega/p_1)$, отмеченные при $N=2$, наблюдаются и в генераторах с более высоким числом диодов: монотонный рост $G_\alpha(\Omega/p_1)$ по мере увеличения приведённой частоты Ω/p_1 и параметра фиксирующей способности контура q_ϕ ; существование частоты инверсии. Вместе с тем сопоставление рисунков 1,2,3 иллюстрирует изменения в поведении кривых $G_\alpha(\Omega/p_1)$, наблюдающиеся при увеличении числа диодов генератора. Прежде всего, они касаются величины частоты инверсии. С ростом числа диодов и прочих равных условиях приведённая частота инверсии возрастает.

Из выражения (1) следует, что частотную зависимость ККТ можно представить более компактно, т.е. в обобщённом виде, когда каждая точка кривых будет содержать информацию о ККТ при различных значениях q_ϕ и N . Для этого достаточно записать (1) в виде

$$\frac{G_\alpha\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_\alpha(0)} = a^2 \frac{1 + \left(\frac{\Omega}{p_1}\right)^2}{a^2 + \left(\frac{\Omega}{p_1}\right)^2}, \quad (2)$$

и рассчитать зависимость частотного параметра $G_\alpha(\Omega/p_1)/G_\alpha(0)$ от приведённой частоты Ω/p_1 при различных значениях параметра $a = N(q_\phi + 1)/(q_\phi + N)$. Кривые зависимости $G_\alpha(\Omega/p_1)/G_\alpha(0)$ от Ω/p_1 при $a = 1,5; 2; 3; 4$ показаны на рис.4.

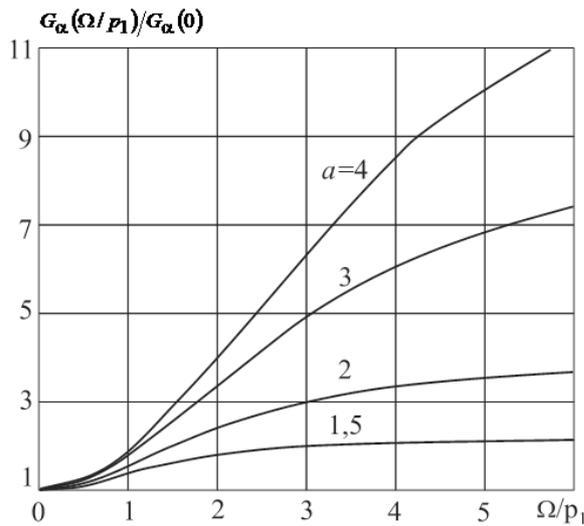


Рис. 4.

Используя данные кривых рис. 4, нетрудно получить кривые зависимости $G_\alpha(\Omega/p_1)$ от Ω/p_1 при любых N и q_ϕ , т.е. кривые, аналогичные изображённым на рис. 1.2.3. Действительно, задав N , нетрудно определить q_ϕ , соответствующее выбранной кривой. Ординаты точек этой кривой, умноженные на $G_\alpha(0)=1/N$, дадут значения $G_\alpha(\Omega/p_1)$, отвечающие указанным N и q_ϕ .

Кривые рис. 4 также иллюстрируют существование частот инверсии при достаточно больших q_ϕ . Поскольку вопрос о частоте инверсии представляет существенный практический интерес, есть смысл рассмотреть его подробнее. Для этого найдём частоту инверсии.

Используя (1) и равенство $G_\alpha(\Omega/p_1)=1$, нетрудно получить выражение для приведённой частоты инверсии в обобщённых переменных

$$\frac{\Omega_i}{p_1} = a \sqrt{\frac{N-1}{a^2-N}}$$

Подставляя в это соотношение $a = N(q_\phi + 1)/(q_\phi + N)$, находим зависимость приведённой частоты инверсии Ω_i/p_1 от q_ϕ и N , которая справедлива при $N \neq 1$,

$$\frac{\Omega_i}{p_1} = (q_\phi + 1) \sqrt{\frac{N}{q_\phi^2 - N}} \quad (3)$$

Из выражения (3) следует, что конечное значение приведённой частоты инверсии существует лишь при $q_\phi^2 > N$. При $q_\phi^2 \leq N$ инверсионный эффект отсутствует, и шум в той или иной мере подавляется на всех частотах отстройки. Кривые зависимости приведённой частоты инверсии от числа диодов генератора при значениях параметра фиксирующей способности контура q_ϕ , равных 2; 2,5; 3; 4; ∞ , приведены на рис. 5.

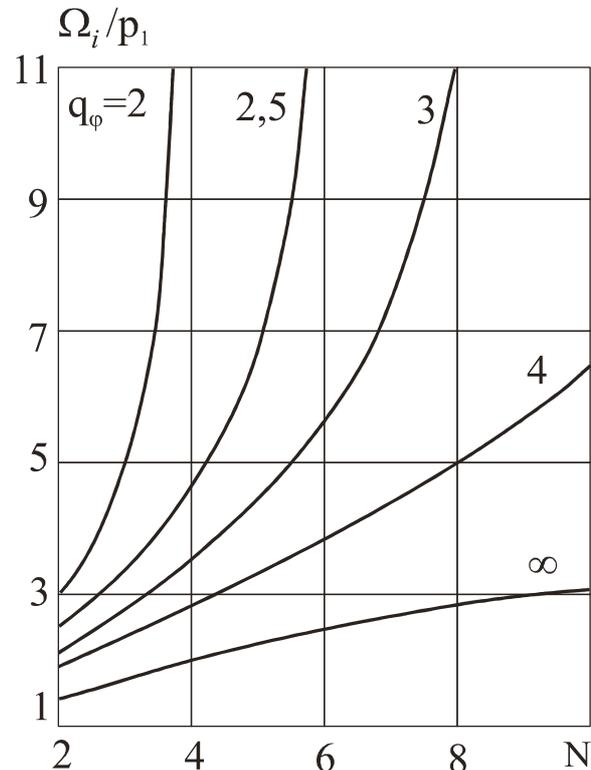


Рис. 5.

Кривые этого рисунка носят символический характер. Величина N может принимать лишь дискретный ряд значений. Поэтому физический смысл имеют только те ординаты кривых, которые отвечают целочисленным значениям N .

Коэффициенты коллективной трансформации второй группы

ККТ первой группы полностью описывают трансформацию амплитудных спектров флуктуаций сигнала многодиодного генератора. Частично они описывают и трансформацию взаимных амплитудно-частотных спектров. Однако описание трансформации взаимных спектров является неполным, так как ККТ первой группы характеризуют преобразование лишь отдельных компонент взаимного спектра флуктуаций. Трансформацию остальных компонент взаимных спектров, как показано в [1], описывают совпадающие по величине ККТ другой группы. Эту группу условно назовём второй.

Вторую группу совпадающих по величине ККТ образуют [1]: ККТ действительной части взаимного спектра амплитудно-частотных флуктуаций низкочастотного происхождения $G_{r\alpha v l f}(\Omega)$, ККТ независимой (от корреляции квадратурных компонент собственных шумов диодов) части взаимного амплитудно-частотного спектра флуктуаций высокочастотного происхождения $G_{\alpha v h f}^{ind}(\Omega)$, ККТ корреляционной (зависящей от корреляции квадратурных компонент собственных шумов диодов) составляющей мнимой части взаимного амплитудно-частотного спектра флуктуаций высокочастотного происхождения $G_{i\alpha v h f}^{cor}(\Omega)$. В эту же группу

совпадающих коэффициентов входит и ККТ корреляционной составляющей частотного спектра флуктуаций высокочастотного происхождения

$G_{vhf}^{cor}(\Omega)$. Так как указанные коэффициенты совпадают для краткости их можно обозначить одним символом $G_2(\Omega)$.

Для завершённости анализа трансформации взаимных амплитудно-частотных спектров, очевидно, необходимо исследовать частотную зависимость ККТ второй группы при различных a , N и q_ϕ . ККТ указанной группы имеют вид [1]

$$G_2(\Omega) = G_{r\alpha vlf}(\Omega) = G_{\alpha vhf}^{ind}(\Omega) = G_{i\alpha vhf}^{cor}(\Omega) = G_{vhf}^{cor}(\Omega) = \frac{a^3}{N} \frac{p_1^2 + \Omega^2}{p_1^2 a^2 + \Omega^2}, \quad (4)$$

Исследование частотной зависимости ККТ второй группы облегчается тем, что их частотный параметр совпадает с аналогичным параметром ККТ первой группы. Действительно, из (4) следует

$$\frac{G_2\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_2(0)} = \frac{G_{r\alpha vlf}\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_{r\alpha vlf}(0)} = \frac{G_{\alpha vhf}^{ind}\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_{\alpha vhf}^{ind}(0)} = \frac{G_{i\alpha vhf}^{cor}\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_{i\alpha vhf}^{cor}(0)} = \frac{G_{vhf}^{cor}\left(\frac{\Omega}{p_1}\right)}{G_{vhf}^{cor}(0)} = a^2 \frac{1 + \left(\frac{\Omega}{p_1}\right)^2}{a^2 + \left(\frac{\Omega}{p_1}\right)^2}. \quad (5)$$

Частотные параметры, стоящие в правых частях выражений (3) и (5), одинаковы. Это означает, что кривые рис. 4 в обобщённых переменных характеризуют частотные зависимости ККТ и первой и второй групп.

Сопоставление выражений (1) и (4) для ККТ соответственно первой и второй групп показывает, что их правые части отличаются множителем, равным параметру a . Следовательно, из кривых рис. 1,2,3 очень просто получить данные о частотной зависимости ККТ второй группы. В самом деле, любой кривой указанных рисунков соответствует одна и та же пара значений N и q_ϕ , а значит, одно и то же значение параметра

$a = N(q_\phi + 1)/(q_\phi + N)$. Значит для получения кривых зависимости ККТ второй группы от Ω/p_1 при любых N и q_ϕ достаточно для каждой кривой рис. 1,2,3 вычислить соответствующее ей значение параметра a и умножить ординаты точек этой кривой на величину a . Проиллюстрируем полученные частотные зависимости ККТ второй группы с помощью кривых рис. 1,2,3.

Элементарный расчёт показывает, что кривым рис. 1, построенным для $N=2$ и $q_\phi = 0,5; 1; 2; 4; 6; 10; \infty$ отвечают значения параметра a , равные соответственно 1,2; 1,33; 1,5; 1,66; 1,75; 1,83; 2. Таким

образом, после умножения ординат точек кривых рис. 1 на приведённые выше значения параметра a полученные кривые будут иллюстрировать зависимость ККТ второй группы от Ω/p_1 при $N=2$ и $q_\phi = 0,5; 1; 2; 4; 6; 10; \infty$.

Так, кривой рис.1, отвечающей $q_\phi = 0,5$, соответствует $a=1,2$. Умножение ординат точек этой кривой на $a=1,2$ даёт значения $G_2(\Omega/p_1)$ при различных Ω/p_1 . Результаты такой операции сведены в таблицу 1.

Таблица 1.

Ω/p_1	0	0,5	1	2	4	6
$G_2(\Omega/p_1)$	0,6	0,64	0,71	0,79	0,84	0,85

Из таблицы 1 видно, что с увеличением Ω/p_1 значение ККТ $G_2(\Omega/p_1)$ монотонно растёт, не превосходя уровень, равный единице. При любых Ω/p_1 ККТ $G_2(\Omega/p_1)$ является коэффициентом подавления шума.

Кривой рис.1, отвечающей $q_\phi = 1$, соответствует $a=1,33$. Умножение ординат точек этой кривой на $a=1,33$ приводит к значениям ККТ $G_2(\Omega/p_1)$, которые приведены в таблице 2.

Таблица 2.

Ω/p_1	0	0,5	1	2	4	6
$G_2(\Omega/p_1)$	0,66	0,73	0,85	1,02	1,12	1,15

Данные таблицы 2 показывают, что, как и в предыдущем случае, с увеличением Ω/p_1 значение ККТ $G_2(\Omega/p_1)$ монотонно растёт. Однако в отличие от предыдущего случая, начиная с определённой величины приведённой частоты отстройки, ККТ начинает превосходить 1. Это означает, что при достаточно больших значениях параметра q_ϕ для ККТ второй группы также существует частота инверсии, начиная с которой трансформация шумов приводит не к подавлению, а к увеличению их уровня.

Для кривой рис.1, отвечающей $q_\phi = 2$, величина a равна 1,5. Значения ККТ $G_2(\Omega/p_1)$, полученные умножением ординат точек указанной кривой на 1,5, приведены в таблице 3.

Таблица 3.

Ω/p_1	0	0,5	1	2	4	6
$G_2(\Omega/p_1)$	0,75	0,84	1,03	1,35	1,57	1,63

Данные таблицы 3 также свидетельствуют о существовании частоты инверсии. Сопоставление таблиц 2 и 3 показывает, что с увеличением параметра фиксирующей способности контура q_ϕ приведённая частота инверсии уменьшается.

Очевидно, что подобные данные можно получить и из кривых рис. 2,3. Действительно, простой расчёт показывает, что кривым рис. 2, построенным для $N=4$ и $q_\phi = 0,5; 2; 4; 6; 10; \infty$ отвечают значения параметра a , равные соответственно 1,33; 2; 2,5; 2,8; 3,14; 4. После умножения ординат точек кривых рис. 2 на приведённые выше значения параметра a полученные кривые будут иллюстрировать зависимость ККТ второй группы от Ω/p_1 при $N=4$ и $q_\phi = 0,5; 2; 4; 6; 10; \infty$.

Кривым рис. 3, построенным для $N=8$ и $q_\phi = 0,5; 2; 4; 6; 10; \infty$ отвечают значения параметра a , равные соответственно 1,41; 2,4; 3,33; 4; 4,88; 8. После умножения ординат точек кривых рис. 3 на приве-

дённые выше значения параметра a полученные кривые будут иллюстрировать зависимость ККТ второй группы от Ω/p_1 при $N=4$ и $q_\Phi = 0,5; 2; 4; 6; 10; \infty$.

Анализ выражения (4) и данных приведённых таблиц показывает, что для ККТ второй группы существует частота инверсии, однако её величина определяется выражением, отличным от (3). Приведённой частоты инверсии ККТ второй группы определяется равенством $G_2(\Omega/p_1)=1$. Приравнявая (4) при $\Omega=\Omega_i$ к 1, получаем выражение для частоты инверсии в обобщённых переменных

$$\frac{\Omega_i}{p_1} = a \sqrt{\frac{N-a}{a^3-N}}$$

Подставляя сюда $a = N(q_\Phi + 1)/(q_\Phi + N)$, получим

$$\frac{\Omega_i}{p_1} = N(q_\Phi + 1) \sqrt{\frac{1}{q_\Phi^3(N+1) + 3q_\Phi^2N - N^2}} \quad (6)$$

Из этого выражения следует, что частота инверсии существует лишь при

$$q_\Phi^3(N+1) + 3q_\Phi^2N > N^2 \quad (7)$$

Для иллюстрации полученного результата рассмотрим зависимость приведённой частоты инверсии от параметра q_Φ при $N=2$. В этом случае согласно (7) частота инверсии существует, начиная с $q_\Phi \cong 0,7$. Значения приведенной частоты инверсии для $N=2$ и различных q_Φ , рассчитанные на основе (6), приведены в таблице 4.

Таблица 4.

q_Φ	0,75	1	2	3	4	6
Ω/p_1	4,4	1,79	0,9	0,7	0,59	0,48

С ростом q_Φ приведённая частота инверсии Ω/p_1 монотонно уменьшается. В пределе при $q_\Phi \rightarrow \infty$, как следует из (6), $\Omega/p_1 \rightarrow 0$.

Рассмотренные особенности трансформации амплитудных и амплитудно-частотных спектров флуктуаций в многодиодных генераторах СВЧ необходимо учитывать при разработке генераторов и интерпретации экспериментальных данных.

Библиографический список

1. Шаповалов А.С., Кудряшов С.А., Шаповалов С.А. // Вопросы прикладной физики. Саратов, 2011. Вып. 17. С. 33-38.
2. Кудряшов С.А., Шаповалов А.С. // Электронная техника. Серия 1. СВЧ-техника. – 1997. Вып 2. С. 28-31.

ANALYSIS OF THE FACTORS OF COLLECTIVE TRANSFORMATION OF THE AMPLITUDE AND AMPLITUDE-FREQUENCY FLUCTUATION SPECTRUMS OF THE MULTIDIODE MICROWAVE GENERATOR

¹A.S.Shapovalov, ²L.M. Minkin, ³S.A. Shapovalov

¹Saratov State University,

²Portland State University, USA

³Saratov Electric Aggregate Production Firm

Peculiarities of transformation of the amplitude and amplitude-frequency fluctuation spectrums of the generating diode modules ensemble into the noise of output signal of the multidiode microwave generator are analysed. The dependence of the factors of collective transformation of the amplitude and amplitude-frequency noise from the frequency, number of diodes of the generator, properties of its electrodynamic system and the strategy of tuning are studied.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРИИ УРАЦИЛА,
ТИМИНА И ИХ ТИОЗАМЕЩЁННЫХ

Г.Н. Тен, В.И. Баранов

Саратовский государственный университет

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., профессор, E-mail: TenGN@info.sgu.ru

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

Баранов Виктор Иванович, д.ф.-м.н., профессор, академик РАЕН

Поступила в редакцию в апреле 2011 г.

Предложен полуэмпирический метод расчёта параметров равновесия и стабильности для оценки таутомерного состава прототропных таутомеров гетероциклических соединений. Показано, что для изолированных молекул урацила, тимина и их тиозамещённых наиболее стабильными являются канонические лактамные и тионные формы; для 2,4-дитиоурацила возможно таутомерное превращение в 2-меркапто-4-тио- и 2,4-димеркапто- молекулярные структуры.

Ключевые слова: прототропная таутомерия, таутомерное равновесие, урацил, тимин, тиозамещённые.

Многообразие проявлений таутомерии (в частности, таутомерное превращение в ходе химической реакции) столь велико, что делает задачу изучения этого явления, в том числе и разработку соответствующих методов анализа, весьма актуальной. Особый интерес представляет изучение таутомерного состава для биологически активных соединений. Так, исследование прототропной таутомерии оснований нуклеиновых кислот (ОНК) является важной задачей не только структурной химии и спектроскопии, но и биохимии ОНК, рассматривающей, в частности, спонтанное возникновение мутаций как результат существования ОНК в различных таутомерных формах [1].

Таутомерия ОНК исследуется различными экспериментальными и теоретическими методами, среди которых наиболее распространенными являются ИК спектроскопия и прямые квантовые расчеты.

Обычно при анализе, например, кето-енольного или лактам-лактимного таутомерного равновесия используют интенсивности характеристических полос поглощения валентных колебаний карбонильных и гидроксильных групп в ИК спектрах. Однако недостаточная информативность экспериментальных колебательных спектров, обусловленная наложением спектров нескольких таутомерных форм молекул разного количественного содержания, нередко приводит к неоднозначности определения таутомеров [2-9]. Возможный путь решения этой проблемы заключается в предварительной оценке таутомерного состава теми или иными методами.

Результаты квантово-химических расчетов (полуэмпирическими и неэмпирическими методами) существенно зависят от выбора базиса, причем а priori нельзя сказать, какой базис лучше. Например, расчёт полной энергии в приближении Хартри-Фока с использованием разных базисов показывает, что стабильность аминокислот (1), иминокислот (2) и аминокислот (3) таутомеров 5F-Cyt может как уменьшаться, так и возрастать в ряду 1-2-3 [10]. Кроме того, недостатки неэмпирических расчетов во многом обусловлены грубостью используемой модели – гармонической или, в достаточно редких случаях, ангармонической, но «одноминимумной» для каждой тау-

томерной формы молекулы. Для таутомерных превращений весьма типична малая величина потенциального барьера, поэтому при определении уровней энергии таутомерной системы (и расчета констант химического равновесия) нужно сразу решать ангармоническую задачу в многоминимумном потенциале. Такой расчет неэмпирическими методами весьма трудоемок; в отдельных случаях проводится лишь уточнение модели в виде одномерного движения в двухминимумном потенциале.

В связи с этим возникает задача поиска альтернативных подходов, не только исключающих трудоемкие неэмпирические расчеты для сложных моделей, но и позволяющих получать конкретные оценки таутомерного состава ОНК на основе эмпирических или полуэмпирических параметров и формул.

Ранее работоспособность предложенного полуэмпирического метода была апробирована на примере аденина, гуанина и цитозина [11]. Отметим, что результаты определения таутомерного состава рассматриваемых молекулярных структур соответствуют экспериментальным данным, полученным, в частности, на основе интерпретации колебательных спектров. В данной работе анализируется таутомерный состав Ura, тимина (Thu) и их тиозамещённых для лактам-лактимных и тион-тиольных таутомерных превращений.

Параметрический метод анализа таутомерии ОНК

Известно, что одной из причин таутомерного превращения являются структурные особенности и состав молекулярных фрагментов, где в случае прототропной таутомерии наблюдается перенос протона. Для учета этого фактора в работе [12] была предложена эмпирическая формула, в которой отношение количеств двух таутомерных форм представляется как функция порядков разрывающихся и образующихся связей в процессе переноса протона. Следует подчеркнуть, что данное выражение не получено строго квантово-химически, но учитывает физические особенности процесса; оно носит эмпирический характер и его применимость (или неприменимость) может быть определена только путем расчета реальных молекулярных систем и сравнения результатов с экспериментальными данными.

Применение этого способа оценки таутомерного равновесия для анализа межмолекулярного механизма прототропной кето-енольной и имин-енаминной таутомерии широкого круга соединений, в том числе диазолов, пиридинов и нуклеиновых оснований, дало хорошие результаты [12]. В частности, на основании проведённых расчетов показано, что межмолекулярный коллективный механизм (димерный, тримерный, тетрамерный или олигомерный) более вероятен, чем внутримолекулярный перенос протона. Это вполне коррелирует с результатами современных исследований, показывающих, что в целом ряде случаев внутримолекулярный механизм переноса протона невыгоден как геометрически, так и энергетически [12].

В развитие идей работы [12] для оценки таутомерного состава ОНК в изолированном состоянии с учётом внутримолекулярного переноса протона нами предлагается использовать параметр (назовем его «параметр равновесия»), определяемый как отношение сумм величин, характеризующих степень устойчивости связей, образуемых подвижным протоном и центрами его присоединения:

$$R_{AB} = \frac{\sum_{i \in B} \alpha_i}{\sum_{j \in A} \alpha_j} \quad (1)$$

Суммирование в выражении (1) проводится только по связям i и j таутомеров A и B , образующих структурный фрагмент, в котором происходит перенос протона. В качестве характеристик устойчивости связей предлагается использовать не порядки связей, как это делалось в работе [12], а величины

$$\alpha_i = b_i / E_i \quad (2)$$

где b_i и E_i – индекс и энергия i -й связи. Кроме того, для связи X-H с «мигрирующим» при таутомерном превращении протоном учитывается электроотрицательность атома X:

$$\alpha_{X-H} = X_X b_{X-H} / E_{X-H} \quad (3)$$

Под индексом i -й связи (между атомами Y и Z) понимается величина $b_i = \sum_{\mu \in Y} \sum_{\nu \in Z} P_{\mu\nu}^2$, где $P_{\mu\nu}$ –

элементы матрицы плотности. Они инвариантны при поворотах систем координат, характеризуют прочность химической связи и вычисляются квантово-химическими методами. Могут быть построены полуэмпирические корреляции между длинами и индексами связей, что позволяет оценивать величины индексов связей по экспериментальным значениям длин связей анализируемых молекул [13].

Учитывая определение параметра равновесия R_{AB} , можно ожидать, что оценка его величины даст информацию о направлении реакции таутомерного превращения $A \leftrightarrow B$: при $R_{AB} > 1$ процесс идет в направлении $A \rightarrow B$, а при $R_{AB} < 1$ – $A \leftarrow B$.

Второй важной характеристикой таутомерного состава является его стабильность, определяемая по значениям полных энергий молекулярных структур. По аналогии с параметром равновесия (1) введем для оценки стабильности системы $A \leftrightarrow B$ относительно «исходного» таутомера A (или «конечного» B) параметр (назовем его «параметр стабильности») S_{AB} :

$$S_{AB} = \frac{\sum_{i \in B} \alpha_i - \alpha_{X-H}^A}{\sum_{j \in A} \alpha_j} = R_{AB} - \frac{\alpha_{X-H}^A}{\sum_{j \in A} \alpha_j} \quad (4)$$

Чем меньше величина S_{AB} , тем более стабилизировано состояние системы $A \leftrightarrow B$. Параметр стабильности (4) может оказаться полезным при оценке относительной стабильности состояний $A \leftrightarrow B$, $A \leftrightarrow C$, $A \leftrightarrow D$ и т.д. в ряду возможных таутомерных превращений.

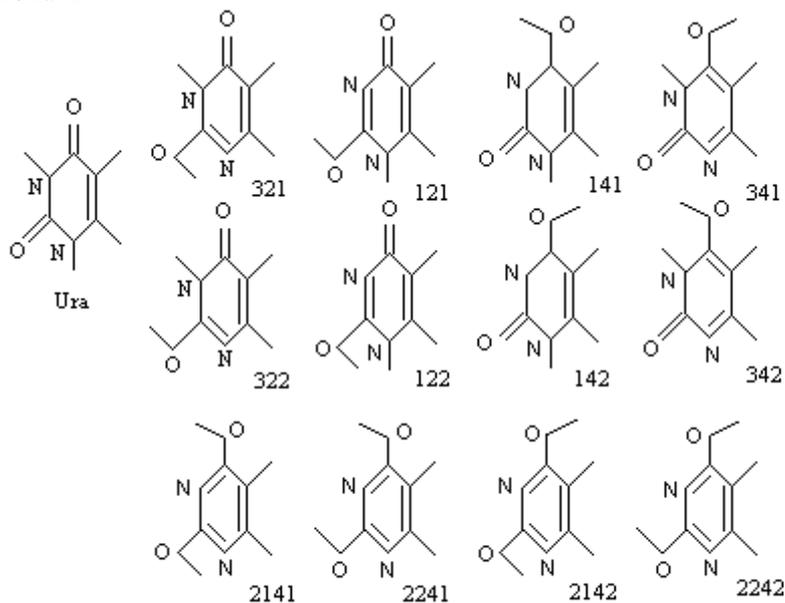


Рис. 1. Молекулярные структуры Ura и его таутомерных форм

Результаты и обсуждение

Для каждой рассматриваемой молекулярной структуры Ura, Thy и их тиозамещённых возможно образование аналогичных 12 таутомерных форм. В качестве примера на рис. 1 приведены таутомеры Ura, которые теоретически могут быть образованы из канонической формы Ura по внутримолекулярному механизму. Значения вычисленных параметров R_{AB} , S_{AB} приведены в табл. 1–4.

Таблица 1. Вычисленные значения параметров таутомерного равновесия (R_{AB}) и стабильности (S_{AB}) для таутомерных форм Ura

I	R_{AB}	S_{AB}
Ura→321	0.80	0.38
Ura→121	0.97	0.65
Ura→141	0.92	0.59
Ura→2141	0.95	0.63
Ura→2241	0.96	0.63
Ura→2242	0.96	0.63
Ura→122	0.97	0.66
Ura→2142	0.96	0.63
Ura→342	0.99	0.81
Ura→322	0.83	0.42
Ura→142	0.96	0.64
Ura→341	0.98	0.81

Таблица 2. Вычисленные значения параметров таутомерного равновесия (R_{AB}) и стабильности (S_{AB}) для таутомерных форм Thy

Таутомер	R_{AB}	S_{AB}
321	0.96	0.64
121	0.97	0.66
2141	0.98	0.67
141	0.99	0.69
341	0.98	0.80

Таблица 3. Вычисленные значения параметров таутомерного равновесия (R_{AB}) и стабильности (S_{AB}) для некоторых таутомеров тиозамещённых Ura

Переход	R_{AB}	S_{AB}
2S-Ura→321	0.65	0.18
2S-Ura→121	0.98	0.71
2S-Ura→141	0.97	0.66
2S-Ura→2141	0.79	0.54
2S-Ura→342	0.97	0.81
4S-Ura→321	0.81	0.39
4S-Ura→121	0.99	0.65
322→121	1.01	0.74
4S-Ura→141	0.98	0.71
4S-Ura→2141	0.95	0.65
4S-Ura→342	0.99	0.84
2S,4S-Ura→321	0.63	0.16
121→321	0.99	0.76
2S,4S-Ura→121	1.01	0.73

2S,4S-Ura→141	0.98	0.71
121→141	0.95	0.82
2S,4S-Ura→2141	0.96	0.67
121→2141	1.09	0.96
2S,4S-Ura→342	0.99	0.83

Таблица 4. Вычисленные значения параметров таутомерного равновесия (R_{AB}) и стабильности (S_{AB}) для таутомеров 2S,4S-Thy

Таутомер	R_{AB}	S_{AB}
321	0.77	0.38
322	0.81	0.43
2141	0.87	0.66
2241	0.87	0.66
141	0.96	0.68
2142	0.87	0.66
2242	0.87	0.66
142	0.97	0.68
121	0.98	0.70
342	0.99	0.83
341	0.99	0.84

Урацил. Сравнение параметров S_{AB} при образовании таутомеров из Ura по внутримолекулярному механизму даёт следующую последовательность убывания стабильности: **321**, 322, **141**, **2141**, 2241, 2142, 2242, 142, **121**, 122, 341, 342 (сравнение осуществляется для ряда $A \leftrightarrow B$, $A \leftrightarrow C$, $A \leftrightarrow D$ и т.д., где таутомером A является Ura). Расчёты относительной стабильности различными неэмпирическими методами дают следующие последовательности изомеров по убыванию их относительной стабильности: **321**, **141**, **2141**, 2241, 2142, 2242, 142, **121**, 341, 342, 122 (B-3LYP/6+G(d,p)); **321**, **141**, **2141** (B-LYP/6-31G(d,p)//MP2/6-31G(d,p)); **321**, **141** (MP2/DZP+0.91ZPVE); 321, 2141, 141 (MP2/6-31G(d,p)//HF/6-31G(d,p)); **321**, **141**, **2141**, 2241, **121**, 341, 342 (B3LYP/6-31+G(d)) (сравнение проводилось по полной энергии изомеров по отношению к Ura) [14]. Характерный, независимый от используемого базиса результат заключается в уменьшении стабильности для изомеров в ряду **321**, **141**, **2141**, **121**. Чтобы подчеркнуть эту характерную закономерность, номера соответствующих изомеров выделены в последовательностях жирным шрифтом. Этот результат в точности совпадает с полученным на основе анализа параметров стабильности S_{AB} .

Таким образом, предложенный эмпирический параметр S_{AB} позволяет проводить оценку относительной стабильности для широкого круга возможных изомерных превращений, отвечающих внутримолекулярному механизму преобразований, рассматривая при этом только те молекулярные фрагменты, в которых происходит перенос протона, и на этой основе ранжировать изомеры по степени убывания/возрастания их стабильности для возможных таутомерных превращений.

Расчёт параметров равновесия R_{AB} для Ura (см. табл. 1) показывает, что при внутримолекулярном механизме переноса протона в изолированном состоянии ни один из возможных 12-ти таутомеров Ura

не образуется (во всех случаях $R_{AB} < 1$), т.е. явление таутомерии не наблюдается. Это подтверждается многими экспериментальными результатами, в частности спектральными (ИК и КР) исследованиями [15,16], согласно которым Ura в изолирующей матрице существует только в лактамной форме. С другой стороны, применение более чувствительных к определению таутомерного состава электронных спектров флуоресценции, что связано с возбуждением электронов неподелённой пары гетероциклических атомов азота пиримидинового кольца лактимных таутомерных форм, позволило обнаружить в спектре Ura две прогрессии с хорошо разрешенной колебательной структурой. Было высказано предположение, что вторая прогрессия принадлежит 2-гидрокси, 4-оксо таутомерной форме Ura (таутомер 321), что в дальнейшем было подтверждено анализом колебательных спектров основного электронного состояния всех 12 таутомеров [17].

Учитывая, что влияние среды, в частности оптическое возбуждение, может привести к увеличению R_{AB} практически для всех 12 таутомеров Ura (и Thy), данный расчёт также подтверждает, что вторая прогрессия в спектре флуоресценции, как наиболее вероятный случай с точки зрения расчёта параметров стабильности S_{AB} , принадлежит таутомеру 321. В то же время, расчёт не отрицает образование при электронном возбуждении других таутомерных форм, но, поскольку их стабильность в $\sim 1.5-2$ раза меньше стабильности таутомера 321, то для их обнаружения потребуется более сложная экспериментальная техника.

Тимин. Параметры равновесия R_{AB} и стабильности S_{AB} были вычислены для пяти таутомеров с учётом их внутримолекулярного механизма образования из Thy (табл. 2). Результаты показали, что как и в случае Ura лактамная форма Thy является наиболее стабильной. Это полностью согласуется с экспериментом [18-20]. По сравнению с Ura в ряду убывания относительной стабильности Thy, отличающегося от Ura присоединением метильной группы, таутомеры 141 и 121 меняются местами: 321, 121, 2141, 141, 341. Это может быть обусловлено, как отмечают авторы работы [21], стерическим эффектом, связанным с заменой C-H группы на метильную. Квантово-химический расчёт таутомерных форм Thy методом HF+6-31G* [21] показал, что по значениям полных энергий таутомеров Thy их относительная стабильность (по сравнению с Thy) убывает в том же порядке, что и получено из оценок по параметру стабильности S_{AB} : 321, 121, 2141, 141, 341.

Таким образом, выводы, полученные на основе вычисленных значений S_{AB} пяти рассматриваемых таутомеров Thy, полностью идентичны как данным эксперимента, так и результатам неэмпирических квантово-химических расчётов, что является ещё одним, в дополнение к результатам, полученным для Ura, обоснованием возможности использования предлагаемых параметров R_{AB} , S_{AB} для анализа таутомерного состава ОНК.

Тиозамещённые урацила. Для ряда таутомерных форм тиозамещённых Ura (321, 121, 141, 2141 и 342)

были вычислены параметры тион-тиольного таутомерного равновесия и стабильности. Полученные результаты приведены в табл. 3.

Для 2S-Ura при внутримолекулярном механизме таутомерного превращения имеем следующую последовательность таутомеров по убыванию их относительной стабильности – 321, 2141, 141, 121 и 342. Для 4S-Ura расчёт S_{AB} показывает, что относительная стабильность убывает в ряду 321, 121, 2141, 141, 342. Учитывая возможность изомерного перехода 322→121, например, вследствие взаимодействия с окружающей средой, получим следующую, совпадающую с результатами для 2S-Ura, последовательность: 321, 2141, 141, 121, 342 (табл. 3). Этот вывод согласуется с экспериментальными данными, полученными в водном растворе [22].

В случае 2S,4S-Ura последовательность убывания относительной стабильности имеет аналогичный вид: 321, 2141, 141, 121, 342. Однако, в отличие от 2S-Ura и 4S-Ura, при переходе 2S,4S-Ura→121 вычисленное значение параметра равновесия $R_{AB} > 1$, поэтому представляет интерес, в какую молекулярную структуру может превращаться таутомер 121. Для этого были рассчитаны S_{AB} и R_{AB} для таутомерных превращений 121→312, 121→141 и 121→2141 по внутримолекулярному механизму переноса протона. Результаты расчётов приведены в табл. 3 и они показывают, что возможно таутомерное превращение 121→2141 со смещением равновесия в сторону 2141.

Таким образом, для 2S- и 4S-замещённых Ura наиболее стабильными являются оксотионные формы и далее в ряду по относительной стабильности следуют таутомеры 321, 2141, 141, 121 и 342, а для дитио-Ura возможно внутримолекулярное превращение 2S,4S-Ura→121→2141, т.е. одновременное существование трёх молекулярных структур.

2S,4S-тимин. Оценки, полученные на основе параметров R_{AB} , S_{AB} , вычисленных при образовании таутомеров из 2S,4S-Thy (см. табл. 4), показывают, что наиболее стабильной является дитионная форма 2S,4S-Thy, а относительная стабильность таутомеров убывает в ряду 321, 322, 2141, 2241, 2142, 2242, 141, 142, 121, 342, 341. Квантово-химический расчёт методом B3LYP/6-31+G* даёт следующую последовательность убывания относительной стабильности таутомеров 2S,4S-Thy [23]: 321>322>2141≈2241>141>2142≈2242>142>121>342≈341, которая совпадает с полученной в нашем расчёте, включая и близкие значения стабильности для таутомеров 2141≈2241, 2142≈2242 и 342≈341. Единственное отличие заключается в том, что таутомер 141 оказывается менее стабильным, чем таутомеры 2241 и 2242, что может быть связано с недостатком параметризации метода CNDO, не учитывающей вклад d-орбиталей атомов серы.

Заключение

Для анализа таутомерного состава ОНК предложен полуэмпирический параметрический метод, основанный на расчете параметров равновесия R_{AB} и стабильности S_{AB} с учетом внутримолекулярного механизма переноса протона. Применение данного под-

хода к оценке относительной стабильности таутомеров Ura и Thy и их тиозамещенных показало хорошее согласие полученных результатов с экспериментальными данными и результатами расчетов неэмпирическими квантово-химическими методами, что свидетельствует о работоспособности предложенного параметрического метода. Высокую эффективность метода подтвердили также результаты анализа лактам-лактимной, amino-иминной и $N_9H \leftrightarrow N_7H$ таутомерии Ade, Gua, Pur и Cyt для изолированных систем (эти данные представлены в отдельной публикации [11]).

Параметр равновесия дает информацию о направлении реакции таутомерного превращения $A \leftrightarrow B$ ($A \rightarrow B$ при $R_{AB} > 1$ и $A \leftarrow B$ при $R_{AB} < 1$), а пара-

метр стабильности позволяет оценить относительную стабильность состояний $A \leftrightarrow B$, $A \leftrightarrow C$, $A \leftrightarrow D$ и т.д. в ряду возможных таутомерных превращений.

Расчёты параметров R_{AB} для изолированных состояний ОНК и их тиозамещённых показали, что наиболее стабильными являются лактамные и тионные формы. Данный метод позволяет определить преимущественный путь переноса протона для внутримолекулярной таутомерии. Например, для 2S,4S-Ura возможно попарное внутримолекулярное таутомерное превращение $2,4S-Ura \rightarrow 121 \rightarrow 2141$ (вычисленные значения $R_{AB} > 1$), т.е. одновременное существование трёх молекулярных структур.

Библиографический список

1. Löwdin P. // Adv. Quant. Chem. 1976. V.2. P. 213.
2. Nowak M.J., Lapinski L., Fulara J. // Spectrochim. Acta. A. 1989. V.45. P. 229-242.
3. Радченко Е.Д., Плохотниченко А.М., Иванов А.Ю. и др. // Биофизика. 1986. Т. 31. С. 373-381.
4. Szczepaniak K., Szczesniak M.M., Kwiatkowski J.S., et. al. // J. Am. Chem. Soc. 1988. V.110. P.8319-8330.
5. Wioriewicz-Kuczera J., Karplus M. // J. Amer. Chem. Soc. 1990. V.112. P.5324-5340.
6. Stepanian S.G., Sheina G.G., Radchenko E.D., et. al. // J. Mol. Struct. 1985. V.131. P.333-346.
7. Nowak M.J., Lapinski L., Kwiatkowski J.S., et. al. // J. Phys. Chem. 1996. V.100. P. 3527-3524.
8. Nowak M.J., Rostkowska H., Lapinski L., et. al. // J. Phys. Chem. 1994. V.98. P.2813-2825.
9. Aamouche A., Ghomi M., Grajcar L., et. al. // J. Phys. Chem. 1997. V.101A. P.10063-10074.
10. Jaworski A., Szczesniak M., Szczepaniak K., et. al. // J. Molec. Struct. 1990. V.223. P.63-92.
11. Тен Г.Н., Баранов В.И. // Биофизика. 2009. Т. 54. Вып. 5. С.813-819.
12. Кереселидзе Дж. А., Заркуа Т.Ш., Кикалишвили Т.Дж. и др. // Успехи химии. 2002. Т. 71. С. 1120-1131.
13. Баранов В.И., Савин Ф.А., Грибов Л.А. Программы расчёта электронно-колебательных спектров многоатомных молекул. М.: Наука, 1983.
14. Kryachko S., Nguyen M.T., Zeegers-Huyskens T. // J. Phys. Chem. 2001. V.105A. P.1288-1295.
15. Fujii M., Tamura T., Mikami N., et. al. // Chem. Phys. Lett. 1986. V.126. P.583-587.
16. Tsuchiya Y., Tamura T., Fujii M., et. al. // J. Phys. Chem. 1988. V.92. P.1760-1765.
17. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Щербаков Р.С. и др. // Журнал структ. химии. 2010. Т. 50. № 1. С. 38-45.
18. Nowak M.J. // J. Mol. Struct. 1989. V. 193. P.35-49.
19. Радченко Е.Д., Плохотниченко А.М., Шеина Г.Г. и др. // Биофизика. 1983. Т.28. С. 923-927.
20. Szczepaniak K., Szczesniak M.M., Person W.B. // J. Phys.Chem. 2000. V.104A. P. 3852-3863.
21. Morsy M.A., Al-Somal A.M., Suwaiyan A. // J. Phys. Chem. 1999. V.103B. P.11205-11210.
22. Рубин Ю.В. Физические свойства биологически активных аналогов компонентов нуклеиновых кислот. Автореф. на соиск. ... д. ф.-м. н., Харьков, 2002.
23. Zhang H., Xue Y., Xu K.-L., et. al. // Acta chimica sinica. 2003. V.61. P.1926-1929.

INVESTIGATION OF TAUTOMERISM OF URACIL, THYMINE AND ITS THIOSUBSTITUTED

G.N. Ten* , V.I. Baranov**

* Saratov State University

**V.I. Vernadsky Institute for Geochemistry and Analytical Chemistry, Moscow, Russia

Proposed semi-empirical method for calculating the parameters of equilibrium and stability for the evaluation of the tautomeric prototropic tautomers of heterocyclic compounds. It is shown that for isolated molecules, uracil, thymine and their thiosubstituted most stable are the canonical lactam and thionyl form; for 2,4-dithiouracil possible tautomeric transformations of 2-mercapto-4-thio- and 2,4-dimercapto-molecular structures.

Keywords: prototropic tautomerism, the tautomeric equilibrium, uracil, thymine, thiosubstituted.

СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ПАР В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

Яковлева А.А., Тен Г.Н.

Саратовский государственный университет

Яковлева Антонина Алексеевна, аспирант физического факультета
Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., профессор, E-mail: TenGN@info.sgu.ru

Проведен расчёт структуры и колебательных спектров комплементарных пар аденин-урацил, гуанин-цитозин в приближении V3LYP/6-311++G(d,p) в водном растворе. Показано влияние водородных связей на частоты и интенсивности полос поглощения и линий КР.

Введение. Одним из наиболее совершенных инструментов исследования свойств водородной связи является колебательная спектроскопия. Влияние водородной связи приводит к изменению положения частот и интенсивности колебаний, что и является главным носителем информации о влиянии водородной связи на изменение структуры и свойств молекулы. Для этого обычно сравнивают спектры изолированной молекулы и молекулы, находящейся в жидкой или твёрдой фазе, или спектра изолированного димера со спектрами изолированных молекул, составляющих этот димер и т.д.

Существует большое число теоретических и экспериментальных работ, рассматривающих различные аспекты водородной связи в ДНК, например, роль водородной связи в образовании пространственной структуры и таутомерных превращениях, влияние водородных связей на физико-химические свойства и стабильность водородно-связанных пар и т.д. [1–9].

Для комплементарных пар изучение водородной связи проводилось по следующим направлениям: рассматривалось изменение ИК и КР спектров комплементарных пар, находящихся в разных фазовых состояниях и разных температурных интервалах; сравнивались спектры изолированных оснований нуклеиновых кислот со спектрами комплементарных пар; проводилось сравнение спектров пар аденин-тимин, гуанин-цитозин со спектрами соответствующих нуклеотидов и нуклеозидов [10–13]. Кроме того, было определено влияние водородных связей на колебательные спектры комплементарных пар по сравнению с колебательными спектрами ОНК в конденсированных средах в зависимости от их числа и структурного расположения в паре, а также исследовать характер смещений ОНК как целых молекулярных образований в комплементарных парах друг относительно друга [14].

Цель данной работы – определить влияние водного раствора на структуру и колебательные спектры комплементарных пар. Для этого было выполнено сравнение колебательных спектров комплементарных пар, ранее изученных для изолированного состояния [15,16], со спектрами пар в водном растворе, расчёт которых был выполнен методом DFT в приближении V3LYP/6-311++G(d,p) с использованием программного продукта Gaussian-09 [17]. Анализ эффективного влияния MMB проводился для модели реактивного поля SCRF (вода, диэлектрическая проницаемость $\epsilon=78.39$).

Аденин-Урацил. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade-Ura с нумерацией атомов дана на рис. 1. Результаты расчёта структуры и колебаний приведены в табл. 1, 2.

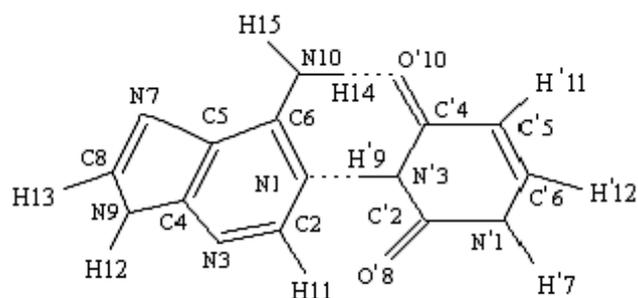


Рис. 1. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Ade-Ura с нумерацией атомов

Для рассмотрения влияния растворителя на структуру комплементарной пары были вычислены геометрические параметры (длины связей и углы) для изолированных Ade, Ura, пары Ade-Ura и аналогичных молекулярных структур в водном растворе. Эти изменения очень малы (максимальные изменения длин связей составляют 0.3%, а углов – 0.5%), но они позволяют определить характерные особенности структурных изменений комплементарной пары в естественной для ОНК водной среде (табл. 1).

Анализ изменений геометрических параметров изолированных молекул Ade, Ura по сравнению с соответствующими длинами связей и валентными углами в водном растворе показал, что эти характер этих изменений сохраняется в комплементарной паре Ade-Ura и имеет следующие особенности: 1) пиримидиновое кольцо Ura сжимается и вытягивается в сторону образования водородной связи; в Ade напротив, наблюдается увеличение длин связей пуринового кольца (за исключением связей, прилегающих к атому N₉); 2) длины всех внешних связей в молекулах Ura и Ade увеличиваются, кроме связи N'₃H'₉, длина которой уменьшается при образовании комплементарной пары.

Водный раствор увеличивает длины водородных связей N₁₀H₁₄...O'₁₀ и N₁...H'₉N'₃ по сравнению с изолированным состоянием на 0.013 и 0.085 Å соответственно.

Таблица 1. Вычисленные длины связей (Å) и валентные углы (град) Ade, Ura и комплементарной пары Ade-Ura в изолированном состоянии и в водном растворе (модель SCRF)

Связь, угол	Ura		Ade – Ura		Связь, Угол	Ade		Ade – Ura	
	изолир.	SCRF	изолир.	SCRF		изолир.	SCRF	изолир.	SCRF
N ₁ C ₂	1.394	1.379	1.397	1.381	N ₁ C ₂	1.341	1.342	1.336	1.343
N ₁ C ₆	1.375	1.369	1.371	1.367	N ₁ C ₆	1.342	1.351	1.351	1.356
N ₁ H ₇	1.009	1.028	1.009	1.028	C ₂ N ₃	1.334	1.334	1.330	1.331
C ₂ N ₃	1.383	1.379	1.379	1.378	C ₂ H ₁₁	1.086	1.089	1.086	1.088
C ₂ O ₈	1.212	1.225	1.215	1.226	N ₃ C ₄	1.336	1.343	1.339	1.344
N ₃ C ₄	1.413	1.400	1.394	1.393	C ₄ C ₅	1.397	1.397	1.395	1.397
N ₃ H ₉	1.013	1.030	1.046	1.039	C ₄ N ₉	1.377	1.372	1.376	1.371
C ₄ C ₅	1.458	1.446	1.455	1.444	C ₅ C ₆	1.409	1.412	1.412	1.413
C ₄ O ₁₀	1.215	1.231	1.228	1.239	C ₅ N ₇	1.384	1.385	1.383	1.385
C ₅ C ₆	1.347	1.353	1.349	1.353	C ₆ N ₁₀	1.353	1.346	1.342	1.342
C ₅ H ₁₁	1.079	1.083	1.079	1.083	N ₇ C ₈	1.308	1.315	1.308	1.315
C ₆ H ₁₂	1.083	1.087	1.083	1.087	C ₈ N ₉	1.380	1.371	1.380	1.371
C ₂ N ₁ C ₆	123.6	123.2	123.4	123.2	C ₈ H ₁₃	1.080	1.085	1.080	1.085
C ₂ N ₁ H ₇	115.2	116.6	115.2	116.6	N ₉ H ₁₂	1.008	1.028	1.009	1.027
C ₆ N ₁ H ₇	121.2	120.2	121.4	120.2	N ₁₀ H ₁₄	1.006	1.014	1.020	1.020
N ₁ C ₂ N ₃	112.9	113.9	113.7	114.3	N ₁₀ H ₁₅	1.006	1.016	1.007	1.014
N ₁ C ₂ O ₈	122.8	123.0	122.0	122.7	N _{1...H} ₉	–	–	1.836	1.921
N ₃ C ₂ O ₈	124.3	123.1	124.4	123.0	H _{14...O} ₁₀	–	–	1.927	1.940
C ₂ N ₃ C ₄	128.1	127.2	126.9	126.4	C ₂ N ₁ C ₆	118.7	119.0	119.6	119.4
C ₂ N ₃ H ₉	115.6	115.8	116.1	116.5	N ₁ C ₂ N ₃	128.5	128.4	128.1	128.2
C ₄ N ₃ H ₉	116.3	117.0	117.0	117.1	N ₁ C ₂ H ₁₁	115.4	115.4	115.0	123.5
N ₃ C ₄ C ₅	113.5	114.4	115.0	115.2	N ₃ C ₂ H ₁₁	116.1	116.2	116.9	116.4
N ₃ C ₄ O ₁₀	120.3	119.8	120.5	119.8	C ₂ N ₃ C ₄	111.5	111.8	111.5	111.8
C ₅ C ₄ O ₁₀	126.2	125.8	124.4	125.0	N ₃ C ₄ C ₅	126.7	126.2	126.9	126.3
C ₄ C ₅ C ₆	119.9	119.5	119.4	119.2	N ₃ C ₄ N ₉	128.8	128.8	128.5	128.6
C ₄ C ₅ H ₁₁	118.2	119.0	118.5	119.2	C ₅ C ₄ N ₉	104.5	105.0	104.6	105.0
C ₆ C ₅ H ₁₁	121.9	121.5	122.1	121.6	C ₄ C ₅ C ₆	116.0	116.6	116.5	116.8
N ₁ C ₆ C ₅	121.9	121.9	121.6	121.7	C ₄ C ₅ N ₇	111.3	110.7	111.3	110.7
N ₁ C ₆ H ₁₂	115.4	115.2	115.6	115.3	C ₆ C ₅ N ₇	132.7	132.7	132.2	132.5
C ₅ C ₆ H ₁₂	122.7	122.9	122.8	123.0	N ₁ C ₆ C ₅	118.7	118.1	117.4	117.5
					N ₁ C ₆ N ₁₀	119.0	118.9	119.7	119.0
					C ₅ C ₆ N ₁₀	122.3	123.0	123.0	123.6
					C ₅ N ₇ C ₈	104.2	104.3	104.3	104.3
					N ₇ C ₈ N ₉	113.2	113.1	113.1	113.1
					N ₇ C ₈ H ₁₃	125.2	125.4	125.3	125.4
					N ₉ C ₈ H ₁₃	121.5	121.4	121.6	121.5
					C ₄ N ₉ C ₈	106.7	106.9	106.7	106.9
					C ₄ N ₉ H ₁₂	125.9	126.7	125.8	126.8
					C ₈ N ₉ H ₁₂	127.4	126.4	127.5	126.3
					C ₆ N ₁₀ H ₁₄	120.4	121.2	120.7	120.1
					C ₆ N ₁₀ H ₁₅	119.1	119.7	118.9	120.4
					H ₁₄ N ₁₀ H ₁₅	120.4	119.0	120.3	119.6
					H _{14...O} ₁₀ C ₄	–	–	126.5	126.8
					C ₂ N _{1...H} ₉	–	–	116.9	117.1
					C ₆ N _{1...H} ₉	–	–	123.5	123.5

Результаты решения колебательной задачи, выполненной в гармоническом приближении, приведены в табл. 2. Как показывает расчёт, для колебаний пары характерно их разделение по формам на колебания, относящимся к фрагментам Ura и Ade, поэтому при нумерации колебаний пары дополнительно использованы обозначения Ura и Ade (табл. 2). Поскольку среди них присутствуют несколько смешанных, которые нельзя интерпретировать как колебания преимущественно Ura или Ade, но при этом каждый фрагмент колеблется практически независимо, т.е. формы этих колебаний соответствуют

формам Ura или Ade, то в этом случае нумерация колебаний пары дана как сумма колебаний «Ura+Ade».

Интерпретация колебательных спектров изолированных молекул Ura, Ade и комплементарной пары Ade-Ura ранее рассмотрена в работах [15,16]. Цель данного исследования, как уже отмечалось выше, определить влияние водного раствора на колебательный спектр пары Ade-Ura.

Отметим, что водный раствор приводит к большей стабилизации комплементарных пар и увеличению дипольного момента (табл. 3).

Таблица 3. Значение полной энергии E (а.е.) и дипольного момента P (D) комплементарных пар в изолированном состоянии и водном растворе

Структура	Изолированное состояние		Водный раствор	
	E	P	E	P
Ade-Ura	-882.41827407	1.69	-882.46273105	2.80
Gua-Cyt	-937.80725064	6.03	-937.85999484	8.12

Влияние водного раствора приводит к увеличению частот неплоских колебаний (максимальное смещение составляет 74 см^{-1}) не только тех связей, которые принимают непосредственное участие в образовании водородных связей между ОНК (колебания 13, 20, 27), но и связей $N'_1H'_7$ и N_9H_{12} , которые могут образовывать водородные связи с водой (колебания 14, 15). Для этих же колебаний наблюдается и увеличение интенсивности, превышающую интенсивность колебаний изолированной пары в ~ 3 -5 раз.

Частотное смещение для плоских колебаний в области до 1500 см^{-1} небольшое ($\sim 10 \text{ см}^{-1}$), в отличие от колебаний в области 1500 - 1800 см^{-1} , где максимальное смещение составляет 85 см^{-1} (колебание 66).

Наиболее ярким проявлением влияния водного раствора на колебательный спектр комплементарной пары Ade-Ura является сильный низкочастотный сдвиг и многократный рост интенсивности полос поглощения валентных колебаний $N'_1H'_7$, $N'_9H'_{12}$ и $N_{10}H_{15}$ (колебания 73, 74 и 75), образующих водородные связи с водой (рис. 2а, 2б).

Таблица 2. Вычисленные значения частот (ν_p , см^{-1}) и интенсивностей спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) и КР ($I_{\text{КР}}$, $\text{\AA}^4/\text{а.е.м.}$) комплементарной пары Ade-Ura в изолированном состоянии и в водном растворе (модель SCRF)

Колебания	Изолированное состояние			Водный раствор (модель SCRF)			Отнесение
	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	
1 (Ura+Ade)	23	7.0	0.5	16	20.8	2.8	τ
2 (Ura+Ade)	32	0.9	0.2	13i	0.1	1.3	τ
3 (Ura+Ade)	60	4.5	0.5	54	9.1	1.4	τ
4 (Ura+Ade)	67	0.9	7.0	64	2.1	23.2	τ
5 (Ura+Ade)	102	0.3	0.2	90	0.7	1.0	τ
6 (Ura+Ade)	118	1.6	0.6	110	10.9	1.8	τ
Неплоские колебания							
7 (Ura)	151	0.04	0.01	170	0.4	0.2	χ
8 (Ura+Ade)	160	0.7	0.3	155	3.7	1.6	$\chi + \chi(\text{p+i}), \chi(\text{NH}_2)$
9 (Ura+Ade)	164	0.02	0.2	175	3.1	1.1	$\chi + \chi(\text{p+i}), \chi(\text{NH}_2)$
10 (Ade)	223	2.1	0.01	219	0.01	1.1	χ
11 (Ade)	297	0.1	0.02	298	11.9	0.1	$\chi(\text{p+i})$
12 (Ura)	392	44.0	1.1	414	18.2	3.9	χ
13 (Ade)	416	131.6	0.6	343	321.0	3.5	$\chi(\text{NH}_2)$
14 (Ade)	520	71.9	0.8	544	108.7	0.2	$\rho(\text{N}_9\text{H}_{12})$
15 (Ura)	566	67.6	0.1	597	139.9	0.1	$\rho(\text{N}'_1\text{H}'_7)$
16 (Ade)	576	37.6	0.3	576	106.6	0.8	χ
17 (Ade)	663	0.5	0.3	660	0.002	0.2	χ
18 (Ade)	684	0.01	0.1	686	0.8	0.2	χ
19 (Ura+Ade)	722	33.1	0.2	727	15.2	0.4	$\chi, \rho(\text{C}'_4\text{O}'_{10}) + \rho(\text{NH}_2)$
20 (Ura+Ade)	736	8.1	0.01	700	74.7	0.7	$\chi, \rho(\text{C}'_4\text{O}'_{10}) + \rho(\text{NH}_2)$
21 (Ura)	752	29.4	0.5	759	54.0	0.7	$\chi, \rho(\text{C}'_2\text{O}'_8)$
22 (Ade)	803	9.1	0.7	805	13.6	1.8	χ
23 (Ura)	808	44.3	0.2	807	60.4	1.2	$\rho(\text{C}'_5\text{H}'_{11}), \rho(\text{C}'_6\text{H}'_{12})$
24 (Ade)	842	9.3	0.7	872	11.6	1.1	$\rho(\text{C}_8\text{H}_{13})$
25 (Ura)	964	0.1	1.1	983	1.7	5.7	$\rho(\text{C}'_5\text{H}'_{11}), \rho(\text{C}'_6\text{H}'_{12})$
26 (Ura+Ade)	987	49.9	0.001	974	2.1	0.6	$\rho(\text{N}'_3\text{H}'_9) + \rho(\text{C}_2\text{H}_{11})$
27 (Ura+Ade)	996	27.5	0.2	922	157.1	0.1	$\rho(\text{N}'_3\text{H}'_9) + \rho(\text{C}_2\text{H}_{11})$
Плоские колебания							
28	310	31.9	7.2	311	48.7	12.0	
29 (Ura)	408	68.8	2.2	404	99.9	6.8	$\beta(\text{C}'_2\text{O}'_8), \beta(\text{C}'_4\text{O}'_{10})$

30 (Ura+Ade)	530	19.6	6.0	529	86.3	13.4	γ
31 (Ura+Ade)	535	3.6	4.5	535	2.9	14.3	$\beta(C'_2O'_8), \beta(C'_4O'_{10}) + \gamma$
32 (Ura+Ade)	538	11.3	1.3	536	8.7	6.6	γ
33 (Ura+Ade)	557	43.6	6.9	559	58.6	16.4	$\beta(C'_2O'_8), \beta(C'_4O'_{10}) + \gamma$
34 (Ura)	565	0.7	0.4	569	3.1	2.0	γ
35 (Ade)	636	8.4	5.5	632	14.3	16.0	γ
36 (Ade)	727	3.2	24.2	721	10.7	88.9	Q(CC), Q(CN)
37 (Ura)	775	8.6	32.5	783	1.0	93.1	Q(C'C'), Q(C'N')
38 (Ade)	911	7.8	2.1	910	31.5	10.2	γ
39 (Ade)	947	15.7	5.0	944	43.8	23.2	γ
40 (Ura)	988	50.0	4.4	990	45.0	7.4	γ
41 (Ura)	999	6.5	2.3	1012	17.4	9.1	γ
42 (Ade)	1038	19.3	11.4	1027	19.7	30.2	Q, $\beta(NH_2)$
43 (Ade)	1078	22.2	9.4	1086	24.1	37.4	Q, $\beta(N_9H_{12}), \beta(C_8H_{13})$
44 (Ura)	1092	3.8	4.8	1096	4.5	19.8	Q, γ
45 (Ade)	1149	16.3	2.2	1147	51.9	13.0	Q, $\beta(C_8H_{13}), \beta(N_9H_{12}), \gamma$
46 (Ura)	1214	101.8	0.1	1204	239.7	2.1	Q, $\beta(C'_5H'_{11}), \beta(C'_6H'_{12})$
47 (Ura)	1234	3.9	21.2	1229	17.6	83.7	Q, $\beta(C'_5H'_{11}), \beta(C'_6H'_{12})$
48 (Ade)	1258	38.1	35.5	1247	57.7	44.6	Q(CN), $\beta(NH_2)$
49 (Ade)	1265	20.3	6.3	1256	53.9	99.3	Q(CN), $\beta(C_8H_{13}), \beta(N_9H_{12})$
50 (Ade)	1337	105.1	31.5	1335	175.2	63.5	Q(CC,CN), $\beta(C_2H_{11})$
51 (Ade)	1352	40.0	69.4	1349	136.9	203.2	Q(CC,CN), $\beta(C_2H_{11}), \beta(C_8H_{13})$
52 (Ade)	1371	6.6	48.9	1368	38.6	197.0	Q(CC,CN), $\beta(N_9H_{12}), \beta(C_2H_{11})$
53 (Ura)	1389	99.6	7.6	1390	63.5	43.7	Q, $\beta(N'_3H'_9), \beta(C'_5H'_{11}), \beta(C'_6H'_{12})$
54 (Ura+Ade)	1414	19.6	24.3	1412	54.2	95.1	Q, $\beta(N'_1H'_7) + Q(CC,CN), \beta(C_8H_{13}), \beta(N_9H_{12})$
55 (Ura+Ade)	1417	68.6	13.2	1415	164.1	22.5	Q, $\beta(N'_1H'_7) + Q(CC,CN), \beta(C_8H_{13}), \beta(N_9H_{12})$
56 (Ade)	1443	10.2	0.3	1436	52.1	12.6	Q(C ₄ N ₁₀), $\beta(N_9H_{12})$
57 (Ura)	1501	55.5	8.0	1480	435.2	26.4	Q, $\beta(N'_1H'_7)$
58 (Ura +Ade)	1509	112.8	65.9	1488	287.3	207.2	Q, $\beta(N'_1H'_7) + Q(CN), \beta(C_2H_{11}), \beta(N_9H_{12})$
59 (Ura+Ade)	1519	13.9	51.0	1508	43.1	66.4	Q, $\beta(N'_1H'_7) + Q(CN), \beta(C_8H_{13})$
60 (Ura)	1545	52.8	18.3	1514	83.0	131.7	Q, $\beta(N'_3H'_9)$
61 (Ade)	1622	26.7	14.9	1605	111.7	94.5	Q(CN), $\beta(C_2H_{11})$
62 (Ade)	1636	292.4	8.8	1621	569.4	24.3	Q(CC,CN), $\beta(N_9H_{12})$
63 (Ura)	1666	31.8	23.1	1652	243.2	34.8	Q(C' ₅ =C' ₆)
64 (Ade)	1682	402.9	7.9	1648	1031.6	53.0	$\beta(NH_2)$
65 (Ura)	1736	601.3	101.5	1674	1173.7	200.4	Q(C' ₄ =O' ₁₀)
66 (Ura)	1795	662.9	17.8	1710	1270.8	81.9	Q(C' ₂ =O' ₈)
67 (Ura)	2987	2083.2	579.4	3100	2150.8	859.1	q(N' ₃ H' ₉)
68 (Ade)	3172	2.7	79.8	3135	24.9	343.6	q(C ₂ H ₁₁)
69 (Ura)	3199	3.8	133.8	3125	6.6	283.7	q(C' ₆ H' ₁₂)
70 (Ade)	3239	0.1	142.3	3162	21.6	285.6	q(C ₈ H ₁₃)
71 (Ura)	3242	0.7	126.1	3164	21.0	315.2	q(C' ₅ H' ₁₁)
72 (Ade)	3410	1012.7	325.5	3392	1028.0	730.5	q(NH ₂) sim
73 (Ura)	3637	106.9	119.2	3258	509.4	356.9	q(N' ₁ H' ₇)
74 (Ade)	3648	91.9	164.4	3274	536.5	376.0	q(N ₉ H ₁₂)
75 (Ade)	3684	133.8	54.7	3533	470.9	189.1	q(NH ₂) asim

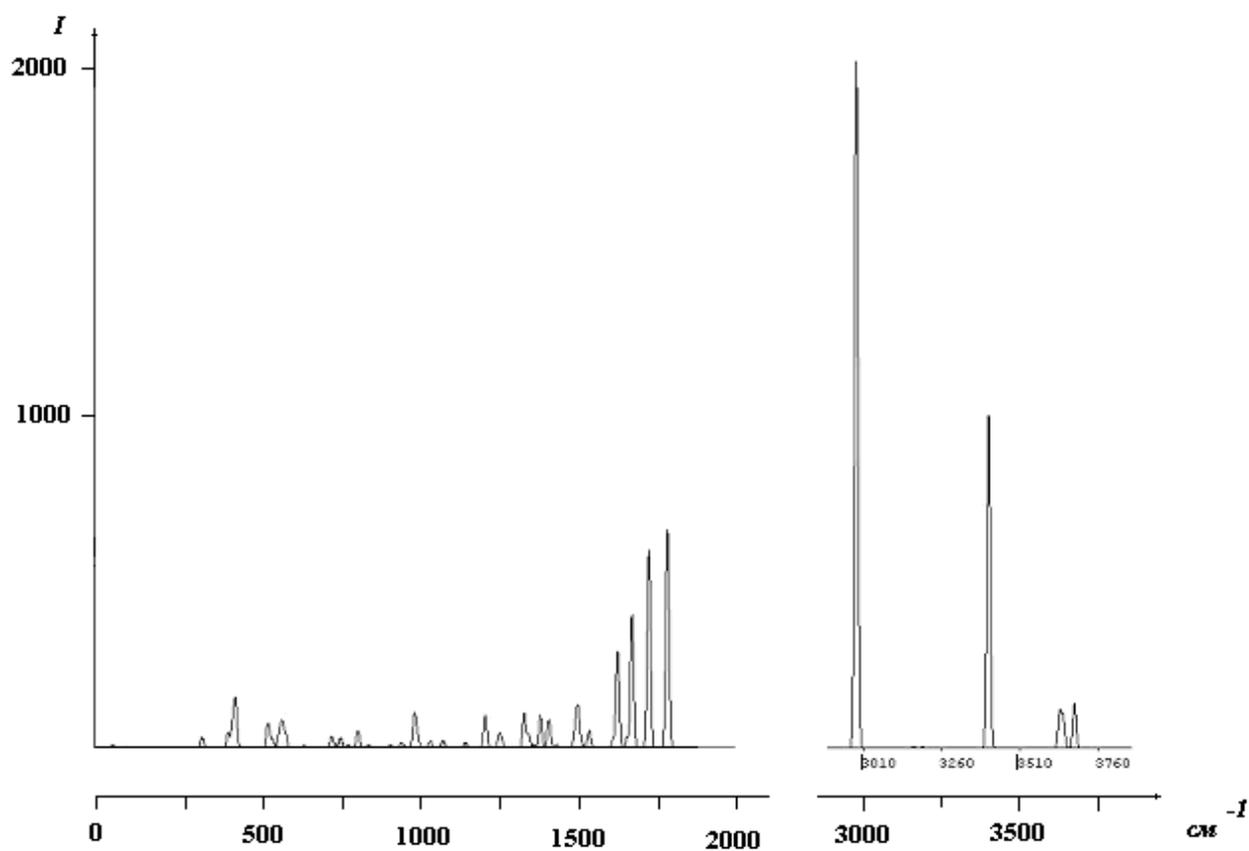


Рис. 2а. Спектр поглощения изолированной комплементарной пары Ade-Ura

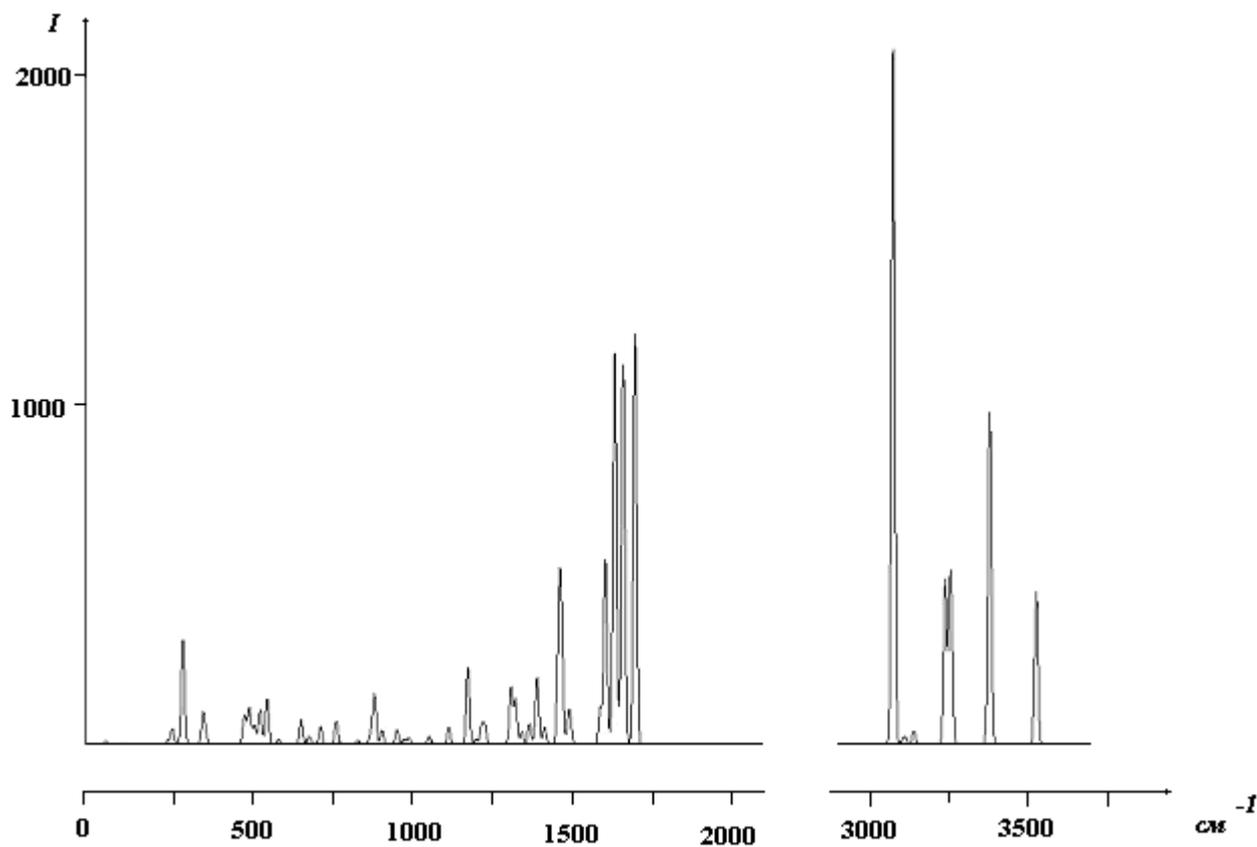


Рис. 2б. Спектр поглощения комплементарной пары Ade-Ura в водном растворе

Гуанин-Цитозин. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Gua-Cyt с нумерацией атомов дана на рис. 3. Результаты расчёта структуры и колебаний приведены в табл. 4, 5.

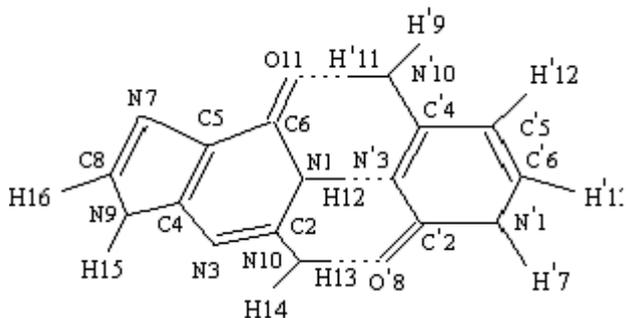


Рис. 3. Молекулярная диаграмма комплементарной пары Gua-Cyt

Структура изолированного Gua, в отличие от структур Ade, Ura, Thy и Cyt, является неплоской – атомы H₁₂ и O₁₁ расположены над плоскостью пиримидинового кольца, а минимум адиабатического потенциала аминной группы достигается при значениях двугранных углов N₁C₂N₁₀H₁₄ и N₃C₂N₁₀H₁₃, равных 170,1 и 151,2°.

Образование водородных связей между Gua и Cyt приводит к тому, что структура комплементарной пары Gua-Cyt как в изолированном состоянии, так и в водном растворе, становится плоской.

Длины водородных связей N'₁₀H'₁₁...O₁₁ и N'₃...H₁₂N₁ в водном растворе увеличиваются, а длина водородной связи O'₈...H₁₃N₁₀ уменьшается на 0.016, 0.008 и 0.058 Å соответственно.

При интерпретации колебательного спектра необходимо учитывать тот факт, что гармоническое приближение малых колебаний не позволяет воспроизвести частоты и интенсивности аминной группы, поскольку для неё характерна малая величина потенциального барьера инверсии. Наличие полого двухямного потенциала приводит к появлению в вычисленном спектре водного раствора Gua-Cyt мнимой частоты 17 см⁻¹. В связи с этим для описания инверсионного движения аминной группы необходимо привлекать модели колебаний с большой амплитудой.

В области проявления неплоских колебаний влияние водного раствора приводит к высокочастотному (до ~40 см⁻¹) сдвигу колебаний связей N₉H₁₅ и C'₂O'₈, которые могут образовывать водородные связи с водой (колебания 16 и 24). Увеличение интенсивности (в ~3-5 раз) характерно для колебаний аминных групп Gua и Cyt (колебания 12, 13, 17, 21, 27, 28).

Существенное влияние водного раствора на плоские колебания наблюдается в области 1500-1800 см⁻¹ и области валентных колебаний связей NH (рис. 4а, 4б), где происходит многократное (до ~10 раз) увеличение интенсивности и значительное (до ~400 см⁻¹) частотное смещение (колебание 79).

Таблица 4. Вычисленные длины связей (Å) и валентные углы (град) Cyt, Gua и комплементарной пары Gua-Cyt в изолированном состоянии и водном растворе (модель SCRF)

Связь, угол	Cyt		Gua – Cyt		Связь, Угол	Gua		Gua – Cyt	
	Изолир.	SCRF	изолир.	SCRF		изолир.	SCRF	изолир.	SCRF
N ₁ C ₂	1.428	1.399	1.409	1.391	N ₁ C ₂	1.370	1.375	1.374	1.377
N ₁ C ₆	1.354	1.358	1.360	1.360	N ₁ C ₆	1.439	1.410	1.409	1.401
N ₁ H ₇	1.010	1.027	1.010	1.027	N ₁ H ₁₂	1.012	1.030	1.032	1.037
C ₂ N ₃	1.369	1.359	1.357	1.356	C ₂ N ₃	1.309	1.321	1.322	1.327
C ₂ O ₈	1.216	1.241	1.231	1.246	C ₂ N ₁₀	1.375	1.354	1.350	1.345
N ₃ C ₄	1.317	1.337	1.336	1.344	N ₃ C ₄	1.356	1.350	1.346	1.347
C ₄ C ₅	1.440	1.434	1.443	1.434	C ₄ C ₅	1.393	1.396	1.397	1.397
C ₄ N ₁₀	1.358	1.345	1.336	1.338	C ₄ N ₉	1.369	1.367	1.371	1.368
C ₅ C ₆	1.356	1.357	1.353	1.356	C ₅ C ₆	1.438	1.427	1.429	1.424
C ₅ H ₁₂	1.080	1.084	1.081	1.084	C ₅ N ₇	1.380	1.386	1.384	1.387
C ₆ H ₁₃	1.083	1.087	1.083	1.087	C ₆ O ₁₁	1.213	1.235	1.235	1.424
H ₉ N ₁₀	1.004	1.015	1.006	1.016	N ₇ C ₈	1.304	1.312	1.303	1.311
N ₁₀ H ₁₁	1.007	1.016	1.035	1.023	C ₈ N ₉	1.385	1.376	1.387	1.377
C ₂ N ₁ C ₆	123.3	122.6	122.5	122.3	C ₈ H ₁₆	1.080	1.084	1.080	1.084
C ₂ N ₁ H ₇	115.3	117.2	115.9	117.4	N ₉ H ₁₅	1.009	1.027	1.008	1.027
C ₆ N ₁ H ₇	121.4	120.2	121.6	120.3	N ₁₀ H ₁₃	1.009	1.017	1.021	1.024
N ₁ C ₂ N ₃	116.1	117.8	117.2	118.2	N ₁₀ H ₁₄	1.009	1.017	1.006	1.015
N ₁ C ₂ O ₈	118.3	118.9	118.5	118.9	O ₁₁ ...H ₁₁	–	–	1.771	1.887
N ₃ C ₂ O ₈	125.7	123.3	124.3	122.9	H ₁₂ ...N ₃	–	–	1.919	1.927
C ₂ N ₃ C ₄	120.5	120.1	121.3	120.4	H ₁₃ ...O ₈	–	–	1.919	1.861
N ₃ C ₄ C ₅	123.9	122.7	121.7	121.9	C ₂ N ₁ C ₆	126.5	126.0	125.9	125.4
N ₃ C ₄ N ₁₀	117.0	117.7	117.8	117.8	C ₂ N ₁ H ₁₂	119.9	118.8	119.0	118.8
C ₅ C ₄ N ₁₀	119.0	119.6	120.5	120.4	C ₆ N ₁ H ₁₂	113.5	115.3	115.1	115.8
C ₄ C ₅ C ₆	116.1	116.6	117.0	117.0	N ₁ C ₂ N ₃	123.4	123.0	123.1	123.0

C ₄ C ₅ H ₁₂	122.4	121.7	121.7	121.4	N ₁ C ₂ N ₁₀	117.0	117.0	116.8	116.7
C ₆ C ₅ H ₁₂	121.5	121.7	121.3	121.7	N ₃ C ₂ N ₁₀	119.6	120.0	120.1	120.3
N ₁ C ₆ C ₅	120.0	120.2	120.3	120.3	C ₂ N ₃ C ₄	112.8	113.2	112.7	113.2
N ₁ C ₆ H ₁₃	116.9	116.4	116.6	116.3	N ₃ C ₄ C ₅	129.1	128.3	129.1	128.2
C ₅ C ₆ H ₁₃	123.0	123.4	123.1	123.5	N ₃ C ₄ N ₉	125.9	126.7	126.1	126.8
C ₄ N ₁₀ H ₉	118.2	119.8	120.2	120.3	C ₅ C ₄ N ₉	105.0	105.1	104.8	105.0
C ₄ N ₁₀ H ₁₁	122.1	121.3	120.5	120.3	C ₄ C ₅ C ₆	118.7	118.6	117.9	118.3
H ₉ N ₁₀ H ₁₁	119.7	118.9	119.3	119.5	C ₄ C ₅ N ₇	110.8	110.6	110.9	110.6
					C ₆ C ₅ N ₇	130.4	130.8	131.2	131.1
					N ₁ C ₆ C ₅	109.5	111.0	111.3	111.9
					N ₁ C ₆ O ₁₁	119.2	119.9	119.7	119.9
					C ₅ C ₆ O ₁₁	131.3	129.1	129.0	128.2
					C ₅ N ₇ C ₈	104.8	104.5	104.8	104.5
					N ₇ C ₈ N ₉	112.6	112.7	112.7	112.8
					N ₇ C ₈ H ₁₆	125.7	125.8	125.7	125.8
					N ₉ C ₈ H ₁₆	121.7	121.5	121.6	121.5
					C ₄ N ₉ C ₈	106.7	107.1	106.8	107.1
					C ₄ N ₉ H ₁₅	125.6	126.4	125.5	126.4
					C ₈ N ₉ H ₁₆	127.7	126.5	127.7	126.5
					C ₂ N ₁₀ H ₁₃	118.2	119.9	122.9	122.4
					C ₂ N ₁₀ H ₁₄	113.8	116.9	117.0	117.9
					H ₁₃ N ₁₀ H ₁₄	114.7	116.8	120.1	119.7
					C ₆ O ₁₁ ...H ₁₁	–	–	128.3	126.4
					H ₁₂ ...N ₃ C ₂	–	–	115.0	115.9
					C ₄ ...N ₃ C ₂	–	–	123.8	123.8
					H ₁₃ ...O ₈ C ₂	–	–	121.0	121.1

Таблица 5. Вычисленные значения частот (ν_p , см⁻¹) и интенсивностей спектров ИК ($I_{p,ИК}$, км/моль) и КР ($I_{p,КР}$, Å⁴/а.е.м.) комплементарной пары Gua-Cyt в изолированном состоянии и в водном растворе (модель SCRF)

Коле бания	Изолированное состояние			Водный раствор (модель SCRF)			Отнесение
	ν_p	$I_{ИК}$	$I_{КР}$	ν_p	$I_{ИК}$	$I_{КР}$	
1 (Gua+Cyt)	17	4.0	0.9	17i	0.7	1.0	τ
2 (Gua+Cyt)	30	10.0	0.1	23	36.0	1.1	τ
3 (Gua+Cyt)	60	0.0	7.1	61	0.0	25.9	τ
4 (Gua+Cyt)	94	1.1	0.8	92	3.6	1.1	τ
5 (Gua+Cyt)	126	34.3	1.1	110	20.6	4.1	τ
6 (Gua+Cyt)	131	1.2	0.6	129	29.0	1.9	τ
Неплоские колебания							
7 (Gua)	128	3.3	0.0	128	7.9	0.3	χ
8 (Cyt)	149	0.4	0.2	160	0.6	0.7	χ
9 (Gua)	172	1.3	0.1	175	1.4	0.5	χ
10 (Cyt)	189	1.4	0.1	200	2.8	0.5	χ
11 (Gua)	211	5.0	0.1	215	14.4	0.1	χ
12 (Gua)	330	54.9	0.6	320	217.7	2.7	$\chi, \chi(NH_2)$
13 (Gua)	368	87.1	0.2	357	101.0	0.2	$\chi, \chi(NH_2)$
14 (Cyt)	384	19.3	0.3	406	66.0	0.3	χ
15 (Cyt)	435	119.1	1.2	432	217.8	4.4	$\rho(N'_1H'_7)$
16 (Gua)	519	116.7	0.5	555	215.2	0.03	$\rho(N_9H_{15})$
17 (Cyt)	602	43.3	0.0	607	128.8	0.4	$\chi, \chi(NH_2)$
18 (Gua)	651	18.6	0.0	661	43.1	1.9	$\rho(NH_2)$
19 (Gua)	658	2.9	0.4	657	0.5	1.0	χ
20 (Gua)	708	1.6	0.1	712	13.3	1.1	χ
21 (Cyt)	717	61.0	0.0	713	111.3	0.5	$\chi, \chi(NH_2)$
22 (Gua)	741	0.9	0.0	741	0.8	0.2	$\rho(C'_{5(6)}H'_{12(13)})$
23 (Cyt)	775	40.3	0.4	779	21.8	1.1	$\rho(C_2N_{10})$
24 (Gua+Cyt)	769	24.4	0.6	803	35.5	0.3	$\rho(N_1H_{12})+\rho(C'_2O'_8)$
25 (Gua)	784	20.6	1.1	785	34.7	3.2	$\rho(C_6O_{11})$

26 (Gua)	812	6.7	1.1	848	10.8	6.3	$\rho(C_8H_{16})$
27 (Gua+Cyt)	851	5.5	0.1	855	37.8	1.2	$\rho(N_1H_{12})+\rho(N'H'_2)$
28 (Gua+Cyt)	911	107.5	0.1	887	163.7	0.9	$\rho(N_1H_{12})+\rho(N'H'_2)$
29 (Cyt)	957	0.3	0.6	980	0.4	3.7	$\rho(C'_{5(6)}H'_{12(13)})$
Плоские колебания							
30 (Gua)	344	16.3	1.2	341	28.7	2.3	γ
31 (Gua)	374	5.5	4.0	377	19.8	11.7	$\beta(C_6O_{11}), \beta(C_2N_{10})$
32 (Ura+Ade)	408	12.9	6.1	399	24.0	10.4	$\beta(C'_2O'_8), \beta(C'_4N'_{10})$
33 (Ura+Ade)	499	7.5	4.9	503	7.9	14.3	γ
34 (Ura)	538	1.8	5.9	539	1.9	13.2	γ
35 (Ade)	548	26.4	3.2	545	22.1	12.0	γ
36 (Ade)	561	13.9	0.4	558	44.0	0.1	γ
37 (Ura)	592	4.0	6.0	593	19.9	19.3	γ
38 (Ade)	641	8.8	31.1	642	9.8	104.8	Q
39 (Ade)	689	43.8	1.5	692	74.8	3.9	$\gamma, \beta(C_2N_{10})$
40 (Ura)	782	0.9	40.5	789	9.5	113.3	Q
41 (Ura)	836	20.4	1.6	832	46.0	7.6	γ
42 (Ade)	947	11.6	7.0	945	43.7	28.5	γ
43 (Cyt)	957	0.3	0.6	975	2.3	21.1	Q, γ
44 (Cyt)	999	0.1	3.3	1003	0.1	13.8	Q, γ
45 (Gua)	1057	1.6	10.0	1051	5.2	27.8	Q, γ
46 (Gua)	1064	20.6	9.2	1076	26.7	44.5	Q, $\beta(C_8H_{16}), \beta(N_9H_{15})$
47 (Gua)	1108	4.4	1.6	1108	14.9	8.4	Q, $\beta(C_8H_{16}), \beta(N_9H_{15})$
48 (Cyt)	1120	25.1	4.4	1116	32.0	17.2	Q, $\beta(C'_5H'_{12})$
49 (Cyt)	1139	50.6	2.4	1140	30.6	6.2	Q, $\beta(N'H'_2)$
50 (Gua)	1165	16.6	13.0	1168	26.1	36.2	Q, $\beta(NH_2)$
51 (Gua)	1181	45.6	2.1	1187	181.6	26.4	Q, $\beta(C_8H_{16})$
52 (Cyt)	1224	50.3	6.9	1213	117.0	11.3	Q, β
53 (Cyt)	1297	68.1	23.3	1295	66.4	104.1	Q, $\beta(C'_6H'_{13})$
54 (Gua)	1312	2.5	39.6	1302	27.2	96.0	Q, $\beta(C_8H_{16})$
55 (Gua)	1354	42.8	17.8	1354	64.7	74.4	Q(C ₅ C ₆)
56 (Gua)	1379	15.1	123.5	1379	55.7	355.3	Q, $\beta(N_9H_{15})$
57 (Cyt)	1382	10.9	7.9	1373	57.0	38.4	Q, $\beta(N'_1H'_7)$
58 (Gua)	1409	85.7	1.1	1399	328.2	9.0	Q
59 (Gua+Cyt)	1439	92.7	28.6	1431	178.2	58.9	Q, $\beta(N_1H_{12})+ Q, \beta(N'_1H'_7)$
60 (Gua+Cyt)	1446	73.1	7.5	1437	247.8	33.8	Q, $\beta(N_1H_{12})+ Q, \beta(N'_1H'_7)$
61 (Gua+Cyt)	1518	17.1	205.9	1496	6.8	450.6	Q, $\beta(C_8H_{16})$
62 (Gua+Cyt)	1525	195.0	23.1	1500	945.4	143.1	Q(C' ₄ N' ₁₀)
63 (Cyt)	1549	139.9	8.5	1537	214.1	14.9	Q(C' ₄ C' ₅)
64 (Gua)	1559	7.0	17.3	1544	49.5	99.9	Q
65 (Gua)	1612	115.0	65.9	1595	366.0	251.6	Q(C ₄ C ₅)
66 (Gua)	1646	330.9	21.1	1637	1099.4	31.1	Q, $\beta(NH_2)$
67 (Gua+Cyt)	1666	177.5	5.7	1647	203.4	2.3	$\beta(NH_2)+ Q(C'_5C'_6)$
68 (Gua+Cyt)	1682	186.9	19.2	1611	1680.6	108.0	$\beta(NH_2)+ Q(C'_5C'_6)$
69 (Cyt)	1702	852.9	6.9	1661	796.5	25.9	$\beta(N'H'_2)$
70 (Gua+Cyt)	1719	34.2	64.8	1670	435.4	140.4	Q(C ₆ O ₁₁)+ Q(C' ₂ O' ₈)
71 (Gua+Cyt)	1750	1367.9	10.0	1691	1363.2	46.6	Q(C ₆ O ₁₁)+ Q(C' ₂ O' ₈)
72 (Gua+Cyt)	3155	559.0	614.0	3337	1700.5	390.4	q(N ₁ H ₁₂), q _{NH₂} (N ₁₀ H ₁₃₍₁₄₎) sim +q _{NH₂} (N' ₁₀ H' ₉₍₁₁₎)
73 (Cyt)	3199	0.4	85.2	3127	30.4	111.3	q(C' ₅₍₆₎ H' ₁₂₍₁₃₎)
74 (Gua+Cyt)	3218	1726.1	36.2	3124	1653.3	832.5	(N ₁ H ₁₂), q _{NH₂} (N ₁₀ H ₁₃₍₁₄₎) sim +q _{NH₂} (N' ₁₀ H' ₉₍₁₁₎)
75 (Gua+Cyt)	3221	264.4	234.0	3149	17.7	388.6	(N ₁ H ₁₂), q _{NH₂} (N ₁₀ H ₁₃₍₁₄₎) sim + q(C' ₅₍₆₎ H' ₁₂₍₁₃₎)
76 (Gua)	3238	0.0	144.8	3165	23.5	284.7	q(C ₈ H ₁₆)
77 (Gua)	3399	1219.7	316.9	3316	859.4	1014.1	q _{NH₂} (N ₁₀ H ₁₃₍₁₄₎) sim q(N ₁ H ₁₂)
78 (Cyt)	3623	93.3	129.8	3274	709.1	291.1	q(N' ₁ H' ₇)
79 (Gua)	3649	73.0	170.2	3277	547.6	421.9	Q(N ₉ H ₁₅)
80	3679	95.7	99.6	3504	517.9	228.7	q _{NH₂} (N' ₁₀ H' ₉₍₁₁₎) asim
81	3697	124.9	94.8	3512	371.6	268.5	q _{NH₂} (N ₁₀ H ₁₃₍₁₄₎) asim

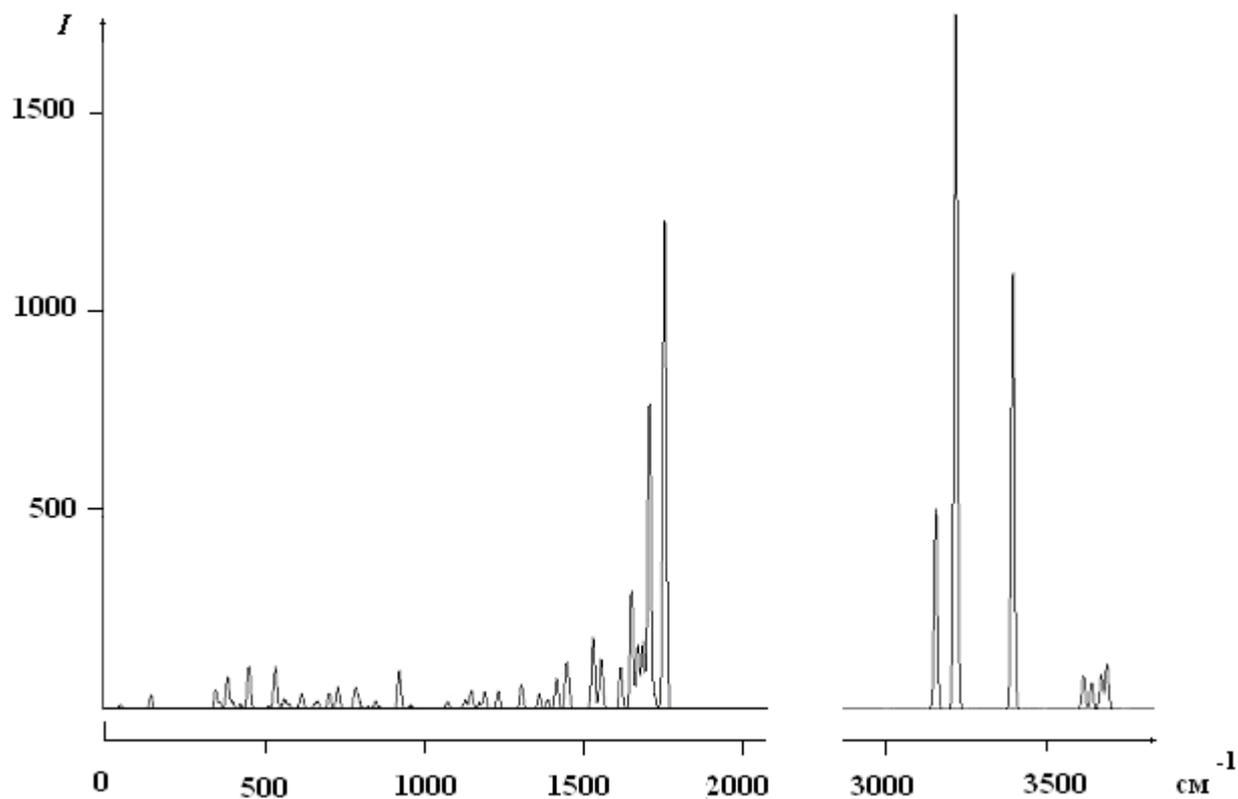


Рис. 4а. Спектр поглощения изолированной комплементарной пары Gua-Cyt

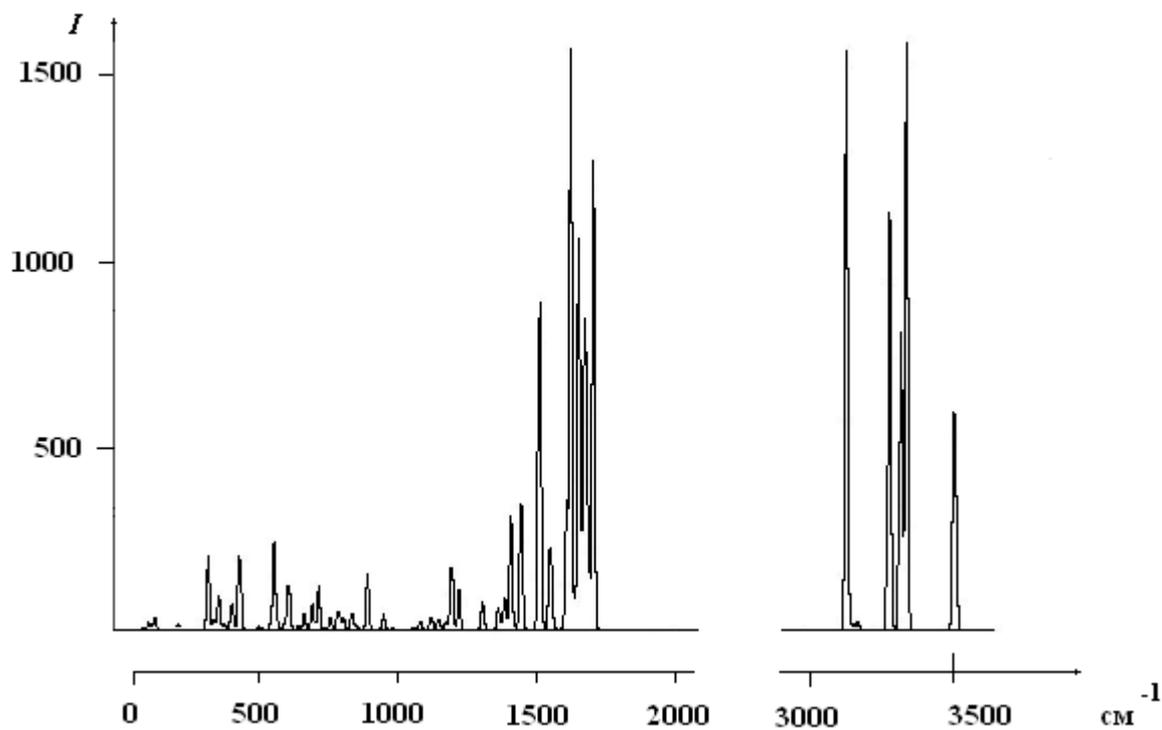


Рис. 4б. Спектр поглощения комплементарной пары Gua-Cyt в водном растворе

Выводы. Выполненный расчёт комплементарных пар Ade-Ura и Gua-Cyt методом SCRF показал, что имеются ярко выраженные характерные спектральные признаки влияния водного раствора на

колебательные спектры этих димеров по сравнению с изолированным состоянием, причём для пары Gua-Cyt спектральные изменения более значительны, чем для пары Ade-Ura.

Библиографический список

1. Löwdin P.O. // Ann. N. Y. Acad. Sci. – 1969. – 158. – P. 86–95.
2. Монажеми М., Чаканди В., Заре К., Амири А. // Биохимия. – 2005. – 70. – С. 447–458.
3. Jiang S.-P., Raghunathan G., Ting K.-L., Xuan J.C. // J. Biomol. Struct. Dyn. – 1994. – 12. – P. 367–382.
4. Krechivska O.M., Kosach D.A., Sudakov O.O., Novorun D.M. // Biopolimery i Kletca. – 2003. – 19. – P. 382 – 385.
5. Danilov V.I., Anisimov V.M., Kurita N., Novorun D. // Chem. Phys. Lett. – 2005. – 412. – P. 285 – 293.
6. Jeffrey G.A., Saenger W. Hydrogen Bonding in Biological Structures. – Berlin: Springer, 1991, 569 p.
7. Зенгер В. Принципы структурной организации нуклеиновых кислот. – М.: Мир, 1987, 854 с.
8. Кочетков Н.К., Будовский Э.И., Свердлов Е.Д., Симукова Н.А., Турчинский М.Ф., Шибяев В.Н. Органическая химия нуклеиновых кислот. – М.: Химия, 1970, 720 с.
9. Zhizhina G.P., Oleinik E.F. // Russian Chemical Reviews. – 1972. – 41. – P. 258 – 280.
10. A.Abo-Riziq, L.Grace, E.Nir, M.Kabelac, P.Hobza, M.S.de Vries. Photochemical selectivity in guanine-cytosine base-pair structures. // PNAS. – 2005. – 102.- №1.- P.20-23.
11. Brandl M., Meyer M., Sühnel J. Quantum-Chemical Study of a Water-Mediated Uracil-Cytosine Base Pair. // J. Am. Chem. Soc. - 1999. - 121. - P. 2605-2606.
12. Podolyan Y., Rubin Y.V., Leszczynski J. An ab Initio Post-Hartree-Fock Comparative Study of 5-Azacytosine and Cytosine and Their Dimers with Guanine. // J. Phys. Chem. – 2000. - 104 A. – P. 9964-9970.
13. S.E.Lappi S.E. A vibrational analysis of the exocyclic amino group of adenine. -2002. – 173 p.
14. Тен Г.Н., Булова Т.Г., Баранов В.И. // Журн. прикл. спектроскопии. – 2009. - 76, 84-92.
15. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Баранов В.И. // Журн. структур. химии. —2010. — 51, № 3. — С. 474-482.
16. Тен Г.Н., Нечаев В.В., Панкратов А.Н., Березин В.И., Баранов В.И. // Журн. структур. химии. —2010. — 51, № 5. — С. 883-889.
17. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2009.

STRUCTURE AND VIBRATIONAL SPECTRA OF COMPLEMENTARY PAIRS IN AQUEOUS SOLUTION

Yakovleva A.A., Ten G.N.

Saratov State University

Yakovleva Antonina Alekseevna, postgrad, ph. d., e-mail: yakovleva_ant@mail.ru

Ten Galina Nikolaevna, prof., Doctor of Ph. and Math. Sciences, E-mail: TenGN@info.sgu.ru

The calculation of the structure and vibrational spectra of the complementary pairs of adenine-uracil, guanine-cytosine in the approximation of B3LYP/6-311 ++ G (d, p) in aqueous solution has been performed. The influence of hydrogen bonds on the frequency and intensity of absorption bands and Raman lines has been shown.

УДК 543.42+547.82

РАСЧЁТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ИЗОЛИРОВАННОГО МЕТИОНИНА

Д.М. Кадров, И.Г. Алексеев, Г.Н. Тен

Саратовский государственный университет

Кадров Дмитрий Михайлович, студент физфака

Алексеев Игорь Геннадиевич, студент физфака

Тен Галина Николаевна, д.ф.-м.н., профессор., E-mail: TenGN@info.sgu.ru

Проведён расчёт структуры и колебательных спектров изолированного метионина методом DFT в гармоническом приближении. Выполнена интерпретация колебательного спектра.

Введение

Известно, что в соответствии со своей амфотерной природой молекулы аминокислот в зависимости от кислотности среды могут иметь разную ионную форму: в кислых растворах они представляют собой положительно

заряженные ионы, в щелочных растворах – отрицательно заряженные ионы, в нейтральной среде – цвиттер-ионы. В кристаллическом состоянии молекулы аминокислот обычно имеют цвиттер-ионную, а в парах – нейтральную форму.

ИК спектр метионина в газовой фазе ($T=520$ К; спектральная область $700\text{--}4000\text{ см}^{-1}$) впервые был представлен в работе, опубликованной в 2008 году [1]. Авторами этой же работы был выполнен квантово-химический расчёт нормальных колебаний методом DFT с использованием базиса 6-31G(d,p) и дано отнесение колебаний в области $1100\text{--}3500\text{ см}^{-1}$.

Цель данной работы – рассчитать ИК и КР спектры изолированного метионина в гармоническом приближении и выполнить полную интерпретацию колебательного спектра. Расчёт выполнен методом DFT с помощью программ Gaussian-09 в базисе 6-311++G(d,p) [2].

Результаты и обсуждение

Молекулярная структура метионина с обозначением и нумерацией атомов представлена на рис. 1, а вычисленные геометрические параметры – в табл. 1.

Результаты расчёта нормальных колебаний метионина даны в табл. 2; здесь же для сравнения

приведены экспериментальные значения частот и относительных интенсивностей.

В низкочастотной области ($33\text{--}195\text{ см}^{-1}$) колебания 1-4 характеризуются смещением, а колебания 5-7 – вращением одних молекулярных фрагментов метионина относительно других как целого. В области $231\text{--}517\text{ см}^{-1}$ проявляются деформационные колебания углов CCC, CNC, COC, CSC, среди которых низкочастотными являются колебания углов CSC.

Среди деформационных колебаний углов, образованных связями CH, OH и NH, наибольшую интенсивность имеет колебание с частотой 625 см^{-1} , форма которого отвечает изменению валентного угла C_1O_9H (рис. 2а).

Валентные колебания связей CC, CN, CO и CS проявляются в области $704\text{--}1136\text{ см}^{-1}$, два из которых имеют очень сильную интенсивность – это колебания 21 и 28.

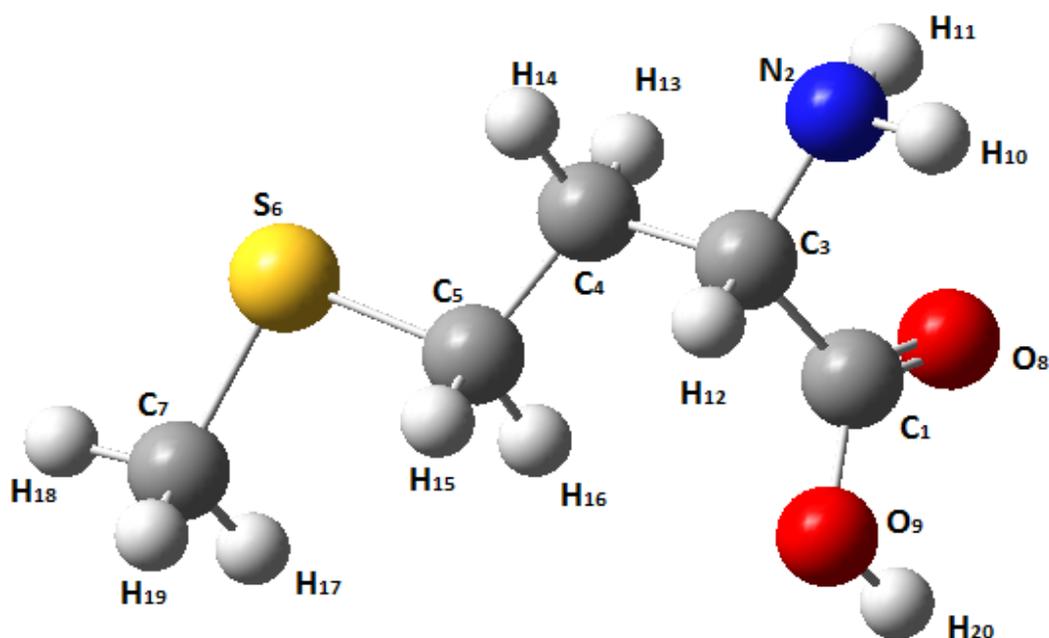


Рис. 1. Молекулярная структура метионина

Таблица 1. Вычисленные длины связей (Å) и валентные углы (град) изолированного метионина

Связь	Значение	Углы	Значение	Углы	Значение
N2C3	1.46	C3N2H11	110.1	C4C5H15	110.6
N2H10	1.02	C3N2H10	111.0	C4C5S6	109.7
N2H11	1.02	H11N2H10	107.0	H16C5H15	108.2
C3H12	1.09	N2C3H12	108.3	H16C5S6	108.3
C3C4	1.54	N2C3C4	108.9	H15C5S6	108.7
C3C1	1.53	N2C3C1	112.5	C1O9H20	107.4
C4H13	1.10	H12C3C4	108.9	C5S6C7	99.5
C4H14	1.09	H12C3C1	107.9	S6C7H19	111.2
C4C5	1.53	C4C3C1	110.0	S6C7H18	106.8
C1O9	1.36	C3C4H14	106.3	S6C7H17	111.2
C1O8	1.21	C3C4H13	108.5	H19C7H18	108.8
C5H16	1.09	C3C4C5	114.6	H19C7H17	109.9

C5H15	1.09	H14C4H13	107.2	H18C7H17	108.8
C5S6	1.84	H14C4C5	110.1		
O9H20	0.97	H13C4C5	109.8		
S6C7	1.82	C3C1O9	112.5		
C7H17	1.09	C3C1O8	124.9		
C7H18	1.09	O9C1O8	122.5		
C7H19	1.09	C4C5H16	111.3		

Таблица 2. Экспериментальные (ν_3 , см^{-1}) [1] и вычисленные значения частот (ν_p , см^{-1}) и интенсивностей спектров ИК ($I_{\text{ИК}}$, км/моль) и КР ($I_{\text{КР}}$, $\text{Å}^4/\text{а.е.м.}$) метионина

№ кол.	ν_3	ν_p	$I_{\text{ИК}}$	$I_{\text{КР}}$	Отнесение
1		33	1.2	1.3	τ
2		40	2.3	0.6	
3		67	0.2	0.7	
4		92	0.2	0.2	
5		124	0.9	0.3	ω
6		176	0.3	0.4	
7		195	0.04	0.4	
8		231	17.8	3.5	
9		254	12.6	1.9	
10		294	25.3	0.6	
11		335	0.3	2.8	
12		382	12.4	0.8	$\gamma(\text{C}_4\text{C}_5\text{S}_6), \gamma(\text{C}_3\text{C}_4\text{C}_5), \gamma(\text{N}_2\text{C}_3\text{C}_4), \gamma(\text{C}_3\text{C}_1\text{O}_9)$
13		517	19.1	0.6	
14		625	113.8	1.6	$\beta(\text{O}_9\text{H})$
15		643	9.1	0.6	$\gamma(\text{C}_1\text{C}_2\text{N}_2)$
16		704	0.9	15.4	$Q(\text{S}_6\text{C}_7)$
17		748	8.5	6.9	$Q(\text{S}_6\text{C}_5)$
18		755	14.1	3.4	$\beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
19		796	33.7	6.3	$Q(\text{C}_1\text{C}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
20		818	29.5	3.1	
21		879	128.6	2.8	$Q(\text{N}_2\text{C}_3)$
22		968	5.1	3.5	$Q(\text{C}_3\text{C}_4), \beta(\text{CH}_3)$
23		974	11.2	3.2	
24		1005	1.9	6.5	$\beta(\text{CH}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
25		1024	7.7	5.8	$Q(\text{C}_1\text{C}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
26		1058	2.4	2.2	$Q(\text{C}_4\text{C}_5)$
27		1110	46.4	3.3	$Q(\text{N}_2\text{C}_3), \beta(\text{C}_3\text{H})$
28	1117 (0.87)*	1136	225.5	1.5	$Q(\text{C}_1\text{O}_9)$
29		1149	9.9	2.2	$\beta(\text{C}_3\text{H}), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
30		1227	16.3	3.5	$\beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}, \beta(\text{NH}_2)$
31		1280	7.4	3.7	$\beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}, \beta(\text{O}_9\text{H})$
32		1288	0.7	4.8	
33		1315	6.9	5.8	
34		1359	4.8	1.1	
35	1369 (0.27)	1368	14.1	6.7	$\beta(\text{CH}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}, \beta(\text{NH}_2), \beta(\text{O}_9\text{H})$
36		1376	3.4	3.4	$\beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
37		1418	5.9	3.5	$\beta(\text{C}_3\text{H})$
38	1442 (0.19)	1468	9.4	12.2	$\beta(\text{CH}_3)$
39		1482	11.6	0.8	$\beta(\text{CH}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
40		1486	0.9	19.9	$\beta(\text{CH}_3), \beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
41		1498	7.1	1.8	$\beta(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
42	1630 (0.21)	1669	31.2	2.6	$\beta(\text{NH}_2)$
43	1777 (1.0)	1807	295.0	3.2	$Q(\text{C}_1\text{O}_8)$
44	2860 (0.1)	3029	15.9	261.9	$q(\text{CH}_3), q(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
45	2930 (0.31)	3032	34.7	75.3	$Q(\text{CH}_3)$
46		3038	18.2	27.4	$q(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
47		3067	13.8	77.3	$q(\text{C}_3\text{H}), q(\text{CH}_2)\{(C_4\text{H}), (C_5\text{H})\}$
48		3072	2.7	73.3	
49		3095	28.6	13.9	
50		3107	7.8	68.3	$Q(\text{CH}_3)$
51		3128	7.6	101.4	$Q(\text{CH}_3)$
52		3496	2.02	131.1	$Q(\text{NH}_2)$
53		3573	5.5	68.6	$Q(\text{NH}_2)$
54	3572 (0.34)	3740	58.8	155.9	$Q(\text{O}_9\text{H})$

Примечание. * – в скобках приведены относительные интенсивности.

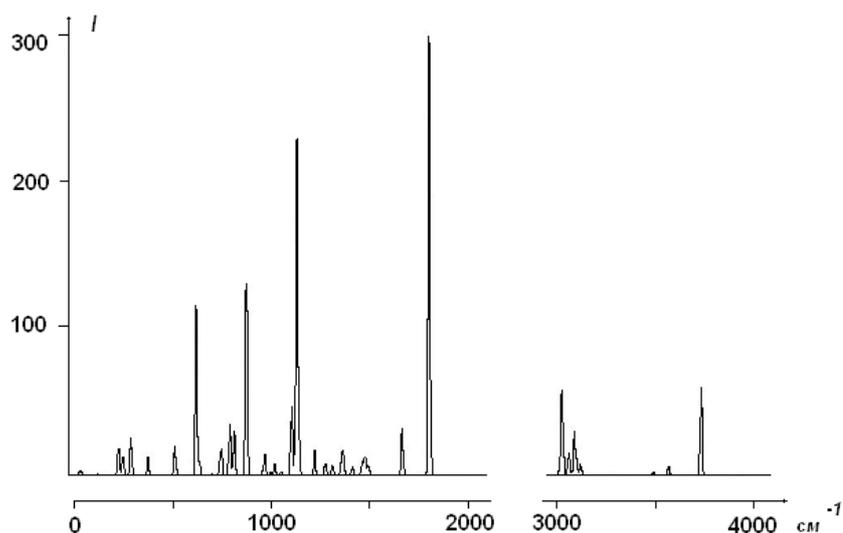


Рис. 2а. ИК спектр изолированного метионина

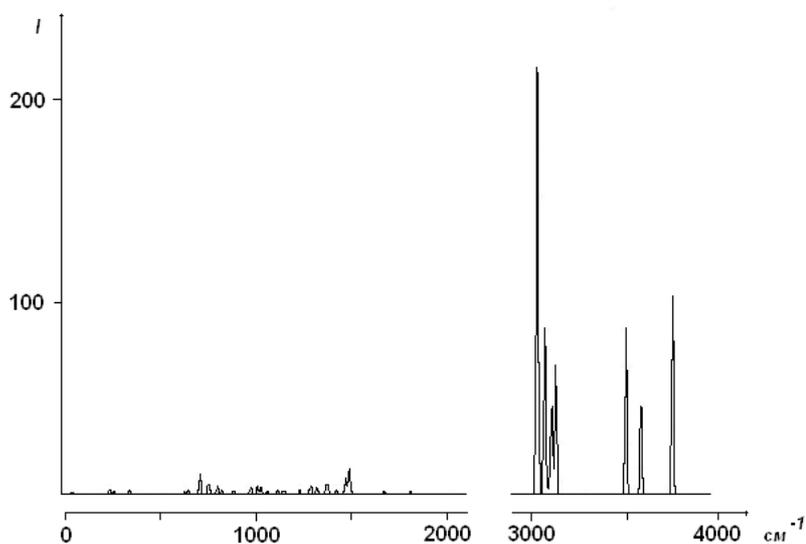


Рис. 2б. Спектр КР изолированного метионина

В спектрах КР в области 30-1800 cm^{-1} имеются три линии сильной интенсивности – это колебания с частотами 704, 1468 и 1486 cm^{-1} , формы которых отвечают соответственно изменению длины связи S_6C_7 и изменению валентных углов в группах CH_3 и CH_2 . Наиболее интенсивные линии в спектрах КР лежат в области валентных колебаний связей CH , NH и OH (колебания 44-54) (рис. 2б).

Сравнение вычисленных и экспериментальных полос поглощения показывает, что в области 30-

1800 cm^{-1} между ними наблюдается хорошее соответствие. Отличие частот в области валентных колебаний связей OH , NH и CH связано с ангармонизмом колебаний.

Выводы. В данной работе приведены результаты расчёта структуры и колебательных спектров изолированного метионина. Дана полная интерпретация колебательных спектров и определены характерные особенности проявления колебаний в ИК и КР спектрах.

Библиографический список

1. Linder R., Seefeld K., Vavra A., Kleinermanns K. // Chem. Phys. Lett. 2008. V. 453. P.1-6.
2. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 09. – Gaussian Inc., Pittsburgh PA, 2009.

CALCULATION AND INTERPRETATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF ISOLATED METHIONINE

D.M. Kadrov, I.G. Alekseev, G.N. Ten

Saratov State University

Kadrov Dmitriy Mihaylovich, student

Alekseev Igor Gennadievich, student

Ten Galina Nikolaevna, prof., Doctor of Ph. and Math. Sciences, E-mail: TenGN@info.sgu.ru

The calculation of the structure and vibrational spectra of isolated methionine has been performed using DFT method in harmonic approximation.

О ПРОГРАММЕ ОЗНАКОМИТЕЛЬНОЙ ПРАКТИКИ
СТУДЕНТОВ-ФИЗИКОВ БАКАЛАВРИАТА

А.С. Шаповалов, А.В. Сапрыгин, В.С. Кошелев

Саратовский государственный университет

Кафедра прикладной физики

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор*Сапрыгин Алексей Владимирович*, заведующий учебно-исследовательской лабораторией кафедры*Кошелев Василий Сергеевич*, д.т.н., профессорapd@sgu.ru, тел. 51-48-52

Представлены результаты разработки рабочей программы ознакомительной практики, соответствующей направлению подготовки бакалавров 011200 «Физика» и профилю подготовки «Прикладная физика».

Современный этап развития высшей школы в России характеризуется, прежде всего, постепенным переходом от системы специалитета к новой, соответствующей мировым требованиям двухуровневой системе образования - бакалавриату и магистратуре. Утверждение приказами Министерства образования и науки Российской Федерации новых федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования, регламентирующих подготовку выпускников квалификаций «бакалавр» (приказ № 711 от 08.12.2009) и «магистр» (приказ № 637 от 18.11.2009) вызывает необходимость создания основных образовательных программ и учебных планов, соответствующих всем требованиям указанных стандартов. Основная образовательная программа высшего профессионального образования и рабочий учебный план подготовки бакалавров по направлению 011200 «Физика» (профиль подготовки «Прикладная физика»), реализуемые на физическом факультете Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского, предусматривают разработку новых рабочих программ общих и специальных курсов и практик - ознакомительной, вычислительной, научно-исследовательской и производственной.

При разработке рабочих программ курсов и практик, которые будут осваивать современные студенты, обучающиеся по новым учебным планам бакалавриата в условиях компетентного подхода к высшему образованию, у авторов программ возникает комплекс методических вопросов и задач, связанных с необходимостью дальнейшего повышения уровня подготовки выпускников университета. Участники методического семинара кафедры прикладной физики СГУ, на котором обсуждались указанные программы, пришли к выводу, что отдельные программы, и в первую очередь, программы практик, целесообразно опубликовать. В данной статье приводятся результаты разработки рабочей программы ознакомительной практики, выполненной на кафедре прикладной физики СГУ. Программа соответствует требованиям федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования, положениям основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению 011200 «Физика» (профиль подготовки «Прикладная физика»), стандарта СГУ СТО 1.01 2005 «Учебные и производственные практики, порядок организации и проведения» и выполнена по установленной форме.

Анализ нормативных документов, приведённых выше, показывает, что в условиях двухуровневой системы образования роль практик и самостоятельной работы студентов существенно повышается. Ознакомительная практика студентов занимает важное место среди других практик в системе подготовки выпускников исследовательского университета. Именно она закрепляет убеждения студентов в правильности выбора направления и профиля подготовки, конкретизирует цели, задачи и содержание подготовки бакалавра, начинает формировать его перспективные научные интересы, первичные практические навыки и компетенции в сфере будущей профессиональной деятельности.

Подготовка бакалавра имеет комплексный, многоцелевой и междисциплинарный характер. И публикуемая программа ознакомительной практики является одной из первых попыток создания подобных программ для будущих бакалавров-физиков. Естественно, в дальнейшем она будет совершенствоваться. Очевидно, что это возможно лишь при максимально широком обсуждении разработанной программы. Это обстоятельство и является основной мотивацией подобных публикаций.

Программой предусматриваются следующие этапы практики: подготовительный (инструктаж по технике безопасности); лекционный (ознакомление с научными направлениями и инновационными проектами кафедры); практические занятия (ознакомление с компьютерными и информационными технологиями, применяемыми в научных исследованиях и производственно-технологических процессах); лабораторный (ознакомление с научно-исследовательскими и учебными лабораторными установками специальных практикумов учебно-исследовательской лаборатории (УИЛ) кафедры); научно-исследовательская работа по одному из научных направлений кафедры прикладной физики; обработка, анализ и обобщение информации, полученной в ходе ознакомительной практики; защита отчётов по ознакомительной практике.

Авторы выражают глубокую благодарность сотрудникам кафедры прикладной физики СГУ, а также доценту кафедры радиотехники и электродинамики, к.ф.-м.н. Наталии Георгиевне Олейник, принимавшим участие в обсуждении рабочей программы, за ценные методические рекомендации и помощь при создании программы.

Ниже приводится текст программы, одобренной на заседании кафедры прикладной физики и утверждённой проректором СГУ по учебно-методической работе.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ

"__" _____ 20__ г.

Программа учебной практики
Ознакомительная практика

Направление подготовки
011200 “Физика”

Профиль подготовки
Прикладная физика

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения - очная

Саратов
2011

1. Цель ознакомительной практики

Практика - это вид учебной деятельности, основным содержанием которой является выполнение практических учебных, учебно-исследовательских, научно-исследовательских, производственных, педагогических, творческих заданий на предприятии или в учреждении, в средствах массовой информации (СМИ), в структурном подразделении университета (кафедре, институте и т.д.), соответствующем характеру профессиональной деятельности будущего выпускника. Она позволяет эффективно сочетать теоретические знания с практической подготовкой и нацелена на приобретение студентам умений и навыков по избранному направлению и профилю.

Практика студентов является составной частью подготовки по образовательной программе высшего профессионального образования.

Целью проведения ознакомительной практики является закрепление и углубление основ теоретической подготовки обучающегося и приобретение им первичных практических навыков и компетенций в сфере профессиональной деятельности.

Сферой профессиональной деятельности выпускников являются: государственные и частные научно-исследовательские и производственные организации, связанные с решением физических проблем; учреждения системы высшего и среднего профессионального образования, среднего общего образования.

Область профессиональной деятельности выпускников по профилю подготовки «Прикладная физика» включает научно-исследовательские центры, институты РАН, промышленные лаборатории, государственные органы управления, образовательные учреждения и организации различных форм собственности, организации индустрии и бизнеса, осуществляющие

- разработку и внедрение радиоэлектронных, акустоэлектронных оптоэлектронных и квантовых приборов; альтернативных источников энергии;
- моделирование радиоэлектронных, оптических, теплофизических, аэро- и гидродинамических процессов;
- разработку и применение спектроскопических, радиофизических и теплофизических методов исследования вещества.

Объектами профессиональной деятельности бакалавров по профилю подготовки «Прикладная физика» являются радио, акусто- и оптоэлектронные системы (в том числе импульсные), квантовые приборы, альтернативные источники энергии; молекулярные структуры вещества, обладающие высокой биологической активностью, в частности основания нуклеиновых кислот и аминокислоты, а также другие биосистемы, широко применяемые в области информационных технологий, здравоохранения и экологии.

2. Задачи ознакомительной практики

- Ознакомление с содержанием основных работ и исследований, выполняемых на кафедре прикладной физики СГУ и в учебно-исследовательской лаборатории «Прикладная физика»;
- закрепление теоретических знаний, полученных при изучении базовых дисциплин;
- приобретение специальных навыков, необходимых для обработки, анализа и синтеза физической информации;
- освоение методов наблюдения, измерения и контроля параметров физических процессов.

В соответствии с профилем подготовки:

- принятие участия в конкретном исследовании;
- усвоение приемов, методов и способов обработки, представления и интерпретации результатов проведенных практических исследований;
- приобретение практических навыков в будущей профессиональной деятельности.

Цели и задачи ознакомительной практики отвечают задачам профессиональной подготовки бакалавров по направлению 011200 «Физика» по освоению методов научных исследований и их применению в инновационной деятельности.

3. Место ознакомительной практики в структуре ООП бакалавриата

«Основная образовательная программа высшего профессионального образования» бакалавриата профиля подготовки «Прикладная физика» направления 011200 «Физика» предусматривает учебные (ознакомительную, вычислительную, научно-исследовательскую) и производственную практики.

Ознакомительная практика бакалавров 1 курса (2 семестр) является обязательной и представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально-практическую подготовку обучающихся.

Ознакомительная практика интегрирована в систему специальных курсов и практик, разработанных на кафедре прикладной физики, имеющих целью подготовку бакалавров профиля «Прикладная физика» направления 011200 «Физика» к следующим видам профессиональной деятельности:

- научно-исследовательская;
- научно-инновационная;
- организационно-управленческая;
- педагогическая (в установленном порядке в соответствии с полученной дополнительной квалификацией) и просветительская деятельность.

Подготовка выпускника по профилю «Прикладная физика» имеет комплексный, многоцелевой, междисциплинарный характер, обеспечивает возможность деятельности, связанной с решением прикладных и фундаментальных задач современной радио-, акусто- и оптоэлектроники, аэро- и гидродинамики, спектроскопии, теплофизики, квантовой химии и биохимии.

В результате прохождения ознакомительной практики студент закрепляет и углубляет свою теоретическую подготовку и приобретает первичные практические навыки и компетенции в сфере будущей профессиональной деятельности. Полученные знания и практические навыки необходимы студентам и для изучения последующих курсов - “Электричество и магнетизм”, “Физика в современном мире и перспективы развития науки в 21 веке”, “Прикладная аэродинамика”, “Прикладная гидродинамика” и других, а так же успешного прохождения в будущем вычислительной практики.

Для прохождения ознакомительной практики необходимы знания основ механики и молекулярной физики, методов математического анализа и программирования.

4. Формы проведения ознакомительной практики

Ознакомительная практика проводится в форме лабораторных, практических и лекционных занятий с использованием современных образовательных и информационных технологий. Разделом практики является научно-исследовательская работа студентов по одному из научных направлений кафедры прикладной физики.

5. Место и время проведения ознакомительной практики

Ознакомительная практика бакалавров, обучающихся по профилю подготовки «Прикладная физика» направления 011200 “Физика” проводится в учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”. В соответствии с “Основной образовательной программой высшего профессионального образования” длительность и сроки проведения ознакомительной практики – 2 недели (29 июня - 12 июля).

6. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения ознакомительной практики

- способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ОК-1);
- способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии (ОК-3);
- способностью добиваться намеченной цели (ОК-6);
- способностью использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ПК-1);
- способностью применять на практике базовые профессиональные навыки (ПК-2);
- способностью эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование (ПК-3);
- способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-4);
- способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-5);
- способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-6);
- способностью формировать суждения о знании и последствиях своей профессиональной деятельности с учётом специальных, правовых, этических и природоохранных аспектов (ПК-7);
- способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований (ПК-8);
- способностью понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования (ПК-9);
- способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований (ПК-10).

7. Структура и содержание ознакомительной практики

Общая трудоемкость ознакомительной практики составляет 3 зачетные единицы 108 часов.

№ п/п	Разделы (этапы) практики	Виды учебной работы на практике, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Формы текущего контроля
		Лек	Прак	Лаб	НИР	Сам	
1	Подготовительный этап. Инструктаж по технике безопасности	2					
2	Лекционный этап. Ознакомление с научными направлениями и инновационными проектами кафедры.	12					Собеседование.
3	Анализ информации, полученной на лекцион-					6	

	ном этапе						
4	Практические занятия (семинары). Ознакомление с компьютерными и информационными технологиями, применяемыми в научных исследованиях и производственно-технологических процессах.		18				Собеседование
5	Анализ информации, полученной на практических занятиях (семинарах)					6	
6	Лабораторный (экспериментальный) этап. Ознакомление с научно-исследовательскими и учебными лабораторными установками специальных практикумов УИЛ кафедры.			18			Собеседование
7	Анализ информации, полученной на лабораторном этапе					8	
8	Научно-исследовательская работа				18		Собесед-ие
9	Анализ результатов научно-исследовательской работы.					8	
10	Обработка, анализ и обобщение информации, полученной в ходе ознакомительной практики. Подготовка отчета по практике.					8	
11	Защита отчётов по ознакомительной практике.	4					Зачёт
	ИТОГО – 108 часов	18	18	18	18	36	

Содержание ознакомительной практики

1. Подготовительный этап. Инструктаж по технике безопасности
 - Меры обеспечения безопасности при работе на лабораторных установках спецпрактикумов учебно-исследовательской лаборатории (УИЛ) кафедры.
 - Меры обеспечения безопасности при работе с персональным компьютером.
 - Место, время и порядок прохождения ознакомительной практики.
 - Требования, предъявляемые к отчёту о практике.
2. Лекционный этап. Ознакомление с научными направлениями и инновационными проектами кафедры.
 - 2.1. Разработка и применение радиоэлектронных и квантовых приборов и систем.
 - Физические основы работы и применение вакуумных электронных приборов.
 - Физические основы работы и применение твёрдотельных электронных приборов.
 - Физические основы работы и применение квантовых приборов.
 - Флуктуационные процессы в вакуумных, твёрдотельных электронных и квантовых приборах.
 - Элементная база, физические основы работы и применение импульсных, аналоговых и цифровых радиоэлектронных систем.
 - 2.2. Теплофизика радиоэлектронных и квантовых приборов и систем.
 - Теплоэнергетические процессы в вакуумных радиоэлектронных приборах и устройствах.
 - Теплоэнергетические процессы в твёрдотельных радиоэлектронных приборах и устройствах.
 - Тепловая оптимизация конструкций вакуумных радиоэлектронных приборов и систем.
 - Тепловая оптимизация конструкций твердотельных радиоэлектронных приборов и систем.
 - Вопросы надежности и долговечности вакуумных и твёрдотельных радиоэлектронных и квантовых приборов
 - 2.3. Разработка и применение акусто- и оптоэлектронных приборов и систем.
 - Физические основы работы и применение акустоэлектронных приборов.
 - Физические основы работы и применение оптоэлектронных приборов.
 - Физические основы работы и применение акустооптических приборов и устройств. Акустооптические модуляторы, дефлекторы, анализаторы спектра.
 - Оптическая обработка информации.
 - 2.4. Прикладная спектроскопия.
 - Теория оптического излучения.
 - Оптическая спектроскопия.
 - Молекулярная спектроскопия.
 - Моделирование оптических процессов.
 - Молекулярная динамика.
 - Применение колебательной и электронной спектроскопии для анализа физико-химических свойств вещества.
 - Прикладные задачи квантовой химии.
 - 2.5. Прикладная аэро- и гидродинамика. Альтернативная энергетика.
 - Прикладные аэродинамика и гидродинамика.

Альтернативная энергетика: ветроэнергетика, энергия океанов и рек, геотермальная энергетика, биоэнергетика, энергия Солнца. Аккумуляция и преобразование энергии.

2.6. Методы обработки результатов эксперимента.

3. Анализ информации, полученной на лекционном этапе (Проводится самостоятельно).

4. Практические занятия (семинары).

Ознакомление с компьютерными и информационными технологиями, применяемыми в научных исследованиях и производственно-технологических процессах.

Применение на практике методов обработки результатов эксперимента.

5. Анализ информации, полученной на практических занятиях. (Проводится самостоятельно).

6. Лабораторный (экспериментальный) этап.

Ознакомление с научно-исследовательскими и учебными лабораторными установками специальных практикумов УИЛ кафедры.

7. Анализ информации, полученной на лабораторном этапе. (Проводится самостоятельно).

8. Научно-исследовательская работа

Проведение обзоров научно-технической литературы по научным направлениям кафедры, поиск, обработка и систематизация литературного материала, используя современные возможности сети INTERNET. Проведение научно-исследовательских расчётов по тематике научных направлений кафедры. Экспериментальные исследования, связанные с научными направлениями кафедры.

9. Анализ результатов научно-исследовательской работы. (Проводится совместно с руководителем практики).

10. Обработка, анализ и обобщение информации, полученной в ходе ознакомительной практики. Подготовка отчета о практике.

8. Образовательные и научно-исследовательские технологии, используемые на ознакомительной практике

При проведении ознакомительной практики используются и традиционные технологии обучающего обучения, предполагающие передачу информации в готовом виде. К ним относятся: аудиторные занятия в форме лекций с использованием лекционных демонстрационных опытов; практические занятия (семинары), где студенты решают задачи, используя современное программное обеспечение персональных компьютеров; лабораторные занятия в учебных практикумах учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”; самостоятельная работа с литературой в научной библиотеке университета; самостоятельная работа в компьютерном классе с использованием доступа к сети Internet и программного обеспечения для работы с графической, аудио- и видеоинформацией. Использование традиционных технологий необходимо и обеспечивает высокий уровень профессионального образования студентов, регулярно посещающих аудиторные занятия. Они также формируют умения систематизировать, обобщать, извлекать из учебно-методической литературы значимую информацию и т.п.

В ходе ознакомительной практики используются и новые образовательные технологии обучения: демонстрационные программы; информационно - справочные системы; электронные учебники. Данные технологии обеспечивают более наглядную подачу материала за счет мультимедиа. Использование электронных учебников позволяет разгрузить преподавателя и увеличить заинтересованность студентов в учебе. При работе с мультимедийными программами обеспечивается обратная связь, осуществляется быстрый поиск нужной информации, экономится время при многократных обращениях к гипертекстовым объяснениям; наряду с кратким текстом, объяснения сопровождаются демонстрацией анимационных эффектов и синхронным озвучиванием.

Разделом практики является научно-исследовательская работа обучающегося. Используя консультации и помощь своего научного руководителя, студент

- участвует в проведении научных исследований или выполнении технических разработок по одному из научных направлений кафедры прикладной физики и учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”;

- изучает специальную литературу и другую научно-техническую информацию по теме (заданию), осуществляет её сбор, анализ и систематизацию;

- составляет отчеты (разделы отчета) по теме или её этапу;

- участвует в написании статей в научные журналы по теме научно-исследовательской работы;

- выступает с докладом на конференции.

9. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов на ознакомительной практике

9.1 Вопросы для самостоятельной работы студентов

1. Какие типы радиоэлектронных и квантовых приборов вам известны ?

2. Принцип действия клистрона.

3. Принцип действия ЛБВ.

4. Принцип действия магнетрона.

5. Принцип действия биполярного транзистора.

6. Принцип действия полевого транзистора.

7. Принцип действия диода Ганна.

8. Принцип действия ЛПД.

9. Принцип действия лазера.
10. Принцип действия мазера.
11. Что представляет собой аналоговый сигнал ?
12. Как формируются аналоговые сигналы ?
13. Что представляет собой импульсный сигнал ?
14. Как формируются импульсные сигналы ?
15. Что представляет собой цифровой сигнал ?
16. Как формируются цифровые сигналы ?
17. Какие флуктуационные процессы протекают в электронных приборах ?
18. Какова физическая природа дробовых шумов в электронных приборах ?
19. Какова физическая природа тепловых шумов в электронных приборах ?
20. Что представляет собой фликкер-шум в электронных приборах ?
21. Какие модели фликкер-шума вам известны ?
22. В каких элементах электровакуумных электронных приборах протекают тепловые процессы ?
23. Как влияют тепловые процессы на работу электровакуумных электронных приборов ?
24. Как влияют тепловые процессы на работу твёрдотельных электронных приборов ?
25. Что такое тепловая оптимизация конструкций вакуумных радиоэлектронных приборов и систем.
26. Что такое тепловая оптимизация конструкций твердотельных радиоэлектронных приборов и систем.
26. Какова связь надежности и долговечности вакуумных и твёрдотельных радиоэлектронных и квантовых приборов с тепловыми процессами ?
27. Что представляет собой акустоэлектронный прибор ?
28. Что представляет собой акустооптический прибор ?
29. Принцип действия акустооптического модулятора.
30. Принцип действия акустооптического дефлектора.
31. Принцип действия акустооптического анализатора спектра.
32. Что представляет собой оптоэлектронный прибор ?
31. Принцип действия акустооптического модулятора.
32. Что представляет собой оптическая обработка информации ?
33. Принцип действия спектроскопа.
34. Какие задачи стоят перед спектроскопией ?
35. Чем отличаются оптическая и молекулярная спектроскопия ?
35. Что изучает прикладная аэро- и гидродинамика.
36. Назовите основные направления развития альтернативной энергетики.
37. Какие задачи решает ветроэнергетика ?
38. Какие задачи решает биоэнергетика ?
39. Какие задачи решает геотермальная энергетика ?
40. Что значит «корректная обработка результатов эксперимента» ?

9.2 Методические рекомендации студентам для составления отчета о прохождении ознакомительной практики

Отчёт о прохождении практики составляется в соответствии с указаниями программы практики и дополнительными указаниями руководителя практики. В отчёте освещаются следующие вопросы:

1. Общие сведения о базе практики, о порядке и сроках её проведения.
2. Тема, цель и задачи работ (исследований).
3. Программы теоретических, лабораторных и практических работ.
4. Методы проведения работ (исследований), используемое оборудование.
5. Научно-техническое содержание основных выполненных работ практики с предварительными выводами о них.
6. Подробное сообщение о содержании и выполнении индивидуального задания (исследования).
7. Краткое сообщение о проведенных экскурсиях.
8. Заключение (общая оценка результатов практики).

10. Формы промежуточной аттестации (по итогам ознакомительной практики)

В соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки 011200 «Физика» (квалификация «бакалавр») аттестация по итогам ознакомительной практики включает защиту отчета по практике. По результатам аттестации выставляется зачет.

11. Учебно-методическое и информационное обеспечение ознакомительной практики

Основная литература

1. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Учеб. пособие: в 5-ти т. – М.: ФИЗМАТЛИТ. Т.1: Механика. – 2006. – 560 с.; Т.2: Термодинамика и молекулярная физика. – 2006. – 544 с.; Т.3: Электричество. – 2009. – 646 с.; Т.4: Оптика. – 2006. – 792 с.; Т.5: Атомная и ядерная физика. – 2006. – 784 с. [учебное пособие для вузов, рекомендовано МО РФ]

2. Савельев И.В. Курс физики. Учеб. пособие: в 3-х т. – СПб.; М.; Краснодар: Лань. Т.1: Механика. Молекулярная физика. – 2008. – 354 с.; Т.2: Электричество. Волны. Оптика. – 2008. – 500 с.; Т.3: Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – 2008. – 406 с. [учебное пособие для вузов, допущено НМС по физике МОиН РФ]
3. Д.И.Трубецков, А.Е.Храмов, Лекции по СВЧ электронике для физиков, т. 1,2. Изд. Физматлит., 2003, 2004.

Дополнительна литература

1. Основы современной энергетики. В 2-х томах. Под общей редакцией чл.-корр. РАН Е.В. Аметистова . Москва: Издательский дом МЭИ, 2008.
2. Демирчян К.С., Нейман Л.Р. и др. Теоретические основы электротехники. В 3-х т. 4 изд. -СПб., «Питер», 2003 г.
3. Хохлов А.В. Теоретические основы радиоэлектроники. Саратов, изд. Саратовского госуниверситета, 2005. 256с.
4. Ахманов С.А. Статистическая радиофизика и оптика. Случайные колебания и волны в линейных системах. Физматгиз. 2010 год.
5. V.V.Petrov. "Holographic Video. Acoustooptical approach", Saratov, "GosUNZ" -Publishing-house, 2002, 77 pages.
6. Каштанов В.В., Сапрыгин А.В. Импульсы двойной формирующей линии // Электротехника, 2001, - № 8, - С. 16 – 20.
7. V.Petrov, 3-D Holographic Video Image Forming by Acoustooptical Method Journal of the SID., 13/4, 2005, p.1- 4.
8. Лозовский В.Н. и др. Нанотехнология в электронике. С.Пет., Москва, 2008.
9. Карслоу Г.,Егер Д. Теплопроводность. М.: Наука, 2002.
10. Блох А.Г. Основы теплообмена излучения. М.: Госэнергоиздат, 2002.
11. Адрианов В.Н. Основы радиационного и сложного теплообмена. М.: Энергия, 2003.
12. Иццоки Я.С., Овчинников К.И. Импульсные и цифровые устройства. М., «Сов. радио», 1973 г.
13. Мартинес-Дуарт Д.М., Нанотехнология для микро - и оптоэлектроники, М., Техносфера, 2007.
14. Игумнов Д.В., Костюнина Г.П., Громов И.С., Элементы твердотельной электроники. Изд. СГУ., 1986.
15. Рябов С.Г., Тронкин Г.Н., Усольцев И.Ф. Приборы квантовой электроники. М.,Связь, 1985.
16. Конспект лекций «Физические основы работы электронных приборов СВЧ». <http://library.sgu.ru/uchlit/16.pdf>

12. Материально - техническое обеспечение ознакомительной практики

1. Лабораторные и компьютерные практикумы учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”, её экспериментальное оборудование для учебной и научно-исследовательской работы.
2. Учебная и монографическая литература.
3. Научные статьи.
4. Электронные лекции (презентации).
5. Мультимедийное оборудование.
6. Компьютерные демонстрационные программы.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций и Примерной ООП ВПО по направлению 011200 “Физика” и профилю подготовки “Прикладная физика”.

Авторы

профессор, д.ф.-м.н. _____ А.С. Шаповалов

заведующий УИЛ “Прикладная физика” _____ А.В. Сапрыгин

Программа одобрена на заседании кафедры прикладной физики
от 10.02.2011 года, протокол № 322.

Зав. кафедрой прикладной физики, профессор, д.ф.-м.н. ____ А.С. Шаповалов

Декан физического факультета профессор, д.ф.-м.н. _____ В.М. Аникин

ON THE PROGRAM OF THE INTRODUCTORY PRACTICE
FOR BACHELOR PHYSICS STUDENTS
A.S. Shapovalov, A.V. Saprygin, V.S. Koshelev
Saratov State University

The results of development of the work program of the introductory practice which corresponds to the bachelor direction training 011200 «physics» and profile of learning «applied physics» is represented.

О ПРОГРАММЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПРАКТИКИ
СТУДЕНТОВ-ФИЗИКОВ БАКАЛАВРИАТА

А.С. Шаповалов, А.В. Сапрыгин, В.С. Кошелев
Саратовский государственный университет
кафедра прикладной физики

Шаповалов Александр Степанович, д.ф.-м.н., профессор
Сапрыгин Алексей Владимирович, заведующий учебно-исследовательской лабораторией кафедры
Кошелев Василий Сергеевич, д.т.н., профессор
apd@sgu.ru, тел. 51-48-52

Представлены результаты разработки рабочей программы вычислительной практики, соответствующей направлению подготовки бакалавров 011200 «Физика» и профилю подготовки «Прикладная физика».

В данной работе приводятся результаты разработки рабочей программы вычислительной практики, выполненной на кафедре прикладной физики СГУ. Программа соответствует требованиям федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования, положениям основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению 011200 «Физика» (профиль подготовки «Прикладная физика»), стандарта СГУ СТО 1.01 2005 «Учебные и производственные практики, порядок организации и проведения» и выполнена по установленной форме.

Широкое применение вычислительной техники, программного обеспечения и информационных технологий в современных научных исследованиях придаёт особую роль вычислительной практике студентов в системе подготовки выпускников исследовательского университета. Она не только закрепляет знания, полученные на лекциях и семинарских занятиях, навыки их практического использования, но и расширяет представления о возможностях современной компьютерной техники в области моделирования и управления физическими и технологическими процессами. Разработанная рабочая программа дополняет приобретённые знания по таким вопросам как языки программирования; графические редакторы; современные пакеты прикладных программ; алгоритмы и программы реализации основных численных методов; специализированные программы прикладной физики; спектральный, статистический, корреляционный и регрессивный анализ.

Авторы выражают глубокую благодарность сотрудникам кафедры прикладной физики СГУ, представившим свои соображения о содержании рабочей программы и принявшим участие в её обсуждении.

Ниже приводится текст программы, одобренной на заседании кафедры прикладной физики и утверждённой проректором СГУ по учебно-методической работе.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского
Физический факультет

УТВЕРЖДАЮ

_____ 20__ г.

Программа учебной практики
Вычислительная практика

Направление подготовки
011200 “Физика”

Профиль подготовки
Прикладная физика

Квалификация (степень) выпускника
Бакалавр

Форма обучения - очная

Саратов
2011

1. Цель вычислительной практики

Практика - это вид учебной деятельности, основным содержанием которой является выполнение практических учебных, учебно-исследовательских, научно-исследовательских, производственных, педагогических, творческих заданий на предприятии или в учреждении, в средствах массовой информации (СМИ), в структурном подразделении университета (кафедре, институте и т.д.), соответствующем характеру профессиональной деятельности будущего выпускника. Она позволяет эффективно сочетать теоретические знания с практической подготовкой и нацелена на приобретение студентам умений и навыков по избранным направлениям и профилю.

Практика студентов является составной частью подготовки по образовательной программе высшего профессионального образования.

Целью проведения вычислительной практики является закрепление и углубление основ теоретической и практической подготовки обучающегося в области вычислительной математики, закрепление у него навыков применения численных методов и использования современных пакетов прикладных программ для решения физических задач, приобретение им первичных практических навыков и компетенций в сфере профессиональной деятельности.

Сферой профессиональной деятельности выпускников являются: государственные и частные научно-исследовательские и производственные организации, связанные с решением физических проблем;

учреждения системы высшего и среднего профессионального образования, среднего общего образования.

Область профессиональной деятельности выпускников по профилю подготовки «Прикладная физика» включает научно-исследовательские центры, институты РАН, промышленные лаборатории, государственные органы управления, образовательные учреждения и организации различных форм собственности, организации индустрии и бизнеса, осуществляющие

- разработку и внедрение радиоэлектронных, акустоэлектронных оптоэлектронных и квантовых приборов; альтернативных источников энергии;

- моделирование радиоэлектронных, оптических, теплофизических, аэро- и гидродинамических процессов;

- разработку и применение спектроскопических, радиофизических и теплофизических методов исследования вещества.

Объектами профессиональной деятельности бакалавров по профилю подготовки «Прикладная физика» являются радио-, акусто- и оптоэлектронные системы (в том числе импульсные), квантовые приборы, альтернативные источники энергии; молекулярные структуры вещества, обладающие высокой биологической активностью, в частности основания нуклеиновых кислот и аминокислоты, а также другие биосистемы, широко применяемые в области информационных технологий, здравоохранения и экологии.

2. Задачи вычислительной практики

- закрепление теоретических и практических знаний, полученных при изучении базовых дисциплин;
- приобретение специальных навыков, необходимых для обработки, анализа и синтеза физической информации;

- закрепление навыков работы с компьютером;

- приобретение способности использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, развитие навыков использования программных средств и навыков работы в компьютерных сетях; приобретение умения создавать базы данных и использовать ресурсы Интернет;

- закрепление навыков программирования, моделирования физических процессов, численного решения физических задач;

В соответствии с профилем подготовки:

- приобретение способности пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации;

- усвоение приемов, методов и способов обработки, представления и интерпретации результатов проведенных практических исследований;

- приобретение практических навыков в будущей профессиональной деятельности.

Цели и задачи вычислительной практики отвечают задачам профессиональной подготовки бакалавров по направлению 011200 «Физика» по освоению методов научных исследований и их применению в инновационной деятельности.

3. Место вычислительной практики в структуре

ООП бакалавриата

«Основная образовательная программа высшего профессионального образования» бакалавриата профиля подготовки «Прикладная физика» направления 011200 «Физика» предусматривает учебные (ознакомительную, вычислительную, научно-исследовательскую) и производственную практики.

Вычислительная практика бакалавров 2 курса (4 семестр) является обязательной и представляет собой вид учебных занятий, непосредственно ориентированных на профессионально-практическую подготовку обучающихся.

Вычислительная практика интегрирована в систему специальных курсов и практик, разработанных на кафедре прикладной физики, имеющих целью подготовку бакалавров профиля “Прикладная физика” направления 011200 “Физика” к следующим видам профессиональной деятельности:

научно-исследовательская;
научно-инновационная;
организационно-управленческая;
педагогическая (в установленном порядке в соответствии с полученной дополнительной квалификацией) и просветительская деятельность.

Подготовка выпускника по профилю «Прикладная физика» имеет комплексный, многоцелевой, междисциплинарный характер, обеспечивает возможность деятельности, связанной с решением прикладных и фундаментальных задач современной радио-, акусто- и оптоэлектроники, аэро- и гидродинамики, спектроскопии, теплофизики, квантовой химии и биохимии.

В результате прохождения вычислительной практики студент закрепляет и углубляет свою теоретическую подготовку и приобретает практические навыки и компетенции в сфере профессиональной деятельности. Полученные знания и практические навыки необходимы студентам и для изучения последующих курсов - “Методы математической физики”, “Молекулярная динамика”, “Анализ нестационарных процессов в системах прикладной физики”, “Техника научных презентаций” и других, а так же успешного прохождения в будущем научно-исследовательской практики.

Для прохождения вычислительной практики необходимы знания курсов общей физики, курсов “Решение физических задач с помощью систем компьютерной математики”, “Парадигмы программирования и физические задачи”, “Информационные технологии в физике”, “Численные методы и математическое моделирование”, методов математического анализа и программирования, теории функций комплексного переменного, дифференциальных и интегральных уравнений.

4. Формы проведения вычислительной практики

Вычислительная практика проводится в форме практических, лекционных и лабораторных занятий с использованием современных образовательных и информационных технологий. Разделом практики является научно-исследовательская работа студентов по одному из научных направлений кафедры прикладной физики.

5. Место и время проведения вычислительной практики

Вычислительная практика бакалавров, обучающихся по профилю подготовки «Прикладная физика» направления 011200 “Физика” проводится в учебно-исследовательской лаборатории (УИЛ) “Прикладная физика”. В соответствии с “Основной образовательной программой высшего профессионального образования” длительность и сроки проведения вычислительной практики – 2 недели (29 июня - 12 июля).

6. Компетенции обучающегося, формируемые в результате прохождения вычислительной практики

- способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области математики и естественных наук (ОК-1);
- способностью приобретать новые знания, используя современные образовательные и информационные технологии (ОК-3);
- способностью собирать, обрабатывать и интерпретировать с использованием современных информационных технологий данные, необходимые для формирования суждений по соответствующим социальным, научным и этическим проблемам (ОК-4);
- способностью добиваться намеченной цели (ОК-6);
- способностью владеть основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, иметь навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-12);
- способность использовать в познавательной и профессиональной деятельности навыки работы с информацией из различных источников (ОК-16);
- способностью использовать в познавательной и профессиональной деятельности базовые знания в области информатики и современных информационных технологий, навыки использования программных средств и навыков работы в компьютерных сетях; умение создавать базы данных и использовать ресурсы Интернет (ОК-17);
- способностью использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ПК-1);
- способностью применять на практике базовые профессиональные навыки (ПК-2);
- способностью эксплуатировать современную физическую аппаратуру и оборудование (ПК-3);
- способностью применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов физических исследований (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-5);
- способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации (в соответствии с профилем подготовки) (ПК-6);
- способностью понимать и излагать получаемую информацию и представлять результаты физических исследований (ПК-10).

7. Структура и содержание вычислительной практики

Общая трудоемкость вычислительной практики составляет 3 зачетные единицы 108 часов.

№ п/п	Разделы (этапы) практики	Виды учебной работы на практике, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Формы текущего контроля
		Лек	Прак	Лаб	НИР	Сам	
1	Подготовительный этап. Инструктаж по технике безопасности	2					
2	Лекционный этап. Ознакомление с основными характеристиками и возможностями современных персональных компьютеров, языками программирования, алгоритмами вычислений, современными пакетами прикладных программ, графическими редакторами, специальными программами.	12					Собеседование.
3	Анализ информации, полученной на лекционном этапе					6	
4	Практические занятия (семинары). Ознакомление с компьютерными и информационными технологиями, применяемыми в научных исследованиях.		18				Собеседование
5	Анализ информации, полученной на практических занятиях (семинарах)					6	
6	Лабораторный этап. Освоение учебно-исследовательских лабораторных установок с автоматизированными системами измерений и обработки экспериментальных результатов в специальных практикумах УИЛ кафедры.			18			Собеседование
7	Анализ информации, полученной на лабораторном этапе					8	
8	Научно-исследовательская работа				18		Собеседование
9	Анализ результатов научно-исследовательской работы.					8	
10	Обработка, анализ и обобщение информации, полученной в ходе вычислительной практики. Подготовка отчета о практике.					8	
11	Защита отчетов о практике.	4					Зачёт
	ИТОГО – 108 часов	18	18	18	18	36	

Содержание вычислительной практики

1. Подготовительный этап. Инструктаж по технике безопасности
 - Меры обеспечения безопасности при работе с персональным компьютером (ПК).
 - Место, время и порядок прохождения вычислительной практики.
 - Требования, предъявляемые к отчету о практике.
2. Лекционный этап.
 - Раздел 1. Введение. Типы и возможности современных персональных ЭВМ
 - Раздел 2. Языки программирования, графические редакторы и современные пакеты прикладных программ, специальные программы.
 - 2.1. Turbo Basic, Visual Basic.
 - 2.2. Turbo Pascal.
 - 2.3. Grafer.
 - 2.4. Surfer.
 - 2.5. MathCAD.
 - 2.6. Matlab.
 - 2.7. Electronics Workbench
 - 2.8. Multisim.
 - 2.9. MicroCap.
 - Раздел 3. Алгоритмы и программы элементарных вычислений.
 - 3.1. Операции с действительными числами.
 - 3.2. Операции и функции с комплексными числами и переменными.

- 3.3. Вычисление степенных многочленов и дробно-рациональных функций.
 - 3.4. Вычисление ортогональных многочленов.
 - 3.5. Операции с матрицами.
 - 3.6. Вычисление факториалов и комбинаторика.
 - 3.7. Преобразование координат и векторный анализ.
- Раздел 4. Алгоритмы и программы реализации основных численных методов решения прикладных задач.
- 4.1. Решение систем линейных уравнений.
 - 4.2. Интерполяция и экстраполяция.
 - 4.3. Решение нелинейных и трансцендентных уравнений.
 - 4.4. Решение систем нелинейных уравнений.
 - 4.5. Решение алгебраических уравнений с действительными и комплексными коэффициентами.
 - 4.6. Поиск экстремумов функций одной и множества переменных.
 - 4.7. Численное дифференцирование и вычисление коэффициентов чувствительности.
 - 4.8. Вычисление определённых интегралов.
 - 4.9. Вычисление определённых интегралов специального вида.
 - 4.10. Решение систем дифференциальных уравнений.
 - 4.11. Гармонический синтез.
 - 4.12. Вычисление собственных значений и векторов матриц.
- Раздел 5. Спектральный, статистический, корреляционный и регрессивный анализ.
- 5.1. Спектральный анализ на основе дискретного преобразования Фурье.
 - 5.2. Специальные виды спектрального анализа.
 - 5.3. Статистический анализ и подготовка гистограмм.
 - 5.4. Реализация метода Монте-Карло.
 - 5.5. Корреляционный анализ.
 - 5.6. Регрессионный анализ (приближение функций по методу наименьших квадратов).
- Раздел 6. Вычисление специальных функций
- 6.1. Методы вычисления специальных функций.
 - 6.2. Интегральная показательная функция.
 - 6.3. Интегральные синус и косинус.
 - 6.4. Гамма-функция.
 - 6.5. Функции Бесселя.
 - 6.6. Интеграл вероятности.
- Раздел 7. Специализированные программы прикладной физики.
- 7.1. Специализированные программы радиоэлектроники. Расчёт индуктивных элементов. Расчёт ёмкостных элементов. Расчёт линий передачи и задержки. Расчёт усилителей. Расчёт генераторов. Расчёт активных фильтров. Расчёт нелинейных электронных устройств. Расчёт генерирующих, формирующих и преобразующих импульсных устройств.
 - 7.2. Специализированные программы теплофизики электронных устройств.
 - 7.3. Специализированные программы акустоэлектроники, акустооптики и оптоэлектроники.
 - 7.4. Расчёты в термодинамике.
 - 7.5. Расчёты в статистической физике.
 - 7.6. Расчёты в прикладной оптике и спектроскопии.
- 3 этап. Анализ информации, полученной на лекционном этапе (Проводится самостоятельно под руководством руководителя практики)
- 4 этап. Практические занятия (семинары).
- Ознакомление с компьютерными и информационными технологиями, применяемыми в научных исследованиях и производственно-технологических процессах
- Применение на практике методов обработки результатов эксперимента.
- 5 этап. Анализ информации, полученной на практических занятиях. (Проводится самостоятельно)
6. Лабораторный этап. Освоение учебно-исследовательских лабораторных установок с автоматизированными системами измерений и обработки экспериментальных результатов в специальных практикумах УИЛ кафедры.
- 7 этап. Анализ информации, полученной на лабораторном этапе
- 8 этап. Научно-исследовательская работа
- Проведение обзоров научной-технической литературы по научным направлениям кафедры, поиск, обработка и систематизация литературного материала, используя современные возможности сети INTERNET. Проведение научно-исследовательских расчётов по тематике научных направлений кафедры прикладной физики. Обработка результатов экспериментальных исследований, связанных с научными направлениями кафедры.
- 9 этап. Анализ результатов научно-исследовательской работы. (Проводится самостоятельно)
- 10 этап. Обработка, анализ и обобщение информации, полученной в ходе вычислительной практики. Подготовка отчета о практике.

8. Образовательные и научно - исследовательские технологии, используемые на вычислительной практике.

При проведении вычислительной практики используются и традиционные технологии обучающего обучения, предполагающие передачу информации в готовом виде. К ним относятся: аудиторские занятия в форме лекций с использованием лекционных демонстрационных презентаций; практические занятия (семинары), где студенты решают задачи и моделируют физические процессы, используя современное программное обеспечение персональных компьютеров учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”; самостоятельная работа с литературой в научной библиотеке университета; самостоятельная работа в компьютерном классе с использованием доступа к сети Internet и программного обеспечения для работы с графической, аудио- и видеоинформацией. Использование традиционных технологий необходимо и обеспечивает высокий уровень профессионального образования студентов, регулярно посещающих аудиторские занятия. Они также формируют умения систематизировать, обобщать, извлекать из учебно-методической литературы значимую информацию и т.п.

В ходе вычислительной практики используются и новые образовательные технологии обучения: демонстрационные программы; информационно - справочные системы; электронные учебники. Данные технологии обеспечивают более наглядную подачу материала за счет мультимедиа. Использование электронных учебников позволяет разгрузить преподавателя и увеличить заинтересованность студентов в учебе. При работе с мультимедийными программами обеспечивается обратная связь, осуществляется быстрый поиск нужной информации, экономится время при многократных обращениях к гипертекстовым объяснениям; наряду с кратким текстом, объяснения сопровождаются демонстрацией анимационных эффектов и синхронным озвучиванием.

Разделом практики является научно-исследовательская работа обучающегося. Используя консультации и помощь своего научного руководителя, студент

- участвует в проведении научных исследований или выполнении технических разработок по одному из научных направлений кафедры прикладной физики и учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”;
- изучает специальную литературу и другую научно-техническую информацию по теме (заданию), осуществляет её сбор, анализ и систематизацию;
- проводит научно-технические расчёты с использованием современного компьютерного оборудования и программного обеспечения;
- составляет отчеты (разделы отчета) по теме или её этапу;
- участвует в написании статей в научные журналы по теме научно-исследовательской работы;
- выступает с докладом на конференции.

9. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов на вычислительной практике

9.1 Вопросы для самостоятельной работы студентов

1. Каковы возможности применения современных версий языков Turbo Basic, Visual Basic ?
2. Каковы возможности применения современных версий языка Turbo Pascal ?
3. Каковы возможности применения графического редактора Grafer ?
4. Каковы возможности применения графического редактора Surfer ?
5. Каковы возможности применения пакета прикладных программ Matlab ?
6. Каковы возможности применения пакета прикладных программ MathCAD ?
7. Каковы возможности применения специализированной программы Electronics Workbench ?
8. Каковы возможности применения специализированной программы Multisim ?
9. Каковы возможности применения специализированной программы MicroCap ?
10. Приведите пример алгоритма операции с действительными числами.
11. Приведите пример алгоритма операции с комплексными числами и переменными.
12. Приведите пример алгоритма вычисления степенных многочленов.
13. Приведите пример алгоритма вычисления дробно-рациональных функций.
14. Приведите пример алгоритма вычисления ортогональных многочленов.
14. Приведите пример алгоритма операции с матрицами.
15. Приведите пример вычисления факториалов.
16. Приведите пример алгоритма решения линейных уравнений.
17. Приведите пример алгоритма решения систем линейных уравнений.
18. Приведите пример алгоритма решения нелинейных уравнений.
19. Приведите пример алгоритма решения систем нелинейных уравнений.
20. Приведите пример алгоритма решения трансцендентных уравнений.
21. Приведите пример алгоритма решения алгебраических уравнений с действительными коэффициентами.
22. Приведите пример алгоритма решения алгебраических уравнений с комплексными коэффициентами.
23. Приведите пример алгоритма поиска экстремумов функций одной переменной.
24. Приведите пример алгоритма поиска экстремумов функций множества переменных.
25. Приведите пример алгоритма вычисления определённых интегралов.

26. Приведите пример алгоритма решения систем дифференциальных уравнений.
27. Приведите пример спектрального анализа функции на основе дискретного преобразования Фурье.
28. Приведите пример реализации метода Монте-Карло.
29. Приведите пример корреляционного анализа.
30. Приведите пример регрессионного анализа (приближения функций по методу наименьших квадратов).

9.2 Задания для самостоятельной работы студентов

Используя пакет прикладных программ MathCAD, выполнить следующие задания:

Задание 1.

Найти аналитическое решение и численное решение методом Ньютона кубического уравнения

$$x^3 - 6x^2 + 21x - 52 = 0.$$

Задание 2.

Решить аналитически и численно (методом Ньютона) уравнение 4-й степени

$$x^4 + 9x^3 + 31x^2 + 59x + 60 = 0.$$

Задание 3.

Найти численное решение методом Ньютона уравнения 4-й степени

$$z^5 + 8z^4 + 31z^3 + 80z^2 + 94z + 20 = 0.$$

Задание 4.

Вычислить определённый интеграл методом Симпсона

$$\int_0^1 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 5.

Вычислить определённый интеграл методом Уэддля

$$\int_0^1 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 6.

Вычислить определённый интеграл методом Уэддля

$$\int_1^2 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 7.

Вычислить определённый интеграл методом Ньютона-Котеса

$$\int_0^1 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 8.

Вычислить определённый интеграл методом Чебышева

$$\int_0^1 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 9.

Вычислить определённый интеграл методом Гаусса

$$\int_0^1 \sqrt{2x+1} dx.$$

Задание 10.

Решить аналитически и численно (методом Рунге-Кутты 4-го порядка) дифференциальное уравнение

$$\frac{dy}{dx} = -y$$

при шаге $h=0,1$ и начальных условиях: $x_0=0$, и $y_0=1$. Диапазон изменений аргумента: $0 \leq x \leq 1$.

Задание 11.

Численно методом трапеций решить систему дифференциальных уравнений,

$$\frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, y_2) = y_2,$$

$$\frac{dy_2}{dx} = F_2(x, y_1, y_2) = \left(\frac{y_1}{x} - y_2\right) \frac{1}{x} - y_1.$$

Шаг $h=0,1$, начальные условия: $x_0=0,2$; $y_{10}=0,099500833$; $y_{20}=0,49235$. Диапазон изменений аргумента: $0,2 \leq x \leq 1$.

Задание 12.

Численно методом Рунге Кутты 4-го порядка решить систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, y_2) = y_2,$$

$$\frac{dy_2}{dx} = F_2(x, y_1, y_2) = \left(\frac{y_1}{x} - y_2\right) \frac{1}{x} - y_1.$$

Шаг $h=0,1$, начальные условия: $x_0=0,2$; $y_{10}=0,099500833$; $y_{20}=0,49235$. Диапазон изменений аргумента: $0,2 \leq x \leq 2$.

Задание 13.

Численно методом Рунге-Кутты-Мерсона с автоматическим изменением шага решить систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, y_2) = y_1 + y_2 - x^2 + x - 2,$$

$$\frac{dy_2}{dx} = F_2(x, y_1, y_2) = -2y_1 + 4y_2 + 2x^2 - 4x - 7.$$

Начальный шаг $h=0,1$, начальные условия: $x_0=0$; $y_{10}=0$; $y_{20}=2$. Диапазон изменений аргумента: $0 \leq x \leq 0,2$. Погрешность $\varepsilon=10^{-7}$.

Задание 14.

Численно методом Рунге-Кутты-Фельберга с автоматическим изменением шага решить систему дифференциальных уравнений

$$\frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, y_2) = y_1 + y_2 - x^2 + x - 2,$$

$$\frac{dy_2}{dx} = F_2(x, y_1, y_2) = -2y_1 + 4y_2 + 2x^2 - 4x - 7.$$

Начальный шаг $h=0,1$, начальные условия: $x_0=0$; $y_{10}=0$; $y_{20}=2$. Диапазон изменений аргумента: $0 \leq x \leq 0,2$. Погрешность $\varepsilon=10^{-7}$.

9.3 Методические рекомендации студентам для составления отчета о прохождении вычислительной практики

Отчёт о прохождении практики составляется в соответствии с указаниями программы практики и дополнительными указаниями руководителя практики. В отчёте освещаются следующие вопросы:

1. Общие сведения о базе практики, о порядке и сроках её проведения.
2. Тема, цель и задачи работ.
3. Программы теоретических и практических работ.
4. Методы проведения работ (расчетов), используемое программное обеспечение.
5. Научно-техническое содержание основных выполненных работ практики с предварительными выводами о них.
6. Подробное сообщение о содержании и выполнении индивидуального задания.
7. Заключение (общая оценка результатов практики).

10. Формы промежуточной аттестации (по итогам вычислительной практики)

В соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки 011200 “Физика” (квалификация “бакалавр”) аттестация по итогам вычислительной практики включает защиту отчета по практике. По результатам аттестации выставляется зачет.

**11. Учебно-методическое и информационное обеспечение
вычислительной практики****Основная литература**

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.Н. Численные методы. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006, 2008 (В НБ СГУ – 166 экз.)
2. Срочко В.А. Численные методы: курс лекций. СПб: Изд-во «Лань», 2010. 208 с. «В НБ СГУ – 30 экз.»

Дополнительная литература

1. Баракнин В.Б., Шапеев В.П. Введение в численный анализ. СПб: «Лань», 2005. 107 с. (В НБ СГУ – 16 экз.)
2. Иглин С.П. Математические расчёты на базе MATLAB. СПб: Изд-во БХВ. 2007. 640 с. (В НБ СГУ – 18 экз.)
3. Бабенко К.И. Основы численного анализа. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002 (1-е изд.: М.: Наука, 1986. 744 с.)
4. Федоренко Н.П. Введение в вычислительную физику. М.: Интеллект, 2008. 544 с. (1-е изд.: М.: МФТИ, 1994. 528 с.)
5. В.П. Дьяконов В.П. Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ. М.: Наука, 1989.
6. Гулд Х., Табочник Я. Компьютерное моделирование в физике. В 2-х частях. –М.: Мир, 1990. Ч. 1. 349 с.; Ч. 2. 400 с.
7. Н.И. Калиткин. Численные методы. – М.: Наука, 1978. 512 с.

12. Материально - техническое обеспечение вычислительной практики

1. Лабораторные и компьютерные практикумы учебно-исследовательской лаборатории “Прикладная физика”, её экспериментальное оборудование для учебной и научно-исследовательской работы.
2. Учебная и монографическая литература
3. Научные статьи
4. Электронные лекции (презентации)
5. Мультимедийное оборудование
6. Компьютерные программы

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО с учетом рекомендаций и Примерной ООП ВПО по направлению 011200 “Физика” и профилю подготовки “Прикладная физика”.

Авторы

профессор, д.ф.-м.н. _____ А.С. Шаповалов
заведующий УИЛ “Прикладная физика” _____ А.В. Сапрыгин

Программа одобрена на заседании кафедры прикладной физики
от 10.02.2011 года, протокол № 322.

Зав. кафедрой прикладной физики, профессор, д.ф.-м.н. ____ А.С. Шаповалов

Декан физического факультета профессор, д.ф.-м.н. _____ В.М. Аникин

ON THE PROGRAM OF THE COMPUTING PRACTICE
FOR BACHELOR PHYSICS STUDENTS
A.S. Shapovalov, A.V. Saprygin, V.S. Koshelev
Saratov State University

The results of development of the work program of the computing practice which corresponds to the bachelor direction training 011200 «physics» and profile of learning «applied physics» is represented.

ПАМЯТКА АВТОРАМ

К публикации принимаются статьи по всем разделам физики

В редакцию представляются

- бумажный носитель (бумага белая А4) - 1 экз.;
- электронная копия;
- разрешительный документ на открытое опубликование.

Правила оформления(не оформленные статьи, не принимаются к рассмотрению):*Структура статьи.*

Заголовок; аннотация на русском (английском) языке; содержание статьи, включая таблицы, рисунки, на русском (английском) языке; библиографический список; название статьи, фамилия автора(ов)), название организации(й), аннотация - все на английском (русском) языке.

Текст представляется в формате M. Word v.6.0 – 7.0; интервал - одинарный; шрифт - Times New Roman Суг., 14 пт; размер полей: верхнего 2 см, нижнего 2 см, левого 2,5 см, правого 2 см; абзацы - отступом в 0,5 см.

Заголовок.

Первая строка – индекс УДК (для статей на русском языке), выровненный по **правому** краю текста; вторая строка – заголовок полужирными строчными буквами без переносов, размещенный по центру текста;

с третьей строки – перечень авторов (имя, отчество, фамилия полностью) с указанием уч. степени, должности, места работы, адреса эл. почты, дом. и раб. телефонов.

Обозначения и формулы

Латинские обозначения (P , I , W и т.д.) выполняются *курсивом*, названия функций (\sin , \cos , и т.д.), греческие буквы - обычным (прямым) шрифтом (β , λ , α); обозначения векторов полужирным шрифтом (без верхнего обозначения, \mathbf{W} , \mathbf{a}); номера кривых в рисунках даются *курсивом* (I , 2); русский текст и цифры в верхнем и нижнем индексах - прямым шрифтом ($W_{\text{вых}}$, L^2).

Формулы и греческие символы набираются только в редакторе формул Equation 2.0, 3.0.

Ширина строки формулы – до 8 см, в особых случаях – 16 см.

Ссылки.

Ссылки на формулы и таблицы даются в круглых скобках (*.*); формулы, на которые имеются ссылки в тексте, нумеруются в порядке их появления в тексте цифрой, заключенной в круглые скобки (*.*), по правому краю границы текста, выносятся отдельной строкой и располагаются по центру текста.

В тексте допустимо расположение только однострочных формул, не имеющих нумераций.

Ссылки на источники даются в квадратных скобках [*].

Рисунки.

Каждый рисунок содержится в отдельном файле формата bmp, jpg, wmf, rcm (сохраненные в монохромном режиме). Размеры рисунков: простые ненасыщенные - ширина 8 см., сложные до 16 см. Рисунки даются только черно-белыми.

В оформлении рисунков применяются: латинские обозначения (P , I , W и т.д.) - *курсивом*; названия функций (\sin , \cos , и т.д.), греческие буквы - прямым шрифтом, номера кривых - *курсивом*; обозначения векторов полужирным шрифтом (без верхнего обозначения).

Фотографии

Фотографии - черно-белые, в отдельных файлах bmp, jpg, wmf, rcm (сохраненные в монохромном или 16-цветном режиме). Размеры рисунков-фотографий: простые - шириной 8 см., сложные до 16 см.

Таблицы

Размеры таблиц - ширина 8 см., большие - до 16 см. Правила оформления обозначений те же, как и для формул.

Библиография

В библиографическом списке нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте. Пример правильного оформления показан в образце на следующей странице.

Условия опубликования в сборнике:

- публикации платные;
- стоимость 1 м.п.стр. А4 - 3 у.е. по 25% ежемесячно или разом;
- оплата производится в течение недели со дня получения уведомления редколлегии о принятии статьи к опубликованию;
- редколлегия подтверждает факт оплаты в течение недели со дня получения перевода;
- материалы статьи направлять в адрес редколлегии: г. Саратов, ул. Астраханская, 83, Саратовский госуниверситет, физфак, каф. прикладной физики: отв. редактор сб. "Вопросы прикладной физики" проф. В.С Кошелев;
- или лично отв. секретарю редколлегии на кафедре прикладной физики (СГУ, 8 корпус, 4 этаж, 90 к.) ст.пр. Старшову М.А.

Телефоны: редколлегия - 7(8-452) 51-48-52,
отв. секр. - 7(8-452) 26-07-50.

E-mail: mastarshov@mail.ru

ОБРАЗЕЦ ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЬИ

УДК 51.942.82:621.396.96

ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МОДЕЛИ В БИОФИЗИКЕ

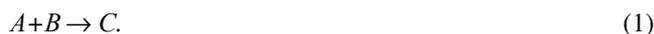
И.А.Иванов, А.И.Петров

Саратовский государственный университет,

Иванов Иван Алексеевич, канд. физ.-мат. н, доцент, e@mail, p.t. (8452) 11-12-13, д.т. (8452) 11-13-14*Петров Антон Иванович*, аспирант, e@mail, p.t. (8452) 15-17-13, д.т. (8452) 21-13-14

Показано, что в некоторых явлениях случайные отклонения от закономерностей настолько малы, что их можно не учитывать. Рассмотрены явления, в которых случайность играет основную роль.

Рассмотрим вероятностную модель биомолекулярной реакции:



Вероятность того, что за время Δt не образуется ни одной молекулы типа C , равна $1-N_1N_2\lambda\Delta t$ [1]. На рис.1 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки. Кривая 1 - зависимость от времени, кривая 2 - вблизи точки равновесия.

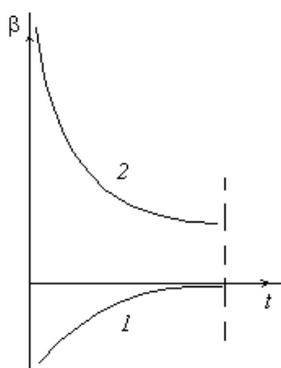


Рис.1

На рис.2 показано изменение скорости продуцирования энтропии около стационарной точки при образовании молекулы типа D .

Библиографический список

1. Рубин А.Б. Биофизика. М., 1987.
2. Иванов И.А. // Материалы междунар. науч.-техн. конф. "Актуальные проблемы электронного приборостроения АПЭП-98". Саратов, 1998. Т.1. С.234-235.
3. Бочаров Е.П. // Изв. Вузов. Радиофизика. 1987. Т.30, №1. С.96-103.
4. Rack A.I. // Bell System Tech. J. 1938. V.17, №3. P.123-124.
5. Van Duzer T. // IEEE Trans. 1963. V.ED-10, №6. P.370-378.
6. Петров П.И. // Вопросы электронной техники. Саратов, 1971. Вып.2. С.12-15.
7. Михайлов А.И., Лернер Д.М. // Письма в ЖТФ. 1998. Т.24, вып.21. С.16-22.

Probabilistic models in biophysics

I.A. Ivanov, A.I. Petrov

Saratov State University

Shown that in some phenomena casual detours from regularities far enough small that their possible not to take into account. Considered phenomena, in which accident plays a main role.

БИБЛИОТЕКИ,

получившие обязательный экземпляр научного сборника "Вопросы прикладной физики", 2010, №17

Россия

Библиотека Алтайского государственного университета (656099, Барнаул, пр. Социалистический, 68).

Библиотека Волгоградского государственного университета (400063, Волгоград, ул. 2-я Продольная, 20).

Научная библиотека Уральского государственного университета (620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 510).

Научная библиотека Иркутского государственного университета (664000, Иркутск, Бульвар Ю. Гагарина, 24).

Научная библиотека Казанского государственного университета (420008, Казань, ул. Ленина, 18).

Библиотека Калининградского государственного университета (236040, Калининград, ул. Университетская, 2).

Научная библиотека Краснодарского государственного университета (350000, Краснодар, ул. К. Либкнехта, 149).

Российская государственная библиотека (101600, Москва, Воздвиженка, 8).

Библиотека Администрации Президента Российской Федерации (Москва).

Научная библиотека им. А.М. Горького Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (103031, Москва, ул. Моховая, 9).

Государственная публичная научно-техническая библиотека России (103031, Москва, Кузнецкий мост, 12).

Библиотека института научной информации по общественным наукам Российской академии наук (117417, Москва, ул. Красикова, 28/21).

Библиотека по естественным наукам РАН (119890, Москва, Знаменка, 11).

Государственная публичная историческая библиотека Российской Федерации (101000, Москва, Старосадский пер., 9).

Библиотека Всероссийского института научной и технической информации РАН (125219, Москва, ул. Балтийская, 14)

Государственная общественно-политическая библиотека (129256, Москва, ул. В. Пика, 4, корп. 2)

Центральная политехническая библиотека (101000, Москва, Политехнический пр., 2).

Государственная центральная научная медицинская библиотека (117418, Москва, ул. Красикова, 30).

Государственная публичная научно-техническая библиотека Сибирского отделения РАН (630200, Новосибирск, ул. Восход, 15).

Научная библиотека Новосибирского государственного университета (630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2).

Библиотека Пермского государственного университета (614022, Пермь, ул. Букирева, 15).

Научная библиотека Ростовского государственного университета (344006, Ростов-на-Дону, ул. Пушкинская, 148).

Библиотека Самарского государственного университета (443011, Самара, ул. Потапова, 64/163).

Российская национальная библиотека (191069, Санкт-Петербург, ул. Садовая, 18).

Библиотека РАН (199164, Санкт-Петербург, Биржевая линия, 1).

Научная библиотека Санкт-Петербургского государственного университета (Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7/9).

Научная библиотека Саратовского государственного университета (410026, Саратов, ул. Университетская, 42).

Научная библиотека Тверского государственного университета (170000, Тверь, ул. Трехсвятская, 16/31).

Научная библиотека Томского государственного университета (634010, Томск, пр. Ленина, 34 А).

Научная библиотека Ульяновского государственного университета (432700, Ульяновск, ул. Л. Толстого, 42).

Библиотека Башкирского государственного университета (450074, Уфа, ул. Фрунзе, 32).

Хабаровская краевая научная библиотека (680671, Хабаровск, ул. К. Маркса, 1/72).

Библиотека Ярославского государственного университета (150000, Ярославль, ул. Советская, 14).

Научно-техническая библиотека Балаковского института техники, технологии и управления (413800, Балаково, ул. Чапаева, 140).

Библиотека Балаишова педагогического института (412340, Балаишова, ул. К. Маркса, 29).

Германия

Немецкое исследовательское общество (Deutsche Forschungsgemeinschaft DFG, Kennedyallee 40, 53175 Bonn).

Грузия

Библиотека Тбилисского государственного университета (320028, Тбилиси, пр. И. Чавчавадзе, 1).

Белоруссия

Фундаментальная библиотека Минского государственного университета (220080, Минск, Университетский городок).

Казахстан

Научная библиотека Казахского государственного университета (480121, Алма-Аты, ул. Тимирязева, 46).

Молдавия

Научная библиотека Молдавского государственного университета (277003, Кишинев, ул. Садовая, 60).

США

Библиотека Конгресса США (The Library of Congress European & Latin American Acquisition Division, 101 Independence Ave., S. E. Washington. D.C. 20540-4180. USA).

Украина

Научная библиотека Киевского государственного университета (252601, Киев, ул. Владимирская, 58).

Научная библиотека Львовского государственного университета (290601, Львов, ул. Драгоманова, 5).

Центральная научная библиотека Харьковского государственного университета (310077, Харьков, пл. Дзержинского, 4).

Эстония

Фундаментальная библиотека Тартуского государственного университета (202400, Тарту, ул. Струве, 1).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Ф.И.О.	Место работы	Должность, степень, ученое звание	e-mail
Алексеев Игорь Геннадиевич	СГУ, физический факультет	Студент	
Баранов Виктор Иванович	ГЕОХИ РАН	Зав.лабораторией, профессор, академик РАЕН	
Давидович Михаил Владимирович	СГУ	Д.ф.-м.н., профессор. Кафедра	davidovichmv@info.sgu.ru
Кадров Дмитрий Михайлович	СГУ, физический факультет	Студент	
Козлов Андрей Владимирович	ООО НПФ «Этна»	К.ф.-м.н., ведущий специалист	
Кошелев Василий Сергеевич	СГУ, кафедра прикладной физики	Д.т.н., профессор	apd@sgu.ru , тел. 51-48-52
Минкин Леонид Моисеевич	Portland State University, USA	профессор.	
Мирошник Александр Владимирович	Международная ассоциация предприятий горэлектротранспорта	Президент ассоциации МАП ГЭТ	
Сапрыгин Алексей Владимирович	СГУ, кафедра прикладной физики	Зав.лабораторией кафедры	apd@sgu.ru , тел. 51-48-52
Старшов Михаил Александрович	СГУ, кафедра прикладной физики	доцент	mastarshov@mail.ru
Тен Галина Николаевна	СГУ, кафедра прикладной физики	Д.ф.- м.н., профессор	TenGN@info.sgu.ru
Шаповалов Александр Степанович	СГУ, кафедра прикладной физики	Д.ф.- м.н., профессор, заведующий кафедрой	apd@sgu.ru , тел. 51-48-52
Шаповалов Степан Александрович	Саратовское электроагрегатное объединение	Инженер	
Явчуновский Виктор Яковлевич	ООО НПФ «Этна»	Директор, д.ф.-м.н.,	
Яковлева Антонина Алексеевна	СГУ, физический факультет	аспирант	yakovleva_ant@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

А.В.Мирошник, В.Я. Явчуновский	КЛИМАТ – КОНТРОЛЬ, КАК НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЮ НА ГОРОДСКОМ ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТЕ. ЧАСТЬ 1. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ РАСЧЕТЫ	3
А.В.Мирошник, В.Я. Явчуновский, А.В. Козлов	КЛИМАТ – КОНТРОЛЬ, КАК НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОДХОД К ЭНЕРГОСБЕРЕЖЕНИЮ НА ГОРОДСКОМ ЭЛЕКТРОТРАНСПОРТЕ. ЧАСТЬ 2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭНЕРГОПОТРЕБЛЕНИЯ	16
И. А. Ермолаев	ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОДИФФУЗИИ НА УСТОЙЧИВОСТЬ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР ЭЛЕКТРОКОНВЕКТИВНОГО ТЕЧЕНИЯ	23
В.С. Кошелев	К МЕТОДИКЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОПТИМИЗАЦИИ КАТОДНОГО УЗЛА ЭВП	25
ЭЛЕКТРОМАГНЕТИЗМ		
М.В. Давидович	ОБ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ЭНЕРГИИ ПОЛЯ И ВЕЩЕСТВА	26
А.С. Шаповалов, Л.М. Минкин, С.А. Шаповалов	АНАЛИЗ КОЭФФИЦИЕНТОВ КОЛЛЕКТИВНОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ АМПЛИТУДНЫХ И АМПЛИТУДНО-ЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ ФЛУКТУАЦИЙ МНОГОДИОДНОГО ГЕНЕРАТОРА СВЧ	29
ОПТИКА		
Г.Н. Тен, В.И. Баранов	ИССЛЕДОВАНИЕ ТАУТОМЕРИИ УРАЦИЛА, ТИМИНА И ИХ ТИОЗАМЕЩЁННЫХ	34
Яковлева А.А., Тен Г.Н.	СТРУКТУРА И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ ПАР В ВОДНОМ РАСТВОРЕ	39
Д.М. Кадров, И.Г. Алексеев, Г.Н. Тен	РАСЧЁТ И ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА ИЗОЛИРОВАННОГО МЕТИОНИНА	48
ОБРАЗОВАНИЕ		
А.С. Шаповалов, А.В. Сапрыгин, В.С. Кошелев	О ПРОГРАММЕ ОЗНАКОМИТЕЛЬНОЙ ПРАКТИКИ СТУДЕНТОВ-ФИЗИКОВ БАКАЛАВРИАТА	52
А.С. Шаповалов, А.В. Сапрыгин, В.С. Кошелев	О ПРОГРАММЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ПРАКТИКИ СТУДЕНТОВ-ФИЗИКОВ БАКАЛАВРИАТА	60
ПАМЯТКА АВТОРАМ		
БИБЛИОТЕКИ, ПОЛУЧИВШИЕ ЭКЗЕМПЛЯР "ВОПРОСЫ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ" (2010, ВЫП.17)		72
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ		73
СОДЕРЖАНИЕ		74
CONTENTS		75
В КОНЦЕ НОМЕРА. ИЗ КОЛЛЕКЦИИ М.А.СТАРШОВА		76

CONTENTS

ENGINEERING

A.V. Miroshnik, V.Y. Yavchunovsky	CLIMATE-CONTROL AS THE MOST EFFECTIVE APPROACH TO ENERGY SAVING IN THE URBAN ELECTRIC TRANSPORT PART 1. THE EXPERIMENTAL DATA AND PRELIMINARY CALCULATIONS	3
A.V. Miroshnik, V.Y. Yavchunovsky, A.V.Kozlov	CLIMATE-CONTROL AS THE MOST EFFECTIVE APPROACH TO ENERGY SAVING IN THE URBAN ELECTRIC TRANSPORT PART 2. THEORETICAL EVALUATION OF ENERGY CONSUMPTION	16
I.A. Ermolaev	THE EFFECT OF ELECTRODIFFUSION ON THE STABILITY OF VORTEX STRUCTURES OF THE ELECTROCONVECTION FLOW	23
V.S. Koshelev	THE METHODS OF STUDY OF THERMOMECHANICAL OPTIMIZATION OF CATHODE UNITS OF VACUUM TUBES	25

ELECTROMAGNETISM

M.V. Davidovich	ON THE ELECTROMAGNETIC ENERGY OF FIELD AND MATTER	26
A.S.Shapovalov, L.M. Minkin, S.A. Shapovalov	ANALYSIS OF THE FACTORS OF COLLECTIVE TRANSFORMATION OF THE AMPLITUDE AND AMPLITUDE-FREQUENCY FLUCTUATION SPECTRUMS OF THE MULTIDIODE MICROWAVE GENERATOR	29

OPTICS

G.N. Ten, V.I. Baranov	INVESTIGATION OF TAUTOMERISM OF URACIL, THYMINE AND ITS THIOSUBSTITUTED	34
Yakovleva A.A., Ten G.N.	STRUCTURE AND VIBRATIONAL SPECTRA OF COMPLEMENTARY PAIRS IN AQUEOUS SOLUTION	39
D.M. Kadrov, I.G. Alekseev, G.N. Ten	CALCULATION AND INTERPRETATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF ISOLATED METHIONINE	48

EDUCATION: METHODOLOGICAL ISSUES

A.S. Shapovalov, A.V. Saprygin, V.S. Koshelev	ON THE PROGRAM OF THE INTRODUCTORY PRACTICE FOR BACHELOR PHYSICS STUDENTS	52
A.S. Shapovalov, A.V. Saprygin, V.S. Koshelev	ON THE PROGRAM OF THE COMPUTING PRACTICE FOR BACHELOR PHYSICS STUDENTS	60

INFORMATION FOR THE AUTHORS

LIST OF LIBRARIES WHICH RECEIVED COPIES OF THE PREVIOUS ISSUE	70
LIST OF THE AUTHORS	72
CONTENTS IN RUSSIAN	73
CONTENTS IN ENGLISH	74
FROM THE COLLECTION OF M.A.STARSHOV	75

ИЗ КОЛЛЕКЦИИ М. Старшова

«...Фарадей многократно отражает поляризованный луч *по разным направлениям в направлении* магнитных силовых линий, чтобы яснее обнаружить в своём тяжёлом стекле вращение плоскости поляризации...».

МАХ Эрнст. Познание и заблуждение. М., 2003.С.215.

«...закон физики для явления электромагнитной индукции, открытый М.Фарадеем *ещё в XVIII веке*. Этот закон устанавливает, что перенос энергии механизмом электромагнитной индукции определяется следующими естественными факторами:

$$k_{emi} \approx P_D(v)P_A(v)f(\varphi, \psi_1, \psi_2)f(L_{D,A} / R_{cr})f(\Delta v)\eta^{-2},$$

где $P_D(v)$ и $P_A(v)$ являются «силами» диполей донора и акцептора энергии... η – коэффициент диэлектрической поляризации среды, в которой находятся диполи»

БОРИСОВ А.Ю, Институт физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского, Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова//БИОФИЗИКА, 2011, Т.56, вып.6, С.1147.

«...Такая ситуация является отражением корпускулярно-волнового *ДУАЛИЗА*, т.е. того факта, что электроны... – это не “материальная точка” классической физики, движущаяся по какой-то определенной траектории»

МЕНСКИЙ М.Б., профессор//УФН 2005, №4, С.413

«...загораживание Луной (*точнее, ее заслонкой*) Солнца находим прямо у Анаксимандра, ученика Фалеса...»

ЧАЙКОВСКИЙ Ю.В. //ВИЕТ 2004, №2, С.182.

ТИПИЧНО: «Для того чтобы тело двигалось вблизи Земли по круговой орбите, *необходимо*, чтобы действующая на него центростремительная сила была равна силе тяготения» -

ГРАБОВСКИЙ Р.И. Курс физики. М., 1980. С.62.

«...сила притяжения электрона к положительному ядру *ДОЛЖНА БЫТЬ РАВНА* центробежной силе» - ИОФФЕ А.Ф. Основные представления современной физики. Л.-М., 1949. С.192.

"Все пространство вокруг электрического тока *наполнено невидимыми магнитными силами*. Эти-то магнитные силы физики и называют магнитным полем".

БРОНШТЕЙН М.П. Солнечное вещество. М., 1990. С.125.

It is interesting to note that Johannes Kepler in 1584 that “pinwheel” rays of this kind might be responsible for the rainbow, but he abandoned the idea because it did not lead to the correct rainbow angle.

Sci Am 1977, №4, p.125-126. (В самом деле? Он родился 27 декабря 1571г...)

«...*Средовая жёсткость учебной программы есть продукт социальной политики, определяющей легитимные каркасы и антропологический базис жизни общества*»

КАРПОВ А.О. //Вестник РАН, 2010, №7, С.620.

«*субстантивная форма обеспечивает наиболее широкий номинативный охват детоната и даёт возможность легче подобрать синонимы и антонимы*».

ШИШПАРЕНОК О. В.// «Молодой учёный», 2011, №10, С.53.

«...В работах ученого прослеживается эволюционная цепочка развития материи: эфир – *РАЗРЯЖЕННАЯ* материя – сгущение газообразной массы – Солнце – Земля - человек»

КОВАЛЕВА Г.П. Философская модель космизма К.Э. Циолковского//Философские науки 2006, №2, С.75.

«...Интрига вторая: не сумел ли знаменитый француз *Анри* Лавуазье тайком прочесть рукопись Ломоносова, прежде чем сформулировать свой закон сохранения вещества, закон, который стал основой научной революции в химии?»

Высшее образование в России. 2012г., №1, С.96). высшее образование Франции помнит *Антуана* Лавуазье...

«... Споры А. Эйнштейна с представителями копенгагенской школы (Н. Бором, М. Борном, *Г.* Гейзенбергом)...»

Высшее образование в России. 2012г., №1, С.157. (Этот последний, конечно, немец, и мог бы зваться Гансом, но его родители успели назвать Вернером, и даже его второе имя Карл не даёт оснований писать *Г*).