КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА ИНСТИТУТА ФИЗИКИ КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Казань, 23 января – 6 февраля 2024 г.

Сборник избранных тезисов

КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА ИНСТИТУТА ФИЗИКИ КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Казань, 23 января – 6 февраля 2024 г.

Сборник избранных тезисов



УДК 53+54 ББК 24.5 И93

Редакционный комитет: Марат Ревгерович Гафуров, Ирина Владимировна Романова, Георгий Юрьевич Андреев

Организационный комитет:

Марат Ревгерович Гафуров, Ирина Владимировна Романова, Дмитрий Альбертович Таюрский, Сергей Сергеевич Харинцев, Юрий Николаевич Прошин, Роман Валерьевич Юсупов, Анатолий Васильевич Мокшин, Владимир Дмитриевич Скирда, Ленар Рафгатович Тагиров, Марат Николаевич Овчинников, Сергей Владимирович Сушков, Ольга Германовна Хуторова, Наиль Абдуллович Сахибуллин, Юрий Анатольевич Нефедьев, Адель Джавидович Акчурин, Аркадий Васильевич Карпов, Олег Николаевич Шерстюков, Василий Юрьевич Белашов, Альберт Вартанович Аганов, Гузель Ильдаровна Гарнаева, Георгий Юрьевич Андреев

Итоговая научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава Института физики Казанского федерального университета (Казань, 23 января — 6 февраля 2024 г.) [Электронный ресурс]: сборник избранных тезисов. — Электронные текстовые данные (1 файл: 408 Кб). — Казань: Издательство Казанского университета, 2024. — 113 с. — Системные требования: Adobe Acrobat Reader. — https://dspace.kpfu.ru/xmlui/bitstream/handle/net/183255/theses_physfac-2024.pdf — Загл. с титул. экрана.

ISBN 978-5-00130-797-6

В данном сборнике представлены избранные тезисы Итоговой научнопрактической конференции профессорско-преподавательского состава Института физики Казанского федерального университета, состоявшейся 23 января — 6 февраля 2024 г.

> УДК 53+54 ББК 24.5

ISBN 978-5-00130-797-6

СОДЕРЖАНИЕ

Основное научное направление ФИЗИКА И ИНЖЕНЕРИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Секция ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА
Р.В. Власов, А.В. Мокшин ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ17
Б.Н. Галимзянов, М.А. Доронина, А.В. Мокшин СОВРЕМЕННЫЕ ТРЕНДЫ В ДИЗАЙНЕ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
М.А. Доронина, Б.Н.Галимзянов, А.В. Мокшин РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ АРРЕНИУСОВСКОГО ПЕРЕХОДА АМОРФООБРАЗУЮЩИХ ЖИДКОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ19
Г.А. Никифоров, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин ОБОБЩЕННОЕ ОПИСАНИЕ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО МАТЕРИАЛА20
И.И. Файрушин ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛАБО ЗАТУХАЮЩИХ КОЛЛЕКТИВНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ДЛЯ СИЛЬНО НЕИДЕАЛЬНОЙ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ21
Р.А. Хабибуллин УСКОРЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ПОМОЩИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ22
<i>Р.Р.Хайруллина</i> ВЯЗКОСТНЫЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ НИКЕЛЬ-ФОСФОР23
Р.М.Хуснутдинов МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОПЕССА ЛИССОПИАПИИ ГИЛРАТА МЕТАНА24

А.А. Цыганков, Б.Н. Галимзянов, А. В. Мокшин СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖИДКОЙ СУРЬМЫ: AB-INITIO AHAЛИЗ25
М.Б. Юнусов, Р М. Хуснутдинов ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ МАТРИЦ КУЛОНА МЕТОДОМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ
Секция ОПТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МАТЕРИАЛОВ
О.А. Кочурова, Д.И. Камалова ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА СМЕСЕЙ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА И ПОЛИВИНИЛБУТИРАЛЯ НА СТЕПЕНЬ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ
А.И. Гарифуллин, Р.Х. Гайнутдинов, М.А. Хамадеев УПРАВЛЕНИЕ ЧАСТОТАМИ ФОТОНОВ, ИЗЛУЧАЕМЫХ КВАНТОВОЙ ТОЧКОЙ В ОДНОМЕРНОЙ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЕ
Секция ФИЗИКА МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ
С.А. Куракин, А.И. Иваньков, С.В. Ефимов, Т.А. Мухаметзянов, Н. Кучерка ВЛИЯНИЕ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ НА МОРФОЛОГИЮ И СТРУКТУРУ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН СО ВСТРОЕННЫМ БЕТА-АМИЛОИДНЫМ ПЕПТИДОМ
Секция ТЕОРИЯ МАГНИТНЫХ, СПЕКТРАЛЬНЫХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ, НАНОСТРУКТУР И СВЕРХПРОВОДЯЩИХ СОЕДИНЕНИЙ
А.А. Хамзин КОРРЕЛИРОВАННАЯ ИОННАЯ ДИНАМИКА В ПЛАСТИЧЕСКИХ ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ И ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

В.В. Клековкина	
МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ	
НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ	
И ТЕРАГЕРЦЕВОГО ПОГЛОЩЕНИЯ	
ТИТАНАТА ТЕРБИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПИРОХЛОРА	31
К.М. Макушин	
КВАНТОТВО-ХИМИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ НА КВАНТОВОМ	
КОМПЬЮТЕРЕ	32
Ф.М. Сираев, М.В. Авдеев, Ю.Н. Прошин	
ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ	
НА КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ	
В НЕОБЫЧНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ	33
В.А. Туманов, Ю.Н. Прошин МЕТОД ПОИСКА КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ	
И САМОСОГЛАСОВАННОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА	
В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ	
СВЕРХПРОВОДНИК / НЕОДНОРОДНЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИК	34
М.Джигуиба, О.В. Соловьев	
ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОЛНОСИММЕТРИЧНЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ НА ФОРМУ	
	`
ЗАПРЕЩЕННОГО ПО СИММЕТРИИ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПРИМЕСНОГО ЦЕНТРА	
	33
И.В.Брекоткин, Н.Ф. Фаткуллин,К. Заальвехтер	
МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ КОРРЕЛЯЦИИ	
ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ЗАТУХАЮЩЕЙ	
МАГНИТНОЙ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ	2.6
С ПОМОЩЬЮ ДВУХКВАНТОВОГО РЕЗОНАНСА	36
Р.Р. Хабибуллин, Э.И. Байбеков	
РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ АТОМА ³ НЕ	
В АЭРОГЕЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПЛОТНОСТИ	37
А.В. Корнев, И В. Бобкова	
ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В ТОНКОПЛЕНОЧНОМ БИСЛОЕ	
СВЕРХПРОВОДНИК/ФЕРРИМАГНЕТИК	38

Секция

НОВЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

Б. Ержанов, А.М. Балагуров
СТРУКТУРЫ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРОЙНЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Fe39
М.А. Краснов, И.В. Янилкин, А.И. Гумаров, А.М. Рогов, Р.В. Юсупов СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНКИ ОКСИНИТРИДА ЦИРКОНИЯ ZrO _x N _y КАК ДАТЧИКА ТЕМПЕРАТУРЫ41
И.В. Янилкин, А.И. Гумаров, Л.Р. Фатихова, И.А. Руднев, Р.Г. Батулин ВЛИЯНИЕ МЕТОДА СИНТЕЗА ДИБОРИДА МАГНИЯ (MgB ₂) НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК42
Ф.Г. Вагизов, А.Л. Зиннатуллин, Р.Н. Шахмуратов ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ С ПОМОЩЬЮ МЁССБАУЭРОВСКИХ ФОТОНОВ НА СЛУЧАЙНОМ ПОТОКЕ43
А.Ф. Абдуллин, Е.В. Воронина, Е.Н. Дулов МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТРОЙНОМ УПОРЯДОЧЕННОМ СПЛАВЕ Fe ₆₅ Al ₃₀ B ₅ 44
<i>Б.Р. Хамидуллин</i> МАССИВ СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРОВ GADAST И ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПРОТОННОЙ РАДИОАКТИВНОСТИ45
Секция КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ: ОТ КОМПЬЮТЕРНОГО ДИЗАЙНА ДО ПРОТОТИПА
К.В. Евсеев РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ВаТіО3/Fe47
Г.Ю. Андреев, И.В. Романова, О.А. Морозов, С.Л. Кораблева, Р.Г. Батулин, В.Н. Глазков, С.С. Сосин МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛА ТЕТРАФТОРИЛА ГАЛОЛИНИЯ48

Э.Х. Абдрахимова
УПРАВЛЕНИЕ ПЛОСКИМИ ЗОНАМИ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ Co/Sn C ПОМОЩЬЮ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА НА ПРИМЕРЕ BaTiO ₃ 50
Р.М. Бурганова ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОБЕНЗОЛА В КАЧЕСТВЕ МАТЕРИАЛОВ С ПЕРЕКЛЮЧАЕМОЙ СМАЧИВАЕМОСТЬЮ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ51
Р.Ф. Ахмеров ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРА КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ52
А.А. Евсеев ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР СО СПИНОВЫМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ РАШБЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ53
А.И. Шамсиева КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ54
3. <i>И. Миннегулова</i> АВ INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕСНОГО ФЕРРОМАГНЕТИЗМА ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ ПАЛЛАДИЯ55
Я.И. Шарифуллина ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОКСИАПАТИТА, ДОПИРОВАННОГО РАЗЛИЧНЫМИ ПРИМЕСЯМИ (Si, V, Dy, Gd, Tb), С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
А.И. Фасхутдинова, И.И. Гумарова, О.В. Недопекин, И.В. Романова АВ INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОКЛАСТЕРОВ ФТОРИДОВ РЕДКИХ ЗЕМЕЛЬ REF ₃ (RE = Tb, Dy, Ho)
КЕГ (КЕ То, Бу, По)

Д.С. Увин, Р.Р. Габдрахманов, Д.А. Таюрский, Р.Г. Батулин КОНТРОЛЬ УРОВНЯ КРИОГЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ЕМКОСТНЫМ МЕТОДОМ59
А.С. Парфишина, А.В.Егоров, А.Г. Киямов, С.Л. Кораблева, Д.С. Нужина, А.А.Родионов, И.В.Романова, К.Р. Сафиуллин, М.С. Тагиров ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР 169 Tm В ВАН-ФЛЕКОВСКОМ ПАРАМАГНЕТИКЕ $\text{Li}(Y_{0.98}\text{Tm}_{0.02})\text{F}_4$ МЕТОДОМ ЯМР
П.А. Алопина МОДЕЛИРОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СЛОИСТОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА ТаFe _{1+y} Te ₃
Секция МАГНИТНАЯ, ОПТИЧЕСКАЯ И УЛЬТРАЗВУКОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ПЕРСПЕКТИВНЫХ СРЕД И МАТЕРИАЛОВ
$A.М.$ Гараева, Е.М. Алакшин, Е.И. Болтенкова, К.Р. Сафиуллин, И.В. Романова ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЯДЕР ГЕЛИЯ-3 В КОНТАКТЕ С ЧАСТИЦАМИ DyF_3
$A.A.$ Шавельев, $A.C.$ Низамутдинов, $A.A.$ Шакиров, $C.Л.$ Кораблева, $Д.\Gamma.$ Зверев, $E.B.$ Лукинова, $B.B.$ Семашко РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ Ce^{3+} В ВЫСОКОЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ LiCaAlF ₆
Основное научное направление КОСМИЧЕСКИЕ И ИНФОКОММУНИКАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, ТЕХНОЛОГИИ, РАЗРАБОТКА ПРИБОРОВ НА НОВЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ПРИНЦИПАХ
Секция ВОЛНОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В СРЕДАХ
А.О. Храмов, М.Н. Овчинников, А.Г. Гаврилов РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ВОЛН ДАВЛЕНИЯ В МНОГОФАЗНЫХ НАСЫЩЕННЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ В ЛАБОРАТОРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Р.А. Натфуллин, Е.А. Марфин
ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ
ПОРИСТОЙ СРЕДЫ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ СИСТЕМ65
Р.И. Соловьев, Е.А. Марфин
МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ
И ВЯЗКОСТИ ЖИДКОСТЕЙ66
Е.А. Марфин
ВЛИЯНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ
НА НЕУСТОЙЧИВОСТЬ САФФМАНА-ТЕЙЛОРА
В РАДИАЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ-ШОУ67
Секция
РАДИОФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИРОДНЫХ СРЕД
А.А. Вахитов, Ю.С. Масленникова
РАЗВИТИЕ РАДИОФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ
АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И РАСПОЗНАВАНИЯ ДАННЫХ
РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АКУСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ
ДЛЯ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН68
Е.А. Макеева, А.Ю. Шемахин
РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ВЧ-ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПОЛИМЕРНЫМ МАТЕРИАЛАМ
Д.С. Тарасов, А.Ю. Шемахин
РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ВЧ-ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ
ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ МАТЕРИАЛАМ70
Секция
РАДИОФИЗИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРИРОДНЫХ СРЕД
А.И. Протопопова, О.Н. Шерстюков
МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ВЫБОРА ПАРАМЕТРА КАНАЛОВ СВЯЗИ
С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММИРУЕМОГО РАДИО71

К.Ю. Коваленко, Л.Ш. Муртазина, Е.Ю. Рябченко
ОБЗОР СПОСОБОВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ
РАЗВИТИЯ ПОМЕХОУСТОЙЧИВОЙ ПЕРЕДАЧИ СИГНАЛА72
А.М. Аппалонов, О.Н. Шерстюков
КРАТКОСРОЧНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
ПОЛНОГО ЭЛЕКТРОННОГО СОДЕРЖАНИЯ ИОНОСФЕРЫ
ПРИ ПОМОЩИ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ74
Р.Р. Зиядиев, О.Н. Шерстюков, Ю.С. Масленникова
ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС
ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ
ГЕОФИЗИЧЕСКОГО КАБЕЛЯ76
П.А. Корчагин, И.П. Корчагин
ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
КАК НОВАЯ ПАРАДИГМА ОБРАЗОВАНИЯ77
Б.В. Емельянов, О.Н. Шерстюков., В.А. Рыжов.
РАЗВИТИЕ АЛГОРИТМОВ ЛОКАЦИИ
СЕЙСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ В СКВАЖИНЕ
ПО ДАННЫМ DAS
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОПТИМИЗАЦИОННОГО ПОДХОДА78
Д.В. Бриский
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ
СЕНСОРНОЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКОЙ
СИСТЕМЫ ТРАНСПОРТНОГО СРЕДСТВА
Секция
МЕТЕОРНЫЕ ЯВЛЕНИЯ
И МЕТЕОРНЫЕ ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ
Д.В. Сарычев, А.В. Карпов
КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ
СИСТЕМЫ МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ
ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ80

А.И. Сулимов РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ БИТОВОЙ ОШИБКИ В СИСТЕМАХ МЕТЕОРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ	
СЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ	81
А.А. Галиев, А.И. Сулимов, А.В. Карпов, Р.Р. Латыпов, Р.Ф. Халиуллин ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ СИГНАЛОВ В МНОГОЛУЧЕВОМ РАДИОКАНАЛЕ	82
А.В. Епонешников, А.И. Сулимов ОЦЕНКА ЭНТРОПИИ ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОЛУЧЕВОГО РАДИОКАНАЛА	83
А.О. Савастьянов, А.И. Сулимов МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ МЕТЕОРНЫХ РАДИООТРАЖЕНИЙ	84
Р.Ф. Халиуллин, А.И. Сулимов МОДЕЛИРОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОЛУЧЕВОЙ СРЕДЫ ГОРОДСКОЙ ЗАСТРОЙКИ МЕТОДОМ ТРАССИРОВКИ ЛУЧЕЙ	85
А.В. Изюмченко, С.А. Калабанов, Р.А. Ишмуратов РАСЧЕТ И ПОСТРОЕНИЕ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ОРБИТ МЕТЕОРНЫХ ПОТОКОВ ПО ДАННЫМ РАДАРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ В КФУ	86
С.А. Калабанов, А.В. Изюмченко, Р.А. Ишмуратов СПОСОБЫ НАХОЖДЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАСС И РАЗМЕРОВ МЕТЕОРОИДНЫХ ЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ МЕТЕОРНЫХ РАДИООТРАЖЕНИЙ	87
Р.В. Сысолятин, С.А. Калабанов, Р.А. Ишмуратов СТРУКТУРНАЯ СХЕМА ТЕСТОВОГО ПРИЕМОПЕРЕДАТЧИКА НА ОСНОВЕ GSM МОДЕМА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ УРОВНЯ ПРИЕМНОГО РАДИОСИГНАЛА	88

Основное научное направление ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ В БИОМЕДИЦИНЕ

Секция МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА
Г.А. Миннуллина, С.В. Ефимов, В.В. Клочков КОНФОРМАЦИОННЫЙ ОБМЕН В ЦИКЛОСПОРИНЕ С, РАСТВОРЕННОМ В АЦЕТОНИТРИЛЕ
Д.А Осетрина, А.Р. Юльметов, А.Г. Бикмуллин, Т.А. Мухаметзянов, Э.А. Клочкова, К.С. Усачев, В.В. Клочков, Д.С. Блохин ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР ФИБРИЛЛООБРАЗУЮЩИХ ПЕПТИДНЫХ ФРАГМЕНТОВ
БЕЛКА СЕМЕНОГЕЛИН1
ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ КОСТНОЙ ТКАНИ
К.С. Усачев, А.Д. Биктимиров, Е.С.Кучаев, Э.А. Клочкова, А.Э. Гималетдинова, Д.Р. Исламов, Ш.З. Валидов, М.М. Юсупов МОЛЕКУЛЯРНЫЕ АСПЕКТЫ РЕГУЛЯЦИИ ТРАНСЛЯЦИИ БАКТЕРИИ STAPHYLOCOCCUS AUREUS БЕЛКАМИ СЕМЕЙСТВА АВС-F

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И DFT ИССЛЕДОВАНИЯ β-ЕНАМИНОНА94

А.Ф. Шайдуллина, Л.И. Савостина, А.Р. Шарипова, А.Н. Туранов

Я. Хамдан, ДА. Макарова, Н. Шамсутдинов, П.В. Зеленихин,
А.С. Низамутдинов, А А. Буглак, Т.А. Телегина
ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ
ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ УФ ДИАПАЗОНА
НА КЛЕТКИ КЕРАТИНОЦИТОВ И ФИБРОБЛАСТОВ9
А.И. Хусаинова, А.С. Низамутдинов, Н.И. Шамсутдинов, С. Калиниченко,
Д.И. Сафин, М. Гафуров, Е.В. Лукинова, С.В. Зинченко,
П.В. Зеленихин, М. Пудовкин.
СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ПЕРСПЕКТИВНЫХ АГЕНТОВ
КОМБИНИРОВАННОЙ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ
НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ $Ce_{0.5}Y_{0.35}Tb_{0.15}F_3$,
КОНЪЮГИРОВАННЫХ С ПРЕПАРАТОМ РАДАХЛОРИН
ПОСРЕДСТВОМ ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА9
Основное научное направление НАУЧНОЕ И МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРАКТИКООРИЕНТИРОВАННОЙ ПОДГОТОВКИ УЧИТЕЛЯ В УСЛОВИЯХ СЕТЕВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВУЗА И ШКОЛЫ
Секция СОВРЕМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ ПЕДАГОГИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ
А.Ф. Зарипова РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ К ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ У СЛАБОУСПЕВАЮЩИХ УЧАЩИХСЯ СТАРШИХ КЛАССОВ9
В.И. Юрова, Г.И. Гарнаева КОЛЛАБОРАЦИЯ ФИЗИКИ И ИЗОБРАЗИТЕЛЬНОГО ИСКУССТВА

Л.А. Нефедьев Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ К КОМПЛЕКСУ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ДИФРАКЦИИ ФРЕНЕЛЯ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ
ПРОФИЛЬНОГО УРОВНЯ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ
УЛУЧШЕНИЕ ВНИМАНИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ФИЗИКИ СРЕДСТВАМИ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ104
Л.А. Нефедьев Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова ВИРТУАЛЬНЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ КОМПЛЕКС «ДИФРАКЦИЯ ФРАУНГОФЕРА» ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ
УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССА
ОРГАНИЗАЦИЯ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ФИЗИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 8 КЛАССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАБОРА "АЗБУКА ФИЗИКИ"
Е.Ю. Фадеева, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВОГО ИНСТРУМЕНТАРИЯ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ПАТРИОТИЧЕСКОГО ВОСПИТАНИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ
ПРИ ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ
Р.М. Мустафин УСПЕВАЕМОСТЬ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ ПО ФИЗИКЕ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ В СЛУЧАЕ АДАПТАЦИИ ИХ К ПРОЦЕССУ ОБУЧЕНИЯ В КФУ

Е Н. Ахмедшина, Д.С. Ирисов, Д.С. Гиляров	
РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ	
К ЛАБОРАТОРНЫМ РАБОТАМ ПО ФИЗИКЕ	
ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 9 КЛАССОВ	
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАБОРА "АЗБУКА ФИЗИКИ"	. 111
Е.Н. Ахмедшина, Э.И. Низамова, И.Е. Коробова	
РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ЧАТ-БОТ	
ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ДЕТЕЙ С НАРУШЕНИЕМ	
ПРИ ИЗУЧЕНИИ ТЕМЫ «МЕХАНИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ И ВОЛНЫ»	
В 9 КЛАССЕ	.112

ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ ГИДРАТА МЕТАНА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Роман Валерьевич Власов, Анатолий Васильевич Мокшин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: roman.vlasoff@outlook.com

Ключевые слова: молекулярная динамика, гидрат метана, газовые гидраты, кристаллизация.

Газовые гидраты — это кристаллические соединения, которые остаются стабильными при высоком давлении и низкой температуре. Они состоят из водных клеток (хозяин), в которые вложены молекулы - гости [1]. Интерес к гидратам природного газа вызван возможностями их применения: источник углеводородного топлива, транспортировка энергии, опреснение воды и газоразделение. В то время как термодинамика образования и диссоциации газовых гидратов относительно хорошо изучена [2], процесс их зарождения и формирования остаются предметом обширных исследований [3].

В данной работы исследовался процесс зародышеобразования гидрата метана при $T=250~{\rm K}$ и $p=50~{\rm MPa}$ в рамках моделирования молекулярной динамики. Зерно критического размера определялось в рамках метода MFPT с помощью кластерного анализа и параметра порядка MCG. Получены нуклеационные характеристики, а также процентное содержание гидратных клеток различного типа в зерне критического размера.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

- 1. Sloan, E.D. Fundamental principles and applications of natural gas hydrates / E.D. Sloan // Nature. -2003. Vol. 426. No. 6964. P. 353–363.
- 2. Hester, K.C. Clathrate hydrates in nature / K.C. Hester, P.G. Brewer // Annual Review of Marine Science. 2009. Vol. 1. P. 303–327.
- 3. Guo, G.J. Open questions on methane hydrate nucleation / G.J. Guo, Z.C. Zhang // Communications Chemistry. 2021. Vol. 4. P. 102.

СОВРЕМЕННЫЕ ТРЕНДЫ В ДИЗАЙНЕ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Булат Наилевич Галимзянов, Мария Алексеевна Доронина, Анатолий Васильевич Мокшин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: bulatgnmail@gmail.com

Ключевые слова: машинное обучение, дизайн материалов, вычислительная физика, металлические сплавы

Разработка и внедрение методов создания металлических сплавов с заданными механическими свойствами являются одним из наиболее перспективных направлений современного материаловедения [1]. Методы машинного обучения являются подходящим дополнением к эмпирическим методам, связанным с синтезом и испытанием материалов различного состава. В настоящей работе предложен метод определения аморфных металлических сплавов с механическими свойствами, наиболее близкими к требуемым [2]. Рассмотрено более 50 000 сплавов различного состава. С помощью модели машинного обучения, обученной на фундаментальных физических свойствах химических элементов, для рассмотренных сплавов оценены модуль Юнга и предел текучести. Статистическая обработка полученных результатов показывает, что наиболее значимыми факторами являются фундаментальные физические свойства химического элемента с наибольшей массовой долей, значения которых коррелируют со значениями механических свойств сплавов, в состав которых входит этот элемент. Показано, что значения модуля Юнга и предела текучести выше для металлических сплавов на основе Cr, Fe, Co, Ni, Nb, Mo и W, образованных добавкой полуметаллов, неметаллов и лантаноидов, чем для сплавов других составов.

Список литературы

1. Rodrigues, J.F. Big data and machine learning for materials science / J.F. Rodrigues Jr., L. Florea, M.C.F.de Oliveira, D. Diamond, O.N. Oliveira Jr. // Discov. Mater. – 2021. – V. 1. – P. 12. 2. Galimzyanov, B.N. Neural Network as a Tool for Design of Amorphous Metal Alloys with Desired Elastoplastic Properties / B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin // Metals. – 2023. – V. 13. – P. 812.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ АРРЕНИУСОВСКОГО ПЕРЕХОДА АМОРФООБРАЗУЮЩИХ ЖИДКОСТЕЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Мария Алексеевна Доронина, Булат Наилевич Галимзянов, Анатолий Васильевич Мокшин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: maria.doronina.0211@gmail.com

Ключевые слова: машинное обучение, нейронные сети, физическое материаловедение, теплофизические характеристики

В настоящей работе с помощью модели машинного обучения выполнен расчёт температуры T_A для силикатов, боратов, органических соединений и металлических систем различного состава. В качестве входных параметров использовались эмпирические значения температуры стеклования T_g , температуры плавления T_m , отношения этих температур T_g/T_m и индекс хрупкости m [1]. Установлено, что температуры T_g и T_m являются значимыми параметрами, в то время как их отношение T_g/T_m и индекс хрупкости m практически не коррелируют с температурой T_A [2]. Получено уравнение регрессионной модели, связывающее температуры T_g , T_m и T_A и представляющее собой уравнение для искривленной поверхности второго порядка. Показано, что это уравнение позволяет выполнить корректную оценку температуры T_A для широкого класса материалов, независимо от их состава и аморфообразующей способности [3].

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

- 1. Mauro, N.A. A structural signature of liquid fragility / N.A. Mauro, M. Blodgett, M.L. Johnson, A.J. Vogt, K.F. Kelton // Nat. Commun. 2014. №5. C. 4616.
- 2. Angell, C.A. Formation of Glasses from Liquids and Biopolymers / C.A. Angell // Science. 1995. №267. C. 1924.
- 3. Galimzyanov, B.N. Arrhenius Crossover Temperature of Glass-Forming Liquids Predicted by an Artificial Neural Network / B.N. Galimzyanov, M.A. Doronina, A.V. Mokshin // Materials. 2023. №16. C. 1127.

ОБОБЩЕННОЕ ОПИСАНИЕ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОРИСТОГО МАТЕРИАЛА

Георгий Андреевич Никифоров, Булат Наилевич Галимзянов, Анатолий Васильевич Мокшин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: nikiforov121998@mail.ru

Ключевые слова: механические свойства, пористый никелид титана

Пористые материалы являются перспективными материалами за счет своих уникальных свойств в различных отраслях промышленности для облегчения конструкционных материалов, а также в качестве материалов для имплантов [1]. На свойства пористых систем влияют такие параметры пористой структуры, как морфология, пористость, средние линейные размеры пор и межпоровых перемычек. В связи с этим актуальны задачи по нахождению численной зависимости различных характеристик пористой системы от параметров пористой структуры.

В настоящей работе были исследованы зависимости таких механических характеристик, как модуль Юнга, пределы текучести и упругости от значений пористости и среднего линейного размера пор. Были проанализированы данные образцов со средними линейными размерами пор от нескольких нанометров до десятков микрометров. Материал с нанометровыми порами был изучен с помощью методов моделирования молекулярной динамики, в то время как материал с микропорами был получен и изучен на эксперименте. Главным результатом проведенного исследования стало обобщенное выражение зависимости механических свойств от пористости и среднего линейного размера пор, опубликованное в работе [2].

Работа выполнена в рамках программы «Приоритет-2030».

- 1. Liu, P.S. Porous Materials. Processing and Applications / P.S. Liu, G.F. Chen. Butterworth-Heinemann: Elsevier, 2014. 560 p.
- 2. Galimzyanov, B.N., A Unified Empirical Equation for Determining the Mechanical Properties of Porous NiTi Alloy: From Nanoporosity to Microporosity / B.N. Galimzyanov, G.A. Nikiforov, S.G. Anikeev, N.V. Artyukhova, A.V. Mokshin // Crystals. 2023. V.13(12). P.1656.

ПРИБЛИЖЕНИЕ СЛАБО ЗАТУХАЮЩИХ КОЛЛЕКТИВНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ДЛЯ СИЛЬНО НЕИДЕАЛЬНОЙ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ ПЛАЗМЫ

Ильназ Изаилович Файрушин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: IIFajrushin@kpfu.ru

Ключевые слова: неидеальная плазма, коллективная динамика, затухание.

Одним из широко изучаемых типов неидеальной плазмы является однокомпонентная плазма Юкавы. Данная модель применяется как первое приближение при описании физических свойств таких объектов, как пылевая плазма, ультрахолодная плазма, плазма в устройствах по инерциальному термоядерному синтезу и др. [1].

В данной работе на основе самосогласованной релаксационной теории рассматривается приближение слабозатухающих коллективных возбуждений в жидкости Юкавы. Построенное приближение основано на самосогласованной релаксационной теории коллективной динамики и ранее установленных корреляционных соотношениях, связывающих параметры, характеризующие трех- и четырехчастичные корреляции с параметром, характеризующим парные корреляции в плазме Юкавы [2]. Расчеты динамического структурного фактора и дисперсионных характеристик, при помощи полученных аналитических выражений, дают результаты, которые при малых волновых числах согласуются с данными моделирования для всех рассмотренных (Г, к)-состояний. Показано, что разработанный подход является простым обобщением известного приближения квазилокализованного заряда [1].

- 1. Fortov, V.E. Complex (dusty) plasmas: Current status, open issues, perspectives / V.E. Fortov, A.V. Ivlev, S.A. Khrapak, A.G. Khrapak, G.E. Morphill // Phys. Rep. 2005. Vol. 421. P. 1.
- 2. Mokshin, A.V. Self-consistent relaxation theory of collective ion dynamics in Yukawa one-component plasmas under intermediate screening regimes / A.V. Mokshin, I.I. Fairushin, I.M. Tkachenko // Phys. Rev. E. 2022. Vol. 105. P. 025204.

УСКОРЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ПОМОЩИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Роман Альбертович Хабибуллин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: px@kpfu.ru

Ключевые слова: молекулярная динамика, машинное обучение

Метод классической молекулярной динамики широко используется для решения самых разных задач в физике, химии, материаловедении, биологии и медицине. В основе данного метода лежит ключевая идея статистической физики о том, что любой материал представляет собой ансамбль большого числа взаимодействующих друг с другом частиц [1, 2]. В каждый момент времени этим частицам сопоставляются координаты и импульсы, которые вычисляются путем интегрирования классических уравнений движения. Характер взаимодействия частиц при этом зависит от заданного потенциала взаимодействия.

В настоящей работе предлагается оригинальный метод ускорения молекулярнодинамического моделирования. Данный метод предполагает внесение изменений в способ расчета сил взаимодействия частиц — наиболее вычислительно затратную процедуру в молекулярной динамике. На основе потенциала взаимодействия рассчитывается лишь небольшая часть от общего числа межчастичных взаимодействий в системе. Окончательные значения сил взаимодействия восстанавливаются при помощи методов машинного обучения. Такой подход позволяет значительно повысить производительность моделирования без существенных потерь в точности. Применимость метода исследуется на примере двух систем: леннард-джонсовского сверхкритического флюида и многочастичной конденсированной Юкава системы.

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030». Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета.

- 1. Hansen, J.P. Theory of simple liquids: with applications to soft matter / J.P. Hansen, I.R. McDonald Academic press, 2013. 636 p.
- 2. Галимзянов, Б.Н. Основы моделирования молекулярной динамики / Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин Казань: К Φ У, 2016. 107 с.

ВЯЗКОСТНЫЕ СВОЙСТВА РАСПЛАВОВ НИКЕЛЬ-ФОСФОР

Рания Рустамовна Хайруллина

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: raniya-art@mail.ru

Ключевые слова: транспортные свойства, вязкость, микроскопическая динамика, переохлажденный расплав.

В работе исследуются локальные структурные особенности, микроскопическая коллективная динамика и транспортные свойства бинарного металлического расплава никель-фосфор для широкой области значений температур, включая область равновесной жидкой фазы и переохлажденного расплава. Моделирование расплавов $Ni_{(100-x)}P_x$ (для составов x=0, 10, 20, 30, 40 и 50 ат.%) выполнялось в NpT-ансамбле при давлении p=1.0 бар для диапазона температур T=[1200; 2000] K. Рассчитанные структурные характеристики (парная функция распределения и статический структурный фактор) находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по дифракции рентгеновских лучей. На основе расчета спектров микроскопического потока найдены законы дисперсии продольных и поперечных акустико-подобных коллективных мод. Установлено, что температурные зависимости ширины щели в законе дисперсии поперечных акустико-подобных коллективных мод $k_{gap}(T)$ хорошо воспроизводятся линейными зависимостями. Выполнено сопоставление экспериментальных данных по вискозиметрии и результатов моделирования атомарной/молекулярной динамики с целью уточнения данных по вязкости, а также по выявлению особенностей квазитвердотельного поведения в бинарных металлических расплавах. Результаты моделирования для концентрационных и температурных зависимостей вязкости расплавов никель-фосфор находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Выполнена численная оценка вклада парной корреляционной энтропии в конфигурационную энтропию в бинарных металлических расплавах. Установлено, что транспортные характеристики расплавов никель-фосфор при различных составах хорошо воспроизводятся квазиуниверсальными моделями Дзугутова и Розенфельда.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ДИССОЦИАЦИИ ГИДРАТА МЕТАНА

Рамиль Миннегаязович Хуснутдинов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: khrm@mail.ru

Ключевые слова: молекулярная динамика, диссоциация, sI-гидрат метана.

В работе исследуются процессы диссоциации sI-гидрата метана при давлении 100 атмосфер и нагреве с 250 К до 450 К. Моделирование выполнялось в NpTансамбле в программном комплексе LAMMPS. Исходная система состояла из 27 (3×3×3) элементарных ячеек sI-гидрата метана. Взаимодействие между молекулами воды осуществлялось посредством потенциала взаимодействия TIP4P/Ice, модель OPLS-UA применялась для учета взаимодействия между молекулами метана. Для нахождения параметров є и о перекрестного взаимодействия между водой и метаном применялись правила смешивания Лоренца-Бертло. Система состояла из 1242 атомов кислорода, 2484 атомов водорода и 216 молекул метана. Моделирование проводилось для восьми различных конфигураций систем при заданных значениях (р,Т). Анализ процесса диссоциации молекул газогидрата осуществлялся качественно и количественно с помощью структурного и кластерного анализа, а также путем отслеживания за термодинамическими параметрами системы (температуры, давления, плотности, величины потенциальной энергии и других). Плавлению кристалла гидрата метана, предшествовал достаточно длительный промежуток времени, где происходил линейный рост термодинамических характеристик системы. Установлено, что на характеристическом временном масштабе т≈9 нс при температуре системы Т=425 К, происходит разрыв водородных связей в отдельных полостях решетки и практически мгновенно происходит разрушение структуры гидрата, с последующим формированием двухфазной жидкой системы "метан-вода". Число молекул воды, образующих структуру гидрата до момента 9 нс монотонно снижается. Фазовому переходу соответствует скачкообразное падение их количества до нуля. Отслеживаемые термодинамические характеристики системы также испытывают резкий скачок в данный момент времени. Сравнивая данные параметры для всех моделирований, установлено, что процесс протекает одинаково во всех независимых молекулярно-динамических итерациях.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЖИДКОЙ СУРЬМЫ: AB-INITIO АНАЛИЗ

Артем Алексеевич Цыганков, Булат Наилевич Галимзянов, Анатолий Васильевич Мокшин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: tsigankov.artiom@yandex.ru

Ключевые слова: жидкая сурьма, ab-initio моделирование, дифракция, кластерный анализ.

Равновесный расплав сурьмы вблизи плавления характеризуется особенностями в структуре в виде плеча в радиальной функции распределения g(r) и статическом структурном факторе S(k), причина которого не исследована и в настоящее время [1]. Цель работы — интерпретация структуры жидкой сурьмы, используя методы ab-initio моделирования и доступные экспериментальные данные. Для воспроизведения структуры расплава сурьмы было проведено ab-initio моделирование молекулярной динамики при температуре T = 923 K и давлению P = 1 атм в пакете VASP.

Для обнаружения кристаллоподобных структур были проведены расчеты распределений локального ориентационного порядка q₄ и q₆, которые показали отсутствие таковых. Также, чтобы проверить принципиальное наличие упорядоченных образований в расплаве, рассчитывались распределения пар атомов по временам соседства [2]. Полученные результаты указывают на то, что в сурьме вблизи плавления реализуются, по крайней мере, пары связанных атомов. Для характеризации структур, реализующихся в расплаве, был произведен расчет распределений по углам и длинам связей. Обнаружено, что структурные образования представляют собой триплеты с длинами связи 3.07 Å и 4.7 Å, и углами 45° и 90°.

- 1. Jones, R.O. Density functional study of structure and dynamics in liquid antimony and Sbn clusters / R. O. Jones, O. Ahlstedt, J. Akola, M. Ropo // The Journal of Chemical Physics. 2017. №146(19). P. 194502.
- 2. Mokshin, A.V. Extended short-range order determines the overall structure of liquid gallium / A.V. Mokshin, R.M. Khusnutdinoff, B.N. Galimzyanov, V.V. Brazhkin // Physical Chemistry Chemical Physics. 2020. №22(1). P. 4122-4129.

ПРЕДСКАЗАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МНОГОАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ МАТРИЦ КУЛОНА МЕТОДОМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Мухаммадбек Бехзодович Юнусов, Рамиль Миннегаязович Хуснутдинов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: mukhammadbek@mail.ru

Ключевые слова: энергия атомизации, матрица Кулона, нейронные сети

Ключом к мгновенному предсказанию свойств многоатомных систем может стать комбинирование первопринципных методов и методов машинного обучения. В данной работе развивается метод, основанный на использовании матриц Кулона [1, 2] для представления конфигурации молекулы и использовании нейронной сети для выявления закономерностей между строением молекулы и ее энергетическими характеристиками. В качестве величины для тестирования модели выбрана энергия атомизации E_{at} (энергия, необходимая для расщепления молекулы на отдельные атомы). В качестве данных для обучения и тестирования модели, использован набор данных QM7 [1], содержащий конфигурацию и характеристики молекул, состоящих из элементов H, C, N, O, S и включающих не более 23 атомов, величина набора составляет 7165 систем. Матрица Кулона, элементы который используются в качестве входных сигналов нейронной сети, хранит данные о координатах R_i и зарядах Z_i атомов системы в виде диагональных компонент $C_{ii} = Z_i^{2.4}/2$ и недиагональных компонент $C_{ik} = Z_i Z_k / |R_i - R_k|$. Наибольшую точность в 8.1 ккал/моль (0.5 % от средней величины E_{at} в представленном наборе) при предсказании энергии атомизации продемонстрировала модель, имеющая конфигурацию 5×529 нейронов, функцию активации слоев ReLu и алгоритм градиентного спуска Adam. Таким образом, применение обучаемых моделей в комплексе с результатами прямого молекулярного или квантовомеханического моделирования открывают широкие перспективы для быстрого и эффективного прогнозирования свойств многочастичных систем.

- 1. Rupp, M. Fast and Accurate Modeling of Molecular Atomization Energies with Machine Learning / M. Rupp et al. // Physical review letters 2012. V. 108, I. 5 Art. No. 058301
- 2. Montavon, G. Learning Invariant Representations of Molecules for Atomization Energy Prediction / G. Montavon et al. // Advances in neural information processing systems 2012. V. 25. P. 31(1-9)

ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СОСТАВА СМЕСЕЙ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА И ПОЛИВИНИЛБУТИРАЛЯ НА СТЕПЕНЬ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ

Ольга Александровна Кочурова, Дина Илевна Камалова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: dina.kamalova@kpfu.ru

Ключевые слова: ИК-спектры поглощения, бинарная полимерная смесь, степень кристалличности, мембранное разделение

Многие полимеры являются частично кристаллическими, то есть они содержат аморфные и кристаллические области. Наличие кристаллитов в полимере может оказывать сильное влияние на эффективность мембранного разделения как по отношению к газам, так и по отношению к жидкостям, осуществляемого с помощью полимерных мембран. Поэтому исследование кристалличности полимерных систем представляется в настоящее время актуальным для создания мембранных материалов с требуемыми свойствами.

В данной работе изучается влияние состава смеси полимеров на кристалличность бинарной полимерной смеси, используемой для изготовления ультрафильтрационной мембраны. При этом применяется метод ИК-фурьеспектроскопии. В работе получены температурные зависимости спектральных характеристик полос поглощения смеси поливинилхлорида с поливинилбутиралем в области 500–800 см⁻¹ в температурном диапазоне 200-500 К. Разложение сложных спектральных контуров на элементарные составляющие в изучаемой спектральной области позволило выделить структурно-чувствительные полосы поглощения, характеризующие упорядоченное и разупорядоченное состояния исследуемых полимерных образцов пленок. Изучение влияния температуры на структурно-чувствительные полосы поглощения ИК-фурье-спектра бинарной смеси дало возможность определить степень кристалличности исследуемых смешанных полимерных образцов разного состава.

УПРАВЛЕНИЕ ЧАСТОТАМИ ФОТОНОВ, ИЗЛУЧАЕМЫХ КВАНТОВОЙ ТОЧКОЙ В ОДНОМЕРНОЙ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СРЕДЕ

Адель Ильдусович Гарифуллин, Ренат Хамитович Гайнутдинов, Марат Актасович Хамадеев

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: adel-garifullin@mail.ru

Ключевые слова: фотонные кристаллы, квантовые точки, квантовая электродинамика

Фотонные структуры на основе квантовых точек (КТ) являются перспективной системой для создания однофотонных источников и детекторов [1], устройств нанофотоники и наноплазмоники, фотовольтаики и пр. [2, 3].

В данной работе показана возможность управления спектром излучения одиночной КТ InAs, помещенной на поверхность одномерного фотонного кристалла (ФК). ФК состоит из периодического массива вакуумных полостей в GaAs. Мы рассмотрели три механизма управления спектром излучения одиночной КТ в ФК: модификация электромагнитной массы электрона в среде ФК [4], инжекция свободных носителей заряда и квадратичный электрооптический эффект Керра [5]. Настройка показателя преломления слоев GaAs осуществлялась последними двумя механизмами.

- 1. Krasheninnikov, A.V. Elementary quantum-dot gates for single-electron computing / A.V. Krasheninnikov, L.A. Openov // JETP Lett. 1996. V. 64. P. 231-236.
- 2. Hosokawa, H. Solution-processed intermediate-band solar cells with lead sulfide quantum dots and lead halide perovskites / H. Hosokawa, R. Tamaki, T. Sawada et al. // Nat. Commun. 2019. V. 10. N 1. P. 43.
- 3. Eremchev, I.Y. Multifunctional far-field luminescence nanoscope for studying single molecules and quantum dots: (50th anniversary of the Institute of Spectroscopy, Russian Academy of Sciences) / I.Y. Eremchev, M.Y. Eremchev, A.V. Naumov // Phys.-Uspekhi. 2018. V. 62. № 3. P. 294.
- 4. Gainutdinov, R. Kh. Electron rest mass and energy levels of atoms in the photonic crystal medium / R.Kh. Gainutdinov, M.A. Khamadeev, M,Kh. Salakhov // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. N_{\odot} 5. P. 053836.
- 5. Mondia, J.P., Ultrafast tuning of two-dimensional planar photonic-crystal waveguides via free-carrier injection and the optical Kerr effect / J.P. Mondia, H.W. Tan, S. Linden et al. // JOSA B. 2005. V. 22. № 11. P. 2480-2486.

ВЛИЯНИЕ ИОНОВ КАЛЬЦИЯ НА МОРФОЛОГИЮ И СТРУКТУРУ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН СО ВСТРОЕННЫМ БЕТА-АМИЛОИДНЫМ ПЕПТИДОМ

Сергей Александрович Куракин^{1,2}, Александр Игоревич Иваньков², Сергей Владимирович Ефимов¹, Тимур Анварович Мухаметзянов¹, Норберт Кучерка^{2,3}

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University

² Россия, Дубна, Объединенный институт ядерных исследований Russia, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research

³ Словакия, Братислава, Университет им. Я.А. Коменского Slovakia, Bratislava, Comenius University Bratislava E-mail: ksa18@list.ru

Ключевые слова: бета-амилоидный пептид, липидная мембрана

В работе было исследовано влияние ионов кальция на структуру липидных мембран в присутствии бета-амилоидного пептида $A\beta_{25-35}$, который, как считается, является причиной возникновения болезни Альцгеймера. С помощью малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновского излучения было показано, что молекулы $A\beta_{25-35}$ увеличивают жесткость липидной мембраны, в то время как добавление ионов кальция в систему вызывает противоположный эффект разжижжения. Однако кальций не предотвращает индуцируемое $A\beta_{25-35}$ разрушение мембраны, а именно наблюдается морфологическая реорганизация липидных объектов между плоскими бицеллоподобными структурами и сферическими однослойными везикулами при пересечении температуры основного фазового перехода липидов. Упомянутые эффекты становятся важными при поиске механизмов разрушения липидных мембран бета-амилоидными пептидами, демонстрирующими свои токсические свойства [1].

Список литературы

1. Kurakin, S. Arrangement of lipid vesicles and bicelle-like structures formed in the presence of $A\beta(25\text{-}35)$ peptide / S. Kurakin, D. Badreeva, E. Dushanov, A. Shutikov, S. Efimov, A. Timerova, T. Mukhametzyanov, T. Murugova, O. Ivankov, K. Mamatkulov, G. Arzumanyan, V. Klochkov, N. Kučerka // Biochimica et Biophysica Acta – Biomembranes. – 2024. – V. 1866. – P. 184237:1-11.

КОРРЕЛИРОВАННАЯ ИОННАЯ ДИНАМИКА В ПЛАСТИЧЕСКИХ ИОННЫХ КРИСТАЛЛАХ И ИОННЫХ ЖИДКОСТЯХ

Айрат Альбертович Хамзин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: airat.khamzin1976@gmail.com

Ключевые слова: диффузия ионов, ионные корреляции, ионная проводимость, ионные жидкости, пластические ионные кристаллы, ионность.

Концентрированные ионные системы (КИС) являются многообещающими альтернативами традиционным электролитам суперконденсаторов и аккумуляторов, благодаря их улучшенным электрохимическим свойствам [1]. Среди них заметную роль играют ионные жидкости (ИЖ) [2] и органические пластические ионные кристаллы (ОПИК) [3]. Несмотря на преимущества КИС, ионная проводимость в них остается достаточно низкой.

В данной работе, в рамках теории линейного отклика были проанализированы результаты измерения спектров проводимости и коэффициентов диффузии, а также результаты моделирования молекулярной динамики ИЖ [BMIM][BF4], [BMIM][PF6], [BMIM][TFSI] и ОПИК [PF6][P1,2,2,4]. Анализ показал, что основными причинами подавления проводимости в изучаемых системах являются сильные ионные корреляции. Для ИЖ показано, что за подавление проводимости ответственны анион-анионные и катион-катионные корреляции, причем они существенно зависят от отношения масс аниона и катиона, в свою очередь катион-анионные корреляции увеличивают проводимость. Для ОПИК показано, что уменьшение подвижности катионов в твердотельной фазе за счет их захвата в кулоновскую клетку из ближайших ионов в элементарной ячейке кристалла, приводит к сильному увеличению анион-анионных корреляций, которые ответственны за подавление проводимости.

- 1. Li, M. New concepts in electrolytes / M. Li, C. Wang, Z. Chen, K. Xu, J. Lu //Chemical reviews. -2020.-T. 120. No. 14. C. 6783-6819.
- 2. Shah, F.U. Properties and applications of ionic liquids in energy and environmental science / F.U. Shah, R. An, N. Muhammad // Frontiers in Chemistry. 2020. V. 8. P. 627213.
- 3. Zhu, H. Organic ionic plastic crystals as solid-state electrolytes / H. Zhu, D.R. MacFarlane, J.M. Pringle, M. Forsyth // Trends in Chemistry. 2019. V. 1, No. 1. P. 126-140.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ И ТЕРАГЕРЦЕВОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ТИТАНАТА ТЕРБИЯ СО СТРУКТУРОЙ ПИРОХЛОРА

Вера Вадимовна Клековкина

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: vera.klekovkina@kpfu.ru

Ключевые слова: редкоземельные пирохлоры, энергетический спектр, случайные деформации.

Основной и первый возбужденный уровни энергии иона Tb^{3+} в тригональном кристаллическом поле совершенного кристалла $Tb_2Ti_2O_7$ должны быть вырождены (некрамерсовы дублеты). Энергия возбужденного уровня энергии $\sim 12~{\rm cm}^{-1}$. В низкоэнергетической части спектров неупругого рассеяния нейтронов наблюдается асимметричная линия в области энергий $\sim 1~{\rm cm}^{-1}$ [1]. В спектрах терагерцевого поглощения наблюдается широкая линия со слабо разрешенной структурой в области частот, соответствующих энергиям $10\text{-}22~{\rm cm}^{-1}$ [2]. Наличие этих линий может быть объяснено расщеплением основного и первого возбужденного дублетов кристаллическим полем низкой симметрии, которое индуцируется дефектами кристаллической решетки. В данной работе были выполнены расчеты спектров, соответствующих магнитным дипольным переходам между подуровнями основного дублета и между подуровнями основного и первого возбужденного дублетов, расщепленных полем случайных деформаций [3].

- 1. Gaulin, B.D. Quenched crystal-field disorder and magnetic liquid ground states in $Tb_2Sn_{2-x}Ti_xO_7$ / B.D. Gaulin, E. Kermarrec, M.L. Dahlberg, et al. // Phys. Rev. B. -2015. V. 91. Art. 245141.
- 2. Amelin, K. Terahertz magneto-optical investigation of quadrupolar spin-lattice effects in magnetically frustrated $Tb_2Ti_2O_7$ / K. Amelin, Y. Alexanian, U. Nagel, et al. // Phys. Rev. B. -2020.-V.102.-Art.134428.
- 3. Malkin, B.Z. Distribution function of random strains in an elastically anisotropic continuum and defect strengths of Tm³⁺ impurity ions in crystals with zircon structure B.Z. Malkin, N.M. Abishev, E.I. Baibekov, et al. // Phys. Rev. B. 2017. V. 96. Art. 014116.

КВАНТОТВО-ХИМИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ НА КВАНТОВОМ КОМПЬЮТЕРЕ

Константин Михайлович Макушин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: llconstantinel@gmail.com

Ключевые слова: квантовые вычисления, виртуальный эксперимент, моделирование физических явлений, программная библиотека

Сложность традиционных вычислительных методов в точном предсказании молекулярных свойств делает квантовые компьютеры исключительно важными для этой области. Однако, для полноценного использования потенциала квантовых вычислений в квантовой химии, необходимо разработать новые квантовые алгоритмы. В этом контексте особый интерес представляют вариационные алгоритмы [1], которые являются перспективными кандидатами для использования на NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) компьютерах [2]. С целью развития данного направления была разработана программная библиотека на языке Python. Представленный код позволяет рассчитывать энергии основного и возбужденных состояний для молекулярных систем, как на классическом компьютере, так и на квантовом процессоре. В библиотеке реализованы как общая структура вариационных алгоритмов, так и встроенные версии известных алгоритмов (Variational Quantum Eigensolver, Adaptive-VQE). Особенностью библиотеки является возможность гибко менять алгоритм под нужды пользователя, что особенно важно для разработчиков новых алгоритмов и исследователей. Также библиотека поддерживает программное пакеты классических квантово-химических вычислений, что позволяет проводить бенчмаркинг при тестировании новых разработанных алгоритмов.

- 1. Makushin, K.M., Baibekov, E.I. "Quantum computation of the lowest-energy Kramers states and magnetic g-factors of rare earth ions in crystals" / K.M. Makushin, E.I. Baibekov // Magn. Reson. Solids. 2023. T. 25. № 23204. CTp. 1-11.
- 2. Preskill, J. "Quantum Computing in the NISQ era and beyond" / J. Preskill // Quantum. 2018. №2. C. 79. URL: https://quantum-journal.org/papers/q-2018-08-06-79/ (date of reference: 01.01.2024).

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ НА КРИТИЧЕСКУЮ ТЕМПЕРАТУРУ В НЕОБЫЧНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКАХ

Фаиль Мансурович Сираев, Максим Викторович Авдеев, Юрий Николаевич Прошин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: siraevfail@mail.ru

Ключевые слова: Необычная сверхпроводимость, вариационная теория возмущений

В данном исследовании предложен подход к описанию 2D d-волнового сверхпроводящего состояния, учитывающий флуктуации параметра порядка. Взаимодействие пар в системе описывается суперобменным потенциалом, включающим s- и d-компоненты. Используя вариационную теорию возмущений, получено эффективное действие для двух-компонентного сверхпроводящего параметра порядка Φ , аналогичное эффективному действию Коулмана-Вайнберга [1]. Путем минимизации этого действия определяются компоненты Φ_s и Φ_e , что позволяет найти энергетически наиболее выгодную конфигурацию параметра порядка, учитывая взаимодействие s- и d-компонент.

Введение флуктуаций параметра порядка улучшает реалистичность описания системы, особенно в контексте низкоразмерных материалов [2]. Наличие обеих s- и d-компонент в параметре порядка отражает возможность необычного спаривания в системе. Вариационная теория возмущений в данном контексте предоставляет мощный инструмент для работы с сильными связями и улавливает квантовые флуктуации за пределами теории среднего поля. Полученное эффективное действие предоставляет основу для понимания поведения системы, особенно в контексте взаимодействия различных компонент параметра порядка.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета.

- 1. Coleman, S. Radiative corrections as the origin of spontaneous symmetry breaking / S. Coleman, E. Weinberg // Physical Review D. 1973. V. 7. No. 6. P. 1888.
- 2. Uchihashi, T. Two-dimensional superconductors with atomic-scale thickness / T. Uchihashi // Superconductor Science and Technology. 2016. V. 30. No. 1. P. 013002.

МЕТОД ПОИСКА КРИТИЧЕСКОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ И САМОСОГЛАСОВАННОГО ПАРАМЕТРА ПОРЯДКА В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ СВЕРХПРОВОДНИК / НЕОДНОРОДНЫЙ ФЕРРОМАГНЕТИК.

Вадим Александрович Туманов, Юрий Николаевич Прошин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: tumanvadim@yandex.ru

Ключевые слова: эффект близости, сверхпроводник, ферромагнетик, параметр порядка, уравнение самосогласования, доменная стенка, скирмион.

Эффект близости сверхпроводника и ферромагнитного металла вызывает большой интерес из-за многообразия интересных и практически важных эффектов [1]. Наиболее удобным инструментом для описания таких систем на данный момент является теория эффекта близости в рамках квазиклассических уравнений сверхпроводимости. В грязном пределе [1] такая теория состоит из краевой задачи для уравнений Узаделя и уравнения самосогласования. Метод, предложенный в работе [2] позволяет найти критическую температуру и профиль параметра порядка в гетероструктурах, содержащих однородные ферромагнитные слои. Предложенный нами численный метод позволяет сильно расширить круг рассматриваемых систем.

Стартуя с затравочного распределения параметра порядка, мы вычисляем функцию Узаделя. С ее помощью мы пересчитываем распределение параметра порядка и критическую температуру на следующей итерации. Когда параметр порядка на соседних итерациях совпадает с заданной точностью, самосогласованная краевая задача считается решенной. В рамках такого подхода мы рассмотрели гетероструктуры, содержащие различные сверхпроводники и неоднородные в магнитном отношении слои. В качестве неоднородностей выступали скирмионы, доменные стенки, геликоидальная и коническая намагниченность.

- 1. Efetov, K.B. Proximity effects in ferromagnet/superconductor heterostructures / K.B. Efetov, I.A. Garfullin, A.F. Volkov, K. Westerholt // Springer Tracts Mod. Phys. 2008. V. 227. P. 251-290.
- 2. Fominov, Y.V. Nonmonotonic critical temperature in superconductor/ferromagnet bilayers / Y.V. Fominov, N.M. Chtchelkatchev, A.A. Golubov // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 014507.

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОЛНОСИММЕТРИЧНЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ НА ФОРМУ ЗАПРЕЩЕННОГО ПО СИММЕТРИИ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ОПТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПРИМЕСНОГО ЦЕНТРА

Мамаду Джигуиба, Олег Валерьевич Соловьев

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: djlguiba@yandex.ru

Ключевые слова: электронно-колебательное взаимодействие, электрические дипольные переходы, теория возмущений.

Рассматривается запрещенный по симметрии электрический дипольный переход между электронными состояниями $|a^0>$ и $|b^0>$ примесного центра. Переход может быть разрешен линейным по нормальной координате q электронно-колебательным взаимодействием $\hat{v}\cdot q$, примешивающим к состоянию $|b^0>$ состояние другой симметрии $|c^0>$. В первом порядке теории возмущений для электронной подсистемы вес полосы, соответствующий рождению k квантов колебаний при поглощении фотона на переходе $a\to b$, равен в адиабатическом приближении квадрату модуля величины

$$\left\langle arphi_0(q) \left| rac{\left\langle a^0 \left| \hat{d} \left| c^0 \right
angle \cdot q \cdot \left\langle c^0 \left| \hat{v} \right| b^0
ight
angle}{E_b^0 - E_c^0} \left| arphi_k(q - q_b)
ight
angle,$$

где $\varphi_k(q)$ — волновая функция линейного гармонического осциллятора с числом заполнения $k,\ q_b$ — равновесное значение нормальной координаты в электронном состоянии b. Таким образом, форма спектра определяется взаимодействием с неполносимметричными колебаниями, связывающим состояния $|b^0>$ и $|c^0>$ разной симметрии. В настоящей работе предпринята попытка улучшить данное описание посредством «точного» учета взаимодействия с полносимметричными колебаниями, диагонального по электронным состояниям. Это приводит к появлению в знаменателе выражения вида $E_b^0+\left\langle b^0 \middle| \hat{v} \middle| b^0 \right\rangle \cdot q - E_c^0 - \left\langle c^0 \middle| \hat{v} \middle| c^0 \right\rangle \cdot q$, что, как было показано, в некоторых ситуациях дает существенное изменение веса полосы в спектре поглощения.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВРЕМЕНИ КОРРЕЛЯЦИИ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО ЗАТУХАЮЩЕЙ МАГНИТНОЙ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ С ПОМОЩЬЮ ДВУХКВАНТОВОГО РЕЗОНАНСА

Иван Вадимович Брекоткин¹, Наиль Фидаиевич Фаткуллин², Кай Заальвехтер²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university
²Германия, Халле, Галле-Виттенбергский университает имени Мартина Лютера
Germany, Halle (Saale), Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
E-mail: brekotkin.ivan@yandex.ru

Ключевые слова: ЯМР, двухквантовый резонанс, время корреляции, магнитная диполь-дипольная корреляционная функция.

В данной работе мы получили выражение для нормированной интенсивности двухквантового (ДК) сигнала для экспоненциальной корреляционной функции магнитного диполь-дипольного взаимодействия с учётом эффектов, связанных с пространственным смещением спинов между радиочастотные импульсами в последовательности Баума-Пэйнса [1].

То обстоятельство, что величина, характеризующая вклад, обусловленный движением спинов, зависит только от отношения времени действия элементарной единицы последовательности Баума-Пайнса [1] Δ и времени корреляции τ , характеризующего экспоненциальный спад вышеупомянутой корреляционной функции, позволило нам предложить способ экспериментального измерения τ посредством двух последовательных измерений нормированной интенсивности ДК сигнала для последовательности Баума-Пайнса с разными временами Δ .

Мы благодарим Немецкий исследовательский фонд (DFG) за финансирование гостевой профессуры для Н.Ф. в рамках SFB-TRR 102 (project A01, project -ID 189853844).

Список литературы

1. Brekotkin, I.V. On the theory of the spin I= 1/2 double quantum NMR: Effects of spins spatial displacements between RF pulses/ I.V. Brekotkin, N.F. Fatkullin, K. Lindt et al // The Journal of Chemical Physics.2022. V. 157(22), P. 224108.

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ АТОМА ³НЕ В АЭРОГЕЛЯХ РАЗЛИЧНОЙ ПЛОТНОСТИ

Расуль Ришатович Хабибуллин, Эдуард Ильдарович Байбеков

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: khrrasul@gmail.com

Ключевые слова: молекулярная динамика, коэффициент диффузии, самодиффузия, гелий-3, аэрогель.

Процессы адсорбции и десорбции атомов газа, находящегося в контакте с наноструктурированной средой, такой, как аэрогель, приводят к возникновению аномальной зависимости коэффициента диффузии газа от давления, что вызвано неподвижностью атомов, находящихся в адсорбированном слое. Однако снижение коэффициента диффузии наблюдается и в режиме слабой адсорбции. При уменьшении давления растёт длина свободного пробега, и существенное влияние на траекторию движения атомов в газе начинают влиять силы межмолекулярного взаимодействия, создаваемые стенками аэрогеля. В одной из последних работ [1] было экспериментально продемонстрировано сильное расхождение низкотемпературной газовой динамики ³Не в нематически упорядоченном аэрогеле Nafen-90 с простыми моделями, такими как модель Кнудсена, а значит, необходима разработка более универсальной модели, которая учитывала бы эффекты адсорбции газа и действие дальнодействующего потенциала.

В рамках данной работы была получена аналитическая формула, описывающая потенциал взаимодействия атома газа с нитью аэрогеля цилиндрической формы. Энергия взаимодействия между отдельными атомами аэрогеля и газа ³Не была представлена в виде потенциала Леннарда-Джонса. Итоговый потенциал нити был получен в рамках континуального приближения, развитого в работе [2]. Далее с помощью численного решения уравнений движения частицы в известном потенциале и статистического усреднения по конфигурациям нитей аэрогеля и начальным скоростям атомов ³Не были рассчитаны коэффициенты диффузии в аэрогелях различной плотности.

- 1. Kuzmin, V. Diffusion Anisotropy of Gaseous Helium-3 in Ordered Aerogels at Low Temperatures / V. Kuzmin et al. // The Journal of Physical Chemistry B. $-2023. V. 127. N_{\odot}. 6. P. 1459-1470.$
- 2. Zhang, X. A potential model for interaction between the Lennard–Jones cylindrical wall and fluid molecules / X. Zhang, W. Wang, G. Jiang // Fluid phase equilibria. − 2004. − V. 218. − №. 2. − P. 239-246.

УДК 539.216.2::[538.945+537.622.6]

ЭФФЕКТ БЛИЗОСТИ В ТОНКОПЛЕНОЧНОМ БИСЛОЕ СВЕРХПРОВОДНИК/ФЕРРИМАГНЕТИК

А.В. Корнев¹, И.В. Бобкова^{2,3}

¹Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань, 420008 Россия

Kazan Federal University, Institute of Physics, Kazan, 420008 Russia

²Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, 141700 Russia

Московский физико-технический институт, Долгопрудный, 141700 Россия

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,

Москва, 101000 Россия

National Research University Higher School of Economics, Moscow, 101000 Russia E-mail: <u>artem.kkor2002@list.ru</u>

Ключевые слова: эффект близости, сверхпроводимость, ферримагнетизм

Исследован эффект близости в однородном ферримагнитном сверхпроводнике, который также является простейшей моделью тонкопленочного бислоя сверхпроводник/ферримагнетик. Получены зависимости критической температуры от величины обменного поля и степени неэквивалентности подрешеток ферримагнетика, проведено сравнение с предельными случаями ферромагнетика [1] и антиферромагнетика [2] и обнаружено два различных режима в зависимости от величины химического потенциала. Рассчитан параметр порядка на двух подрешетках в зависимости от величины намагниченности одной из подрешеток и степени неэквивалентности подрешеток. Для ферримагнетика получен неравный на двух подрешетках («гофрированный») параметр порядка. Такое сверхпроводящее состояние не реализуется в случае эквивалентных подрешеток как с ферромагнитным, так и с антиферромагнитным типом магнитного упорядочения. Исследована разность параметров порядка на подрешетках и её поведение в зависимости от соотношения намагниченности на подрешётках. Также получены зависимости аномальных гриновских функций синглетных и триплетных корреляций от намагниченности для разных ферримагнетиков и проведено сравнение с ферро- и антиферромагнетиком.

- 1. Sarma, G. On the influence of a uniform exchange field acting on the spins of the conduction electrons in a superconductor / G. Sarma // J. Phys. Chem. Solids. -1963. V. 24, I. 8. P. 1029-1032
- 2. Bobkov, G.A. Néel proximity effect at antiferromagnet/superconductor interfaces / G. A. Bobkov, I. V. Bobkova, A. M. Bobkov, and A. Kamra // Phys. Rev. B 106, 144512 (2022).

СТРУКТУРЫ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТРОЙНЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Fe

Бекарыс Ержанов a,b , Анатолий Михайлович Балагуров b,c

^aРоссия, Казань, Казанский федеральный университет

^aRussia, Kazan, Kazan federal university

^bРоссия, Дубна, Объединенный институт ядерных исследований

^bRussia, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research

^cРоссия, Москва, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

^cRussia, Moscow, Lomonosov Moscow State University

E-mail: bekarys @mail.ru

Ключевые слова: сплавы Fe-Ga, Fe-Al, Fe-Ga-Al, редкоземельные элементы, структурные фазовые переходы, дифракция нейтронов, магнитострикция.

Открытие увеличения магнитострикции α-Fe при частичном замещении железа галлием [1] привело к возникновению значительного количества исследований, в которых подобный эффект искался в различных бинарных (Fe-Al, Fe-Ge, Fe-Si и др.) и тройных (Fe-Ga-Al, Fe-Ga-Ge и др.) сплавах на основе железа. В настоящее время проводится множество исследований структуры и свойств сплавов Fe-Ga (повышенная магнитострикция) и сплавов Fe-Al (повышенные механические свойства) [2]. Однако структурные исследования тройных сплавов Fe-Ga-Al, перспективных с точки зрения сочетания механических и магнитных свойств, практически отсутствуют. Еще одной интересной структурной темой является исследование влияния редкоземельных элементов (RE), таких как Тb, Dy, Ce, Y, Er, Pr, Sm, La, на характеристики сплавов Fe-Ga, из-за повышения магнитострикции в них. Физико-технические свойства этих функциональных материалов во многом зависят от их конкретного атомного строения, объемной доли различных структурных фаз и их микроструктурного состояния.

В работе проведены исследования эволюции структурных фаз и микроструктуры литого состояния составов $Fe_{100-(x+y)}Ga_xAl_y$ в диапазоне $17 \le (x+y) \le 39$ ат.% [3] и $Fe_{100-(x+y)}Ga_xRE_y$ с x=27.4% и 26.7%, где RE=Er (y=0.5% и 0.2%)

и Yb (у = 0.5% и 0.24%). Результаты получены в нейтронных дифракционных экспериментах, проведенных в двух режимах: с высоким разрешением по межплоскостному расстоянию и с высокой светосилой в ходе непрерывного сканирования по температуре при нагреве до ~900°С и последующем охлаждении. Информация о микроструктурном состоянии сплавов получена с использованием методов Вильямсона-Холла и Пелашека, позволяющих оценить характерные размеры и распределение по размерам областей когерентного рассеяния путем анализа профилей дифракционных пиков [4, 5].

- 1. Clark, A.E. Magnetostrictive properties of body-centered cubic Fe-Ga and Fe-Ga-Al alloys / A.E. Clark, J.B. Restorff, M. Wun-Fogle, T.A. Lograsso, D.L. Schlagel // IEEE Trans. Magn. 2000. V. 36(5). P. 3238-3240.
- 2. Головин, И.С. Структура и свойства Fe-Ga сплавов перспективных материалов для электроники / И.С. Головин, В.В Палачева, А.К. Мохамед, А.М. Балагуров // Физика металлов и металловедение. 2020. Т. 121. С. 937-980.
- 3. Балагуров, А.М. Структуры и фазовые переходы в Fe-Ga-Al сплавах / А.М. Балагуров, И.А. Бобриков, С.В. Сумников, Б. Ержанов, Д.Г. Чубов, В.В. Палачева, И.С. Головин // Физика твердого тела. 2022. Т. 64. С. 1873-1881.
- 4. Pielaszek, R. $FW_{\frac{1}{5}/\frac{4}{5}}^{\frac{1}{5}}M$ method for determination of the grain size distribution from powder diffraction line profile / R. Pielaszek // J. Alloys Compd. 2004. V. 382. P. 128–132.
- 5. Ержанов, Б. Оценка размера областей когерентного рассеяния по нейтронным дифракционным данным / Б. Ержанов, И.А. Бобриков, А.М. Балагуров // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. Исслед. 2024. Принята в печать.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНКИ ОКСИНИТРИДА ЦИРКОНИЯ ZrO_xN_y КАК ДАТЧИКА ТЕМПЕРАТУРЫ

М.А. Краснов, И.В. Янилкин, А.И. Гумаров, А.М. Рогов, Р.В. Юсупов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: matvey.krasnov.31@mail.ru

Ключевые слова: оксинитрид циркония, тонкая пленка, терморезистор

На сегодняшний день тонкоплёночные термосопротивления на основе оксинитрида циркония способны работать в широком диапазоне температур, обладают высоким разрешением, стабильностью во времени и малым магнитосопротивлением. Пленки оксинитрида циркония обычно синтезируют методом реактивного магнетроннного распыления в смеси газов аргона (активный газ), кислорода и азота (реактивные газы); осаждение проводится в один этап. При этом ключевым параметром, определяющим резистивные свойства пленки, является соотношение долей активного и реактивных газов.

В нашей работе выполнен синтез тонких пленок оксинитрида циркония в два этапа: 1) напыление пленок нитрида циркония на подложки монокристаллического сапфира и 2) их высокотемпературный отжиг в воздушной атмосфере. В этом случае параметром, определяющим свойства материала, являлась температура отжига. Исследовано влияние термического отжига на структурные и электротранспортные свойства синтезированных образцов. Установлено, что причиной увеличения сопротивления в результате отжига является частичное окисление нитрида циркония за счет движения кислорода внутрь пленки по границам зерен и окисления поверхности зерен. В результате атмосферного отжига на поверхности пленки образовался практически чистый оксид циркония, однако внутри пленки остались области нитрида циркония в окружающей их матрице оксида циркония. Оценены величины безразмерной чувствительности синтезированных образцов. Проведены ресурсные испытания пленок при повышенной температуре 473 К в атмосфере воздуха в течение трех недель. В результате ресурсных испытаний установлено, что пленки являются стабильными во времени. Совокупность исследований показала, что пленки оксинитрида циркония, синтезированные двухэтапным методом, могут быть использованы в датчике температуры, работающего в диапазоне от 5 К до 300 К.

ВЛИЯНИЕ МЕТОДА СИНТЕЗА ДИБОРИДА МАГНИЯ (MgB₂) НА СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК

И.В. Янилкин, А.И. Гумаров, Л.Р. Фатихова, И.А. Руднев, Р.Г. Батулин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: yanilkin-igor@yandex.ru

Ключевые слова: диборид магния, сверхпроводимость, тонкая пленка

MgB₂ является «обычным» сверхпроводником с самой высокой критической температурой около 39 К. Несмотря на столь высокую температуру сверхпроводящего перехода, использование диборида магния используется реже, чем NbTi и Nb₃Sn, что связано с особенностями синтеза этого соединения и другими причинами. Температуры плавления магния и бора существенно различаются: 650 °C и 2075 °C соответственно. Такое различие свойств затрудняет получение диборида магния (например, тонкой пленки) желаемого состава и хорошей кристалличности, поскольку даже незначительное нагревание MgB₂ приводит к испарению из него магния и изменению стехиометрии материала пленки. В то же время для получения сверхпроводимости в MgB2 необходимо воздействие высокой температуры. Решение возможно различными способами: отжиг материала Mg_xB_v (или просто бора) в парах магния (а), синтез материала при повышенных температурах и с избыточным потоком магния (б), холодный синтез материала материала желаемой стехиометрии, защищая ее поверхность от испарения магния и отжига в вакууме (в). Наша работа посвящена поиску оптимальной технологии получения пленки MgB₂ методом магнетронного распыления на ленту Hastelloy C276TM. Мы исследовали все три варианта (а), (б) и (в). Наиболее высокая критическая температура была получена в методе (б) и составляла $T_c \approx 23 \text{ K}.$

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ 22-72-10088, https://rscf.ru/project/22-72-10088/. УДК 316.774: 535.36: 539.1.06

ПЕРЕДАЧА ИНФОРМАЦИИ С ПОМОЩЬЮ МЁССБАУЭРОВСКИХ ФОТОНОВ НА СЛУЧАЙНОМ ПОТОКЕ

Ф.Г. Вагизов, А.Л. Зиннатуллин, Р.Н. Шахмуратов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: vagizovf@gmail.com

Ключевые слова: беспроводные способы передачи информации, гаммарезонансное излучение, модуляция излучения, квантовая интерференция

Современные системы связи требуют создания новых средств, обеспечивающих высокую энергоэффективность, экономичность и устойчивость к разнообразным внешним помехам, в том числе целенаправленным. Большинство систем связи основаны на использовании радио, СВЧ, акустического и оптического диапазонов частот. Вместе с тем наблюдается возрастающий интерес к системам передачи информации с использованием рентгеновских и гамма источников излучения благодаря высокой помехоустойчивости и проникающей способности излучения в этом диапазоне частот. Особую значимость приобретает этот диапазон частот в связи с развитием систем коммуникации в космосе при передаче информации через среды (плазма, пыль и др), в которых наблюдается существенное поглощение традиционных носителей информации.

В данной работе сообщается о первой успешной передаче информации с помощью мёссбауэровских гамма-квантов. В отличие от предлагаемых ранее проектов по передаче информации посредством гамма-излучения [1], в которых информационный бит, соответствующий «1» и «0», формировался посредством механического открывания и закрывания затвора, для модуляции гамма излучения мы использовали эффект квантовой интерференции между падающим и рассеянным вперед резонансным излучением. Формирование всплесков гамма излучения осуществлялось быстрым смещением ядер резонансного поглотителя на половину длины волны в моменты поступления информационных сигналов на пьезопреобразователь, на обкладку которого нанесен поглотитель из Fe⁵⁷.

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект № 22-22-00261).

Список литературы

1. Li, F. Wireless communication technology based on gamma ray / F. Li, J. Wu, Q. Jiang et al. // Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, A. - 2022. - Vol. 1039. - P. 166920(1-7).

МАГНИТНАЯ СТРУКТУРА И СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ТРОЙНОМ УПОРЯДОЧЕННОМ СПЛАВЕ Fe₆₅Al₃₀B₅

Аяз Фернатович Абдуллин, Елена Валентиновна Воронина, Евгений Николаевич Дулов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ayazik@bk.ru

Ключевые слова: упорядоченный тройной сплав, магнитная структура, мессбауэровская спектроскопия.

В настоящей работе проведен анализ результатов магнитометрии и мессбауэровской спектроскопии, полученных при температурах 5-300 К и в диапазоне приложенных внешних магнитных полей 0-5 Тл для тройного упорядоченного сплава Fe₆₅Al₃₀B₅ [1]. Значения средних мессбауэровских характеристик (57 Fe сверхтонких магнитных полей и изомерных сдвигов) рассчитаны методом теории функционала плотности (WIEN2k [2]) и использованы в обработке мессбауэровских спектров. На основе сопоставления среднего магнитного момента на атоме Fe и среднего сверхтонкого магнитного поля на ядре ⁵⁷Fe было установлено, что исследуемый образец состоит, как минимум, из трех магнитных фаз. Типичное ферромагнитное поведение проявляют две фазы: разупорядоченная А2 фаза (доля площади спектра $\sim 20\%$) и $D0_3$ упорядоченная фаза ($\sim 50\%$). Соответствующая этим фазам часть мессбауэровского спектра во внеш-нем магнитном поле демонстрирует уменьшение сверхтонкого магнитного рас-щепления на величину приложенного поля. Третья магнитная фаза (~30%) проявляет неферромагнитный характер и, предположительно, согласно имеющимся литературным данным [3], представляет собой несоразмерную статическую волну спиновой плотности или спиральную спиновую волну. Предложенная модель магнитного состояния объясняет особенности температурного поведения среднего 57 Fe сверхтонкого магнитного поля исследованного материала.

- 1. Воронина, Е.В. Особенности синтеза и магнитная микроструктура тройных упорядоченных сплавов Fe-Al-M (M = Ga, B, Sn, V, Mn) / Е.В. Воронина, А.Ф. Абдуллин, А.Г. Иванова, Л.В. Добышева, А.В. Королёв, А.К. Аржников // Журнал экспериментальной и теоретической физики. − 2023. − Т. 163. № 1. C. 106-114.
- 2. Blaha, P. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids / P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G.K.H. Madsen and L.D. Marks // The Journal of chemical physics. $-2020.-V.152.-N_{\odot}$. 7. P. 074101-1
- 3. Noakes, D. R. Incommensurate spin density waves in iron aluminides / D.R. Noakes, A.S. Arrott, M.G. Belk et al // Physical review letters. -2003. V. 91. №. 21. P. 217201.

MACCUB СЦИНТИЛЛЯЦИОННЫХ ДЕТЕКТОРОВ GADAST И ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПРОТОННОЙ РАДИОАКТИВНОСТИ

Булат Радикович Хамидуллина, в

^aPoccuя, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University

^bPoccuя, Дубна, Объединенный институт ядерных исследований Russia, Dubna, Joint Institute for Nuclear Research E-mail: brkhamidullin@stud.kpfu.ru (khamidullinbr@jinr.ru)

Ключевые слова: сцинтилляционные детекторы, радиоактивные пучки, протонная радиоактивность, экзотические изотопы, компьютерное моделирование

Сцинтилляционные детекторы на основе CsI(Tl) является широко используемым инструментом в ядерной физике, особенно в области спектрометрии гамма-излучения. Большие кристаллы CsI(Tl), подобные нашим, используются во многих коллаборациях [1,2].

Массив детекторов GADAST представляет собой набор из 128 сцинтилляторов CsI(Tl) и 32 LaBr₃, и предназначен для детектирования гамма-излучения, образующегося при девозбуждении тяжелых фрагментов вторичного пучка, создаваемых в процессах протонной радиоактивности.

Протонные распады представляют большой интерес, поскольку механизмы их образования и многие изотопы, обнаруживающие данное явление, плохо изучены. Одним из не обнаруженных до сих пор изотопов является ⁷С, в котором ожидается наблюдение истинного четырёхпротонного распада. Эксперимент по его получению и фиксированию продуктов распада с помощью трекинга в кремниевых микростриповых детекторах планируется в ближайшее время на сепараторе FRS в GSI. Последующее изучение угловых корреляций также позволит лучше понять свойства зеркального ему изотопа ⁷Н.

В данной работе исследовались характеристики детекторов на основе CsI(Tl), Проведены измерения энергетического разрешения и неоднородности световыхода. С помощью пакета ExpertRoot [3,4], использующего методы Монте-Карло для симуляции взаимодействия частиц, было проведено моделирова-

ние экспериментальной установки, для исследования влияния различных параметров на конечный спектр. Реализован оригинальный алгоритм моделирования наложений сигналов, которые наблюдались из-за высокой интенсивности источников. Алгоритм наложения импульсов будет использован в дальнейшем, когда GADAST будет располагаться в районе ионного пучка с высокой интенсивностью. Также моделируется неоднородность световыхода, поскольку её учёт может быть необходим при работе с кристаллами большого размера, подобных детекторам системы GADAST.

Также в ExpertRoot начата симуляция предстоящего эксперимента по обнаружению ⁷С. Вычислена кинематика распада для определения углового разлёта продуктов и расположения кремниевых детекторов в эксперименте. Реализована виртуальная геометрия установки для симуляции и добавлен распад ⁷С, с учётом релятивистской кинематики. В настоящее время разрабатывается функционал для обнаружения треков, реконструкции вершин и идентификации продуктов распада в кремниевых детекторах.

- 1. Knyazev, A. Properties of the CsI(Tl) detector elements of the CALIFA detector / A. Knyazev et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. -2019. -V. 940. -p. 393-404
- 2. Li, G. Property investigation of the wedge-shaped CsI(Tl) crystals for a charged-particle telescope / G. Li et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2021. V. 1013. Art. No. 165637
- 3. Technical Report for the Design, Construction and Commissioning of the setup EXPERT: Exotic Particle Emission and Radioactivity by Tracking. URL: https://edms.cern.ch/document/1865700/2/ (дата обращения: 09.02.2024).
- 4. ExpertRoot documentation. URL: http://er.jinr.ru/ (дата обращения: 09.02.2024).

РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ МАГНИТНЫХ И СТРУКТУР-НЫХ СВОЙСТВ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ ВаТіО₃/Fe

Кирилл Васильевич Евсеев

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ekv97@mail.ru

Ключевые слова: DFT, гетероструктура ферромагнетик, сегнетоэлектрик, эффект обратной магнитострикции.

Недавно, для устройств нового поколения была быстро разработана так называемая гибкая электроника [1, 2] с уникальными характеристиками износостойкости и малым весом. Особый интерес вызывает многомодовая перестраиваемая гибкая спинтроника, основанная на гетероструктурах ферромагнетик/сегнетоэлектрический оксид, обладающих более высокой скоростью, меньшими размерами и более эффективной энергией, чем их традиционные аналоги, управляемые током [3, 4]. В работе [5] было показано, что сверхгибкие мультиферроидные гетероструктуры на основе железа (Fe)/ВаТіО₃ (ВТО), демонстрируют идеальную кристалличность и гетероэпитаксиальный рост.

В настоящей работе с помощью расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП/DFT) была исследована пленочная гетероструктура Fe/BaTiO₃. Выбор компонентов гетероструктуры мотивирован тем, что Fe и BaTiO₃ являются двумя «классическими» ферроидными материалами, обладающими хорошо известными свойствами в объеме. Кроме того, bcc Fe и перовскит BaTiO₃ имеют очень хорошее совпадение постоянных решеток (рассогласование составляет всего около 1.4%), что позволяет проводить послойный эпитаксиальный рост мультислоев Fe = BaTiO₃ без существенных дислокаций несоответствия, а также производить моделирование гетероструктуры на компьютере.

В результате проделанной работы были исследованы эффект обратной магнитострикции, влияние смены поляризации сегнетоэлектрика на магнитные свойства железа, структурные, электронные и магнитные свойства гетероструктуры ферромагнетик/сегнетоэлектрик на примере Fe/BaTiO.

- 1. Ota, S. CoFeB/MgO-based magnetic tunnel junction directly formed on a flexible substrate / Ando A., Chiba D. // Nat. Electron -2018, $Noldsymbol{0}1$, P. 124.
- 2. Makarov, D. Shapeable magnetoelectronics / Melzer M., Shmidt O.G. // Appl. Phys. Rev -2016, Note 3. P. 011101.
- 3. Won, S. Flexible vibrational energy harvesting devices using strain-engineered perovskite piezoelectric thin films / Seo H., Kawahara M. // Nano Energy 2019, № 55, P. 182.
- 4. Yao, J. Magnetoelectric couplings in high-density array of nanoscale Co/BiFeO3 multiferroic heterostructures / Song X., Gao X. // ACS Nano -2018, No 12, P. 6767.
- 5. Lu, N. Electric-field control of tri-state phase transformation with a selective dual-ion switch / Zhang P., Zhang Q. // Nature − 2017, № 546, P. 124.

МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛА ТЕТРАФТОРИДА ГАДОЛИНИЯ

Георгий Юрьевич Андреев¹, Ирина Владимировна Романова¹, Олег Александрович Морозов^{1,2}, Стелла Леонидовна Кораблева¹, Руслан Германович Батулин¹,

Василий Николаевич Глазков^{3,4}, Сергей Сергеевич Сосин^{3,4}

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Казань, Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань Russia, Kazan, Zavoisky Physical-Technical Institute FRC Kazan Scientific Center of RAS

³Россия, Москва, Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН Russia, Moscow, P. Kapitza Institute for physical problems RAS

⁴Россия, Москва, Факультет физики НИУ ВШЭ

Russia, Moscow, Faculty of Physics HSE

E-mail: ujif28@mail.ru

Ключевые слова: магнитокалорический эффект, низкие температуры

Впервые наблюдалась анизотропия магнитокалорического эффекта в гейзенберговском магнетике LiGdF₄. Образец монокристалла LiGdF₄ выращен методом Бриджмена—Стокбаргера, из него вырезана пластинка вдоль плоскости *ас*. Измерения, проведённые в температурном диапазоне 2-10 К, показывают значительную разницу охлаждающей эффективности при приложении внешнего магнитного поля вдоль оси *а* и вдоль оси *с*. Анизотропия возникает из-за конкуренции вкладов в парамагнитную восприимчивость от различных взаимодействий [1]. Продемонстрировано, что намагничивание кристалла LiGdF₄ вдоль тетрагональной оси *с* в указанном температурном диапазоне напоминает поведение невзаимодействующих магнитных моментов, что усиливает магнитокалорический эффект до максимально возможного уровня идеального парамагнетика. Полученные результаты могут быть описаны в рамках теории молекулярного поля с учётом анизотропии темпе-

ратуры Кюри—Вейсса. Сравнение с материалами используемыми для адиабатического размагничивания показывает значительное преимущество монокристалла LiGdF₄ в диапазоне гелиевых температур в умеренных магнитных полях (1-3 Тл), что открывает перспективы для практического применения.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда, проект № 22-22-00257, и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ, (рост кристаллов и обработка данных) а также Программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета Приоритет-2030 (магнитометрия).

Список литературы

1. Сосин, С.С. Определение параметров спинового гамильтониана в дипольногейзенберговском магнетике LiGdF₄ методом ЭПР / С.С. Сосин и др. // Письма в ЖЭТФ. - 2022. - Т. 116, вып. 11. - С. 747-755.

УПРАВЛЕНИЕ ПЛОСКИМИ ЗОНАМИ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ Co/Sn С ПОМОЩЬЮ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКА НА ПРИМЕРЕ ВаТіО₃

Эльмира Хамитовна Абдрахимова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: elmira11 03@mail.ru

С развитием нанотехнологий наблюдается все больший интерес к изучению явлений, возникающих в низкоразмерных системах, таких как наночастицы, тонкие пленки, гетероструктуры. Одним из новых явлений, возникающих, в частности, в некоторых типах двумерных материалов, являются так называемые плоские зоны. Системы с плоскими зонами идеально подходят для изучения сильно коррелированных электронных состояний и связанных с ними явлений. Среди таких материалов — металлы с кагоме-структурой, такие как, например, CoSn, являются многообещающими кандидатами для наблюдения плоских зон вблизи уровня Ферми. Недавно, в работе [1] были экспериментально продемонстрированы возможности роста таких структур, а также наблюдения плоских зон с возможностью их перемещения по зонной структуре с помощью допирования.

Цель настоящего исследования — проверить возможности изменения положения плоских зон с помощью другого подхода, именно с помощью воздействия внешним электрическим полем посредством сегнетоэлектрической поляризации. В частности, рассматривается управления плоскими зонами тонких пленок Co/Sn с помощью сегнетоэлектрической поляризации BaTiO₃. В программном пакете для моделирования материалов «MedeA» была построена объемная структура исследуемых соединений, а также тонкие пленки и гетероструктуры на их основе, посчитаны электронные свойства перечисленных структур, произведено сравнение с имеющимися в литературе данными. Было получено хорошее согласование зонная структуры объемного CoSn с ранее опубликованными результатами из статьи [1].

Список литературы

1. Cheng, Sh. Epitaxial Kagome Thin Films as a Platform for Topological Flat Bands / Sh. Cheng, M. Nrisimhamurty, T. Zhou et.al // Nano Letters. -2023.-V.23.-P.7107-7113.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ АЗОБЕНЗОЛА В КАЧЕСТВЕ МАТЕРИАЛОВ С ПЕРЕКЛЮЧАЕМОЙ СМАЧИВАЕМОСТЬЮ МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Регина Мидхатовна Бурганова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: bur.regina@gmail.com

Ключевые слова: азобензол, смачиваемость, теория функционала плотности, моделирование материалов

Контроль смачиваемости поверхности имеет огромный потенциал в различных областях, таких как промышленность, медицина, микробиология, электроника и материаловедение. Используя этот контроль, мы можем раскрыть потенциал для создания инновационных материалов, повышения их функциональности и эффективности [1].

В работе Ичимуры 2001 года [2] была показана возможность контроля смачиваемости поверхности, модифицированной азобензолом в резултате фотоизомеризации молекул под действием света. В данной работе исследуется свойства 16 производных азобензола методом теории функционала плотности для оценки их потенциала в качестве материалов с переключаемой смачиваемостью. Основной анализ направлен на выявление изменений, вызванных фотоизомеризацией, молекулярных дипольных моментов между иис и транс конфигурациями различных производных азобензола. В исходной молекуле азобензола этот процесс превращает неполярную молекулу в более гидрофильную иис форму.

В результате анализа структурных, электронных и молекулярных свойств всех молекул, было выявлено два производных азобензола, обладающих наибольшим потенциалом в качестве материалов с переключаемой смачиваемостью и демонстрирующие трансформации в ходе фотоизомеризации между *цис* и *транс* конфигурациями: одна в сторону увеличения гидрофильности, а другая в противоположном направлении.

- 1. Prakash, C.G.J. Approaches to design a surface with tunable wettability: a review on surface properties / C.G.J. Prakash, R. Prasanth. // Journal of Materials Science. 2021. №56. p108-135.
- 2. Ichimura, K. Light-driven motion of liquids on a photoresponsive surface / K. Ichimura, S.-K. Oh, M. Nakagawa // Science. 2001. №288(5471). p.1624–1626.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРА КУЛОНОВСКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПОМОЩЬЮ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Руслан Фаритович Ахмеров

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ruslan.ahmerov123@gmail.com

Ключевые слова: машинное обучение, теория функционала плотности, оксиды переходных металлов

Одним из способов расчета электронной структуры является метод теории функционала плотности (ТФП), который позволяет рассчитывать электронную структуру вещества на основе функционала электронной плотности, а не волновых функций. Однако этот метод имеет ограничения, связанные со сложностью в описании сильно коррелированных материалов, например оксидов переходных металлов. Для устранения этой проблемы, широко применяемым подходом является ТФП+U, суть которого заключается во включении дополнительной поправки U для учета кулоновского взаимодействия между электронами на сильно локализованных d- или f-орбиталях. В отличие от других методов, таких как гибридные функционалы, ТФП+U достигает компромисса между скоростью и точностью расчетов. Однако выбрать оптимальное значение параметра U для всех соединений невозможно [1]. Поиска оптимального значения параметра U может быть сформулирована как задача оптимизации, аналогичная поиску глобального минимума. Машинное обучение предоставляет эффективный инструмент для определения оптимального значения параметра U. Эта техника, обеспечивает более точные и быстрые расчеты, существенно расширяет возможности исследований в области материаловедения.

Список литературы

1. Романова, К. А. Влияние параметра Хаббарда на моделирование селенидов и сульфидов кадмия и цинка методом теории функционала плотности / К.А. Романова, А.В. Кремлева, Ю.Г. Галяметдинов // Вестник Технологического университета. — 2019. — № 3(22). — С. 30-33.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР СО СПИНОВЫМ РАСЩЕПЛЕНИЕМ РАШБЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Александр Александрович Евсеев

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: alexander-alexandrovich-evseev@mail.ru

Ключевые слова: *Ab initio* расчет, гетероструктуры, сегнетоэлектрики, расщепление Рашбы.

Желательно, чтобы материалы, применяемые в устройствах спинтроники и для обнаружения фермионов Майораны в твердых телах, обладали большим и идеальным спин-орбитальным расщеплением Рашбы. Недавно появилась идея выращивания монослоев сплава на изолирующей полярной поверхности [1]. Эффект Рашбы описывает спин-орбитальное расщепление, возникающее на поверхностях и интерфейсах из-за нарушения инверсионной симметрии [2].

В данной исследовательской работе рассматривались пленочные гетероструктуры с разнообразными комбинациями компонентов, где предполагалось наличие спин-орбитального расщепления типа Рашбы [2, 3]. В этих гетероструктурах из-за градиента плотности электронов на границах раздела возникает токовой вихрь, связанный со спинами электронов. Исследованы структурные и электронные характеристики этих систем. Произведен электронный расчет DFT+U с учетом спин-орбитальной связан

Проведен перебор гетероструктур на основе нескольких сегнетоэлектриков и различных тяжелых металлов. Для каждой из этих гетероструктур рассчитаны зонные структуры с учетом спинорбитального взаимодействия, и на их основе получены значения параметра Рашбы α_R , характеризующего величину спин-орбитального расщепления [4]. Исследовано, как межфазные контактные слои, параметры разбивки, толщина, полярность интерфейса и сегнетоэлектрическая поляризация влияют на значения параметра Рашбы.

Результаты данного исследования могут быть использованы при разработке функциональных материалов для спинтроники, основанных на свойствах этих соединений.

- 1. Chen, M. Prediction of giant and ideal Rashba-type splitting in ordered alloy monolayers grown on a polar surface / M. Chen, F. Liu // Natl. Sci. Rev. -2021. V. 8, N = 4.
- 2. Рашба, Э.И. Симметрия энергетических зон в кристаллах типа вюрцита. II. Симметрия зон с учётом спиновых взаимодействий / Э.И. Рашба, В.И. Шека // Физ. Твёрд. Тела Сборник Статей (Ленинград). 1959.- Т. II. С. 162-176.
- 3. Caviglia, A.D. Tunable Rashba Spin-Orbit Interaction at Oxide Interfaces / A.D. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio and others // Phys. Rev. Lett. − 2010. − V. 104, № 12. − P. 126603.
- 4. Бычков, Ю.А. Свойства двумерного электронного газа со снятым вырождением спектра / Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба // Письма в ЖЭТФ. -1984. -T. 39, № 2. -C. 66–60.

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ДИЗАЙН НОВЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ МЕТАЛЛ-ИОННЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Айгуль Ильхамовна Шамсиева

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: aigul-shamsieva@mail.ru

Ключевые слова: ковалентный триазиновый каркас, теория функционала плотности, молекулярно-динамическое моделирование, литий-ионная батарея.

Ковалентные органические каркасы (Covalent Organic Frameworks) являются классом полимеров с высоким порядком структуры. В отличие от обычных полимеров, структуру СОF можно предварительно спроектировать, а различные комбинации мономеров и связей позволяют синтезировать СОF с ограниченным молекулярным пространством, регулярной кристаллической структурой и точными порами, что создает интерфейс для взаимодействия с электронами, ионами и молекулами.

В современном мире очень важны высокоэффективные аккумуляторы, которые выдерживают большие заряды, имеют длительный срок службы и остаются стабильными. Ковалентные органические каркасы могут сыграть важную роль в создании электродов благодаря своей гибкой структуре, проницаемому каркасу и разнообразным функциональным группам.

В данной работе были исследованы структуры ковалентных триазиновых каркасов в качестве электродов для накопления, хранения и преобразования энергии с целью ее дальнейшего использования. Путем сравнения исходных и допированных структур СОF, были изучены геометрические свойства, напряжение холостого хода, теоретическая удельная ёмкость, и диффузионное поведение ионов лития. Также были оценены электронные свойства путем изучения парциальной плотности состояний и электронной зонной структуры. Результаты этой работы дают информацию о влиянии совместного допирования фтора и кремния на электрохимические свойства ковалентных триазиновых каркасов в качестве анодных материалов для литий-ионных аккумуляторов.

- 1. Lv, X. Metallic FeSe monolayer as an anode material for Li and non-Li ion batteries: a DFT study / X. Lv, F. Li, J. Gong, J. Gu, S. Lin, Z. Chen // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22, P. 8902–8912.
- 2. He, Q. Density Functional Theory for Battery Materials / Q. He, B. Yu, Z. Li, Y. Zhao // Energy & Environmental Materials. 2019. V. 6, P. 264–279.
- 3. Xu, J. Challenges and perspectives of covalent organic frameworks for advanced alkali-metal ion batteries / J. Xu, Y. Xu, C. Lai, T. Xia, B. Zhang, X. Zhou // Science China Chemistry. -2021, V. 64, N0 8. P. 1267–1282.

АВ INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕСНОГО ФЕРРОМАГНЕТИЗМА ПАРАМАГНИТНЫХ ИОНОВ ПАЛЛАДИЯ

Зарина Ильдаровна Миннегулова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ZIMinnegulova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: теория функционала плотности, критическая концентрация.

В работе были проведены расчеты *ab initio* на основе теории функционала плотности с использованием программного пакета MedeA VASP 6, для исследования магнитных свойств сплава палладий-никель в широком диапазоне концентраций (1–100 ат. %). Полученные результаты подтверждают наличие критической концентрации (3 ат. %), начиная с которой аномально большая величина магнитного момента, рассчитанная на атом никеля (около $10~\mu_B$), в системе монотонно убывает с увеличением концентрации примеси и стремится к значению магнитного момента объемного никеля.

- 1. Коренблит, И. Я. Ферромагнетизм неупорядоченных систем / И.Я. Коренблит, Е.Ф. Шендер // УФН. 1978. Т. 126:2. С. 233-268.
- 2. Korableva, A. Impurity Ferromagnetism of Pd-Fe and Pd-Co Alloys: Ab Initio vs. Experiment / A. Korableva, I. Piyanzina, A. Gumarov, I. Yanilkin, R. Khaibullin // Mater. Proc. 2022. V. 9. P. 22.
- 3. Ахмеров, Р. Изучение физических свойств материалов с помощью машиннообученных потенциалов, созданных в программном пакете MedeA / Р. Ахмеров, И. Гумарова, Р. Бурганова, О. Недопекин . Казань 2023.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОКСИАПАТИТА, ДОПИРОВАННОГО РАЗЛИЧНЫМИ ПРИМЕСЯМИ (Si, V, Dy, Gd, Tb), С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Яна Ирековна Шарифуллина

Россия, Казань, Казанский Федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal univercity E-mail: janesharifullina@yandex.ru

Ключевые слова: теория функционала плотности, гидроксиапатит, допирование

Гидроксиапатит (hydroxyapatite, HAp) с общей химической формулой $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ в последние годы вызывает растущий интерес в качестве многофункциональных биоматериалов для широкого спектра применений, включая имплантацию костных тканей [1], лекарственные средства к исследуемым тканям [2], адресная доставка лекарств. Кроме этого, материалы на основе гидроксиапатита могут быть чрезвычайно полезны в области контроля загрязнения и восстановления окружающей среды благодаря своим привлекательным физикохимическим свойствам, особенно высокой адсорбционной способности, превосходной химической и термической стабильности, ионообменной способности, кислотно-основным свойствам, нетоксичности.

В данной работе были проведены *ab initio* исследования структурных свойств гидроксиапатита, допированного различными примесями, такими как Si, V, Dy, Gd, Tb.

- 1. Zhou, H. Nanoscale hydroxyapatite particles for bone tissue engineering / H. Zhou, J. Lee // Acta Biomaterialia. -2011.-V.7-P.2769-2781.
- 2. Uskoković, V. Nanosized hydroxyapatite and other calcium phosphates: chemistry of formation and application as drug and gene delivery agents / V. Uskoković, D.P. Uskoković // J. Biomed. Mater. Res. $A.-2011.-V.\ 96B-P.\ 152-191.$

АВ INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ НАНОКЛАСТЕРОВ ФТОРИДОВ РЕДКИХ ЗЕМЕЛЬ REF_3 ($RE=Tb, Dy, H_0$)

Амина Ильшатовна Фасхутдинова, Ирина Ивановна Гумарова, Олег Владимирович Недопекин, Ирина Владимировна Романова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: vukhuholl@gmail.com

Ключевые слова: магнитные наночастицы, дипольные ферромагнетики, редкозмельные трифториды, компьютерное моделирование, DyF_3 , TbF_3 , HoF_3

В последние годы большое внимание уделяется исследованиям наночастиц фторидов редкоземельных элементов ввиду их возможных применений в медицине [1] и в спинтронике [2]. Фториды редкоземельных элементов известны прежде всего сво-ими магнитными свойствами, однако распределение магнитного момента в наночастицах на основе этого класса соединений до сих пор не исследовалось.

В данной работе были смоделированы нанокластеры дипольных ферромагнетиков DyF₃, TbF₃ и HoF₃ размерами 0,7–1,6 нм, являющиеся моделями реальных наночастиц данных соединений. На основе их элементарных ячеек были построены поверхности, представляющие собой пластины толщиной 2–3, 4 нм, вытянутые вдоль одной из осей. Для перечисленных структур была проведена структурная оптимизация и рассчитаны магнитные моменты. Все расчеты проводились с помощью теории функционала плотности, реализованной в программе VASP программного пакета MedeA. В результате наблюдалось неоднородное распределение магнитных моментов и различное расположение магнитных атомов в зависимости от размера нанокластера и толщины поверхности, а средний магнитный момент незначительно отличался от значения для элементарной ячейки соединения, рассчитанного при таких же параметрах.

- 1. Dong, H. Lanthanide nanoparticles: from design toward bioimaging and therapy / H. Dong, S.-R. Du, X.-Y. Zheng et al. // Chemical Reviews. 2015. V. 115, N. 19. P. 10725–10815.
- 2. Chen, G. Lanthanide-doped ultrasmall yttrium fluoride nanoparticles with enhanced multicolor upconversion photoluminescence / G. Chen, H. Qiu, R. Fan, S. Hao, S. Tan, C. Yang, G. Han // J. Mater. Chem. 2012. V.22. P.20190-20196.

РАСЧЁТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ КВАДРУПОЛЬНОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ В ШПИНЕЛИ Sc₂FeS₄

Максим Дмитриевич Кузнецов, Айрат Газинурович Киямов, Руслан Германович Батулин, Дмитрий Альбертович Таюрский

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: kuznetsov.kpfu@yandex.ru

Ключевые слова: теория функционала плотности, фрустрированный магнетизм, ядерный гамма-резонанс

Соединения с фрустрированным магнетизмом привлекают к себе все больше внимания в связи с их необычными свойствами, а некоторые из них уже нашли применение в современной электронике. В данной работе мы исследовали магнитные свойства шпинели Sc_2FeS_4 , локальное магнитное упорядочение которой описывается моделью спинового льда.

С помощью расчетов в рамках теории функционала плотности были получены значения квадрупольного расщепления для всех ядер атомов железа в данном соединении при различных конфигурациях дефектов вакансии и замещения. Рассчитанные значения позволяют успешно описать распределение параметра квадрупольного расщепления, полученного из модели описывающей экспериментальный мессбауеровский спектр для данного кристалла. Так как использованная для описания экспериментального спектра модель содержит только дублеты с различными квадрупольными расщеплениями и не содержит магнитных секстетов, можно заключить, что в данной системе дальнего магнитного упорядочения нет.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета (ПРИОРИТЕТ 2030).

КОНТРОЛЬ УРОВНЯ КРИОГЕННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ЕМКОСТНЫМ МЕТОДОМ

Д.С. Увин, Р.Р. Габдрахманов, Д.А. Таюрский, Р.Г. Батулин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: attractor.but@yandex.ru

Ключевые слова: емкостной зонд, емкостной измеритель уровня, криогенная жидкость.

Для проведения экспериментов с криоагентами: жидкий гелий, неон, жидкий водород и др. при низких температурах необходимо контролировать уровень жидкого гелия в экспериментальной ячейке. Существует широкий выбор методов, способных обеспечить высокую точность определения уровня [1]. Одним из таких методов является измерение уровня жидкого гелия емкостным методом.

Для определения уровня жидкого гелия по изменению электрической емкости в совокупности с зондом используется измерительный прибор/измерительная электрическая схема, а также уравнение преобразования, которое для плоскопараллельной конфигурации электродов имеет вид [2]: $H = H_m \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon-1}\right) \left(\frac{\eta}{\eta+1}\right)$, где ε - диэлектрическая проницаемость гелия, C' - изменение емкости зонда, H_m - расстояние между электродами, $\eta = C'/C_0$ - относительное изменение емкости зонда. Среднее теоретическое значение чувствительности зонда при значении температуры жидкого гелия 3.7 составляла 35,8 $\varphi\Phi$ /мм.

В работе была реализована экспериментальная схема и устройство для измерения уровня жидкого гелия при температуре 3.7 К. Применяемое устройство не ограничивается измерением уровня, а также может быть использовано для оценки чистоты вакуумной ячейки в процессе проведения процедуры продувки.

- 1. Celik, D. Helium II level measurement techniques / D. Celik et al. // Cryogenics. 2001. V. 41, No. 5-6. P. 355-366.
- 2. Lambert, D.K. Far-infrared and capacitance measurements of electrons on liquid helium / D.K. Lambert, P.L. Richards // Physical Review B. 1981. V. 23, No. 7. P. 3282.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР 169 Tm В ВАН-ФЛЕКОВСКОМ ПАРАМАГНЕТИКЕ $\mathbf{Li(Y_{0.98}Tm_{0.02})F_4}$ МЕТОДОМ **ЯМР**

А.С. **Парфишина**¹, А.В.Егоров², А.Г. Киямов ¹, С.Л. Кораблева ¹, Д.С. Нужина ¹, А.А.Родионов ¹, И.В.Романова ¹, К.Р. Сафиуллин ¹, М.С. Тагиров ²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет ²Россия, Казань, АН РТ, Институт прикладных исследований E-mail: arina.parfishina@gmail.com

Ключевые слова: ЯМР, ван-флековский парамагнетизм, низкие температуры

Метод ЯМР (ядерного магнитного резонанса) является эффективным способом исследования ван-флековского парамагнетизма. Эффективность обусловлена огромной величиной индуцированного на редкоземельном ядре магнитного поля, которое возникает из-за сильного сверхтонкого взаимодействия [1].

В данной работе представлено исследование ядер 169 Tm в разбавленном монокристалле тетрафторида ван-флековского парамагнетика Li($Tm_{0.02}Y_{0.98}$)F₄. Сравнение полученных результатов производилось с данными для монокристалла LiTmF₄ из обзора [1].

ЯМР-исследования ядер 169 Tm монокристалла Li($Tm_{0.02}Y_{0.98}$) F_4 проводились на импульсном ЯМР-спектрометре лабораторного изготовления при гелиевых ($2-4.2~{\rm K}$) температурах в магнитных полях до $0.8~{\rm Tr}$.

Экспериментально обнаружена анизотропия угловой зависимости скоростей продольной и поперечной релаксаций ядер $^{169}\mathrm{Tm}$ в соединении разбавленного ванфлековского парамагнетика $\mathrm{Li}(Tm_{0.02}Y_{0.98})\mathrm{F_4}.$ Проведены теоретические расчёты, подтверждающие экспериментальные результаты.

Также были экспериментально получены температурные зависимости скоростей продольной и поперечной релаксаций намагниченности в монокристалле ванфлековского парамагнетика $Li(Tm_{0.02}Y_{0.98})F_4$. В приближении двухфононного процесса релаксации Орбаха-Аминова был получен интервал между основным синглетным состоянием и ближайшим возбуждённым дублетным состоянием.

Список литературы

1. Aminov. L.K. Nuclear magnetic resonance of rare-earth Van Vleck paramagnets / L.K. Aminov, M.A. Teplov. // Sov. Phys. Usp. - 1985. - Vol. 28. - P. 762-783.

МОДЕЛИРОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ СЛОИСТОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА ТаFe_{1+v}Te₃

Полина Алексеевна Алопина

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: alopinapolina5@gmail.com

Двумерные антиферромагнетики являются классом материалов, вызывающих значительный интерес для использования в следующем поколении функциональной спинтроники благодаря своим нетривиальным магнитным свойствам. Большинство доступных сегодня объемных ферромагнитных материалов, используемых в спинтронике, имеют ограниченную область применения вследствие их чувствительности к воздуху, низкими температурами упорядочения и изоляционными транспортными свойствами. ТаFe_{1+y}Te₃ предлагает уникальные возможности для решения этих проблем благодаря повышенной стабильности на воздухе, свойствам переноса металлов и надежному антиферромагнитному порядку. Все это делает это соединения привлекательным для приложений спинтроники на основе металлических антиферромагнетиков.

В работе [1] было синтезировано соединение $TaFe_{1+y}Te_3$ (y=0.14), определены его структурные, магнитные и электронные свойства, а также выяснены связи между ними. Цель настоящего исследования — предсказать электронные и магнитные свойства тонкой пленки на основе $TaFe_{1+y}Te_3$ (y=0, 0.14), а также выяснить их особенности с помощью компьютерного моделирования на основе теории функционала плотности.

Список литературы

1. Han, S.Y. Interplay between Local Moment and Itinerant Magnetism in the Layered Metallic Antiferromagnet $TaFe_{1.14}Te_3$ / S.Y. Han, E.J. Telford, A.K. Kundu et.al // Nano Lett. – 2023. – V. 23, I. 22. – P. 10449–10457.

ИЗУЧЕНИЕ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ЯДЕР ГЕЛИЯ-3 В КОНТАКТЕ С ЧАСТИЦАМИ DyF₃

А.М. Гараева, Е.М. Алакшин, Е.И. Болтенкова, К.Р. Сафиуллин, И.В. Романова,

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: adeliagaraeva84@yandex.ru

Ключевые слова: наночастицы, ядерная релаксация, гелий-3

Фторид диспрозия DyF₃ — дипольный ферромагнетик с осью легкого намагничивания вдоль оси [010] кристаллической решетки; температура Кюри 2.55 К вдоль оси [010] для монокристалла [1]. Соединение обладает уникальными свойствами, благодаря которым возможно его применение как высокополевого MPT контрастного агента [2] и добавки к Nd-Fe-B магнитам для увеличения коэрцитивной силы [3].

Порошки DyF_3 и LaF_3 со средним размером частиц 20 нм были получены методом гидротермального синтеза при помощи нитратной реакции [4], порошок размером 220 нм х 150 нм — посредством хлоридной реакции [5].

В работе были измерены скорости продольной и поперечной релаксации ядер гелия-3 в контакте с порошком DyF₃ (99.67%) и LaF₃ (0.33%) в адсорбированном слое, в объеме жидкости и в случае покрытия частиц слоем гелия-4 в зависимости от температуры в диапазоне 1,5-3 К в полях 173 и 505 мТл. В случае жидкого гелия-3 в отсутствии покрытия частиц гелием-4 наблюдается двухкомпонентная релаксация продольной и поперечной намагниченности. Предложено возможное объяснение этому явлению.

Работа поддержана Российским научным фондом (номер проекта 23-72-10039).

- 1. Savinkov, A.V. Magnetic properties of Dy^{3+} ions and crystal field characterization in YF₃: Dy^{3+} and DyF_3 single crystals / A.V. Savinkov et al. //Journal of Physics: Condensed Matter. -2008. V. 20. No. 48. P. 485220.
- 2. González-Mancebo, D. HoF₃ and DyF₃ Nanoparticles as Contrast Agents for High-Field Magnetic Resonance Imaging / D. González-Mancebo et al. // Particle & Particle Systems Characterization. 2017. –No. 10(34). P. 1700116.
- 3. Xu, F. Effect of DyF₃ additions on the coercivity and grain boundary structure in sintered Nd–Fe–B magnets / F. Xu et al. // Scripta Materialia. 2011. No. 12(64). P. 1137-1140.
- 4. Alakshin, E.M. Microwave-assisted hydrothermal synthesis and annealing of DyF_3 nanoparticles / E. M. Alakshin et al. // Journal of Nanomaterials. -2016.
- 5. Alakshin, E.M. Size effect of DyF₃ nanoparticles on Curie temperature / E. M. Alakshin et al. //Nanoscale. 2022. V. 14. No. 31. P. 11353-11358.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСНЫХ ЦЕНТРОВ Се³⁺ В ВЫСОКОЛЕГИРОВАННЫХ КРИСТАЛЛАХ LiCaAlF₆

А. А. Шавельев¹, А. С. Низамутдинов¹, А. А. Шакиров¹, С. Л. Кораблева¹, Д. Г. Зверев¹, Е. В. Лукинова², В. В. Семашко³

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university

² Россия, Белгород, Белгородский государственный университет
Russia, Belgorod, Belgorod state university

³ Россия, Казань, Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского

ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань
Russia, Kazan, Zavoisky Physical-Technical Institute
FRC Kazan Scientific Center of RAS
E-mail: alexev.shavelev@gmail.com

В настоящей работе исследованы кристаллы активных сред лазеров УФ диапазона Ce³⁺:LiCaAlF₆, для которых характерно образование нескольких типов центров ионов Ce³⁺ [1, 2]. Были проведены исследования кристаллов Ce³⁺:LiCaAlF₆ с относительно низким (0,1 ат.%) и высоким (1 ат.%) уровнями концентрации примеси методами оптической и ЭПР спектроскопии. Результаты подтвердили наличие различных типов примесных центров ионов Ce³⁺ в этой матрице, которые характеризуются различным положением полос люминесценции по длине волны. Результаты спектроскопии ЭПР кристаллов Ce³⁺:LiCaAlF₆ (1 at.% и 0,1 at.%) показали, что при увеличении концентрации ионов Ce³⁺ в расплаве кристаллизация происходит таким образом, что концентрация примесных центров более низкой симметрии увеличивается в большей степени, чем центра более высокой симметрии. По результатам исследований закономерностей изменения формы спектра люминесценции и времени затухания при различной концентрации Ce³⁺ в расплаве показано, что при увеличении концентрации увеличивается количество центров в более длинноволновой области, что соответствует центру с более низкой симметрией. При этом именно этому типу центров принадлежит лазерная генерация, так как в спектрально-селективном резонаторе исследуемый активный элемент показал настройку длины волны излучения от 281 до 312 нм.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности FZSM-2023-0012.

- 1. Zamir, U. Ultraviolet intracavity laser absorption spectroscopy / U. Zamir et al. // Sensors and Actuators B: Chemical. 2023. V. 393. P. 134173.
- 2. Abdulsabirov, R.Y Crystal growth, EPR and site-selective laser spectroscopy of Gd^{3+} -activated LiCaAlF₆ single crystals / R.Y. Abdulsabirov et al. // Journal of luminescence. -2001.-V. 94. -P. 113-117.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФИЛЬТРАЦИОННЫХ ВОЛН ДАВЛЕНИЯ В МНОГОФАЗНЫХ НАСЫЩЕННЫХ ПОРИСТЫХ СРЕДАХ В ЛАБОРАТОРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

Андрей Олегович Храмов, Марат Николаевич Овчинников, Александр Геннадьевич Гаврилов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: hao73@yandex.ru

Ключевые слова: фильтрационные волны давления (ФВД), многофазная фильтрация

Гидродинамические исследования являются распространенным способом определения фильтрационных параметров пластов (ФПП), знание которых необходимо для эффективной разработки нефтяных месторождений. Одним из таких методов исследования пластов является метод фильтрационных волн давления (ФВД) [1]. Данный метод детально изучен для случая фильтрации одной жидкости. С практической точки зрения, однако, важным является вопрос многофазности, поскольку в реальных пластах происходит фильтрация двух и более флюидов одновременно [2]. Изучению многофазной фильтрации посвящено большое количество опубликованных работ, однако для случая ФВД она является малоизученной. Среди существующих в настоящее время публикаций, в которых рассматривается данный вопрос, отметим [3]. В ней рассматривается математическое моделирование двухфазной фильтрации с использованием модели Баклея-Леверетта в макромасштабном приближении на периодах воздействия порядка суток и приводятся результаты численного моделирования двухфазной фильтрации в условиях ФВД. В [2] приводятся результаты экспериментального исследования двухфазной фильтрации в условиях ФВД на двух образцах пористой среды в виде плотно упакованного песка для четырех значений вязкости вытесняемой жидкости, представлены графики динамики насыщенностей. В ходе данной работы была создана автоматизированная система для проведения лабораторного экспериментального исследования многофазной фильтрации для консолидированных и сыпучих образцов пористой среды с различными характеристиками (пористость, форма пор) при периодах колебаний от одной секунды и получения данных о динамике насыщенностей и давлений.

- 1. Овчинников, М.Н. Интерпретация результатов исследований пластов методом фильтрационных волн давления / М.Н. Овчинников Казань: ЗАО «Новое знание», 2003. 84 с.
- 2. Родыгин, С.И. Экспериментальное исследование двухфазной фильтрации жидкости в условиях фильтрационных волн давления / С.И. Родыгин // Нефть. Газ. Новации. 2010. №1. С. 80-82.
- 3. Овчинников, М.Н. Динамика жидкостей и контроль ресурсов подземной гидросферы. Казанский государственный университет им. В. И. Ульянова-Ленина, 2004. 140 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ПОРИСТОЙ СРЕДЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ СИСТЕМ

Руслан Альбертович Натфуллин, Евгений Александрович Марфин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: nruslan692@gmail.com

Ключевые слова: пористая среда, датчики давления, метод кривых падения давления, автоматизация обработки данных.

В связи с постоянным ростом потребности в энергии и необходимости увеличения эффективности добычи и транспортировки углеводородов, исследования в области гидродинамики пористых сред становятся все более актуальными. Одним из ключевых параметров, определяющих динамику процессов в пористых средах, является их проницаемость. В настоящей работе исследовались искусственно созданные образцы пористых сред. Проводились эксперименты по фильтрации различных флюидов как при наличии различных режимов акустического воздействия, так и без них [1, 2, 3]. Результаты экспериментов показывают, что с течением времени проницаемость пористого образца снижается, изменение направления фильтрации ведет к восстановлению первоначальной проницаемости. Установлены закономерности изменения проницаемости пористой среды при различных режимах акустического воздействия. Предложен механизм изменения проницаемости пористых образцов при фильтрации жидкости.

- 1. Марфин, Е.А. Установка для исследования проницаемости пористой среды в поле упругих колебаний / Е.А. Марфин, А.А. Абдрашитов, Р.Н. Гатауллин // Инженерная и рудная геофизика, 2021: Материалы 17-й научно-практической конференции и выставки, Геленджик, 26-30 апреля 2021 года. Москва: ООО «ЕАГЕ ГЕОМОДЕЛЬ». 2021. С. 89. DOI: 10.3997/2214-4609.202152099.
- 2. Колебания и волны во флюидонасыщенных геологических средах. Явления, процессы, закономерности. Волновая парадигма / О.Л. Кузнецов, В.П. Дыбленко, Д.В. Чилингар [и др.]. Ижевск: Ижевский, 2021.-420 с. ISBN 978-5-4344-0932-2.
- 3. Kluge, C. Permeability evolution during shear zone initiation in low-porosity rocks / C. Kluge, G. Bucher, A. Barnhoorn, J. Schmittbuhl, D. Bruhn // Rock Mechanics and Rock Engineering. 2021. V. 54 (10). P. 5221-5244. DOI: 10.1007/s00603-020-02356-0.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ И ВЯЗКОСТИ ЖИДКОСТЕЙ

Роман Иванович Соловьев, Евгений Александрович Марфин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: roman.solovev.99@inbox.ru

Ключевые слова: Поверхностное натяжение, вязкость, лабораторный эксперимент

Вязкость и поверхностное натяжение жидкостей являются определяющими параметрами внутрипластовых процессов при разработке нефтяных месторождений. От них зависят коэффициент извлечения нефти и энергетические затраты на добычу. Для изменения этих свойств жидкостей используют различные методы воздействия (тепловые, химические, физические). Известен метод акустического воздействия на добычу нефти, который характеризуется высокой эффективностью и экологической безопасностью. Основной целью работы является установление механизма динамического воздействия упругими колебаниями на фундаментальные свойства жидкостей. В настоящей работе представлен обзор лабораторных методов измерения коэффициента поверхностного натяжения и вязкости жидкостей [1]. Основной акцент сделан на возможности измерения вязкости и поверхностного натяжения жидкостей непосредственно в процессе акустического воздействия, а не на измерении свойств после такой обработке, как часто применяется на практике. На основе проведенного обзора в качестве основных методов измерения были выбраны методы падающей капли и капиллярных волн для измерения коэффициента поверхностного натяжения и метод течения жидкости в капилляре (течение Пуазейля) для измерения вязкости. Элементом новизны в работе является использование современных смартфонов для получения и анализа видеоизображений процесса течения и формирования капель жидкости [3].

- 1. Комаров, Б.Н. О методах измерения поверхностного натяжения жидкостей / Б.Н. Комаров // Труды Института механики Уфимского научного центра РАН. 2007. Т. 5. С. 227-234. DOI 10.21662/uim2007.1.027.
- 2. Chen, H. Surface tension measurement with a smartphone using a pendant drop / H. Chen, J.L. Muros-Cobos, J.A. Holgado-Terriza, A. Amirfazli // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2017. V. 533. P. 213-217. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2017.08.019.

ВЛИЯНИЕ АКУСТИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА НЕУСТОЙЧИВОСТЬ САФФМАНА-ТЕЙЛОРА В РАДИАЛЬНОЙ ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ-ШОУ

Евгений Александрович Марфин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: eamarfin@kpfu.ru

Ключевые слова: лабораторный эксперимент, вязкость, вытеснение жидкости, излучатель колебаний.

Одной из причин недостаточно высокой эффективности добычи нефти является неустойчивости Саффмана-Тейлора. Это физическое явление образования и развития складок границы раздела жидкостей с разными вязкостями [1]. Так, вытеснение нефти водой в пористых пластах приводит к неодинаковому росту вязких пальцев и прорыву воды к добывающим скважинам. В качестве рабочей гипотезы в данной работе принято, что акустическое воздействие может влиять на эту неустойчивость и способствовать более полному вытеснению [2]. В настоящей работе использована круглая ячейка Хеле-Шоу [3] с центральным источником. Моторное масло, имитирующее нефть, в ячейке вытеснялось водой при помощи шприцевого насоса с фиксированными скоростями подачи жидкости. Для осуществления акустического воздействия разработан лабораторный излучатель колебаний давления, работающий в широком диапазоне частот и амплитуд. Установлено, что с увеличением скорости подачи жидкости коэффициент вытеснения снижается. Выявлены закономерности изменения скорости роста вязких пальцев от режима акустического воздействия.

- 1. Saffman, P.G. The penetration of a fluid into a porous medium or Hele Shaw cell containing a more viscous liquid / P.G. Saffman, G.I. Taylor // Proc. R. Soc. Lond. 1958. A 245. P. 312–329. DOI: 10.1098/rspa.1958.0085.
- 2. Marfin, E.A. Numerical simulation of the Saffman-Taylor instability in the Hele-Show cell / E.A. Marfin, S.V. Garaeva, D.V. Ermolaev // Journal of Physics: Conference Series. 2019. P. 032028. DOI 10.1088/1742-6596/1158/3/032028.
- 3. Логвинов, О.А. Механизмы стабилизации вытеснения вязкой жидкости из кольцеобразной ячейки Хеле-Шоу с источником / О. А. Логвинов // Вестник кибернетики. 2016. №2(22). С. 147-153.

РАЗВИТИЕ РАДИОФИЗИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И РАСПОЗНАВАНИЯ ДАННЫХ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АКУСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ ДЛЯ ГЕОФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ СКВАЖИН

Альфир Айдарович Вахитов, Юлия Сергеевна Масленникова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: alfir.v10@gmail.com

Ключевые слова: спектральная шумометрия, локация источника звука, обобщенная кросскорреляционная функция, нейронные сети

Спектральная скважинная шумометрия является методом геофизического исследования скважин, используемая для оценки технического состояния, выявления принимающих и отдающих интервалов пласта, определение гидродинамических характеристик пластов. Применение одновременно нескольких синхронно записывающих сенсоров открывает новые возможности для скважинной шумометрии.

Целью настоящего исследования является развитие алгоритма определения пространственного положения источника звука в скважине с применением нейронных сетей. Для достижения поставленной цели была подготовлена база данных для обучения и тестирования. Моделирование было выполнено для различных положений источника звука в скважине, различных размеров источников, при различном отношении сигнал/шум, различных размерах базы. В ходе исследования модельных данных, при варьировании параметров среды и их акустических свойств, были выявлены закономерности и признаки для обучения. Смоделированный данным образом набор корреляционных панелей использовался для обучения сверточных нейронных сетей.

- 1. Ахманов, С.А. Введение в статистическую радиофизику и оптику / С.А. Ахманов, Е. Ю. Дьяков, А.С. Чиркин. М.: Наука, 1985. 638 с.
- 2. Maslennikova, Y.S. Spectral Noise Logging Data Processing Technology / Y.S. Maslennikova, V.V. Bochkarev, Savinkov A.V. // SPE Russian Oil and Gas Exploration and Production Technical Conference and Exhibition 2012 DOI: 10.2118/162081-MS

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ВЧ-ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ПОЛИМЕРНЫМ МАТЕРИАЛАМ

Елена Александровна Макеева, Александр Юрьевич Шемахин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

Ключевые слова: лабораторный эксперимент, виртуальный эксперимент, моделирование физических явлений

ВЧ-плазма пониженного давления служит для модификации материалов различной физической природы с целью придания им качественно новых свойств, способствует увеличению прочности, надежности и долговечности изделий. На данный момент являются слабо изученными физические основы процесса модификации полимерный материалов. Поэтому исследование процесса модификации полимерных материалов ВЧ-плазмой пониженного давления, создание физических основ технологии модификации и математических моделей управления технологией, получение оптимальных режимов работы ВЧ-плазменной установки является актуальной междисциплинарной задачей.

Наиболее перспективным видом электрофизической модификации является воздействие потока плазмы ВЧЕ-разряда пониженного давления на материалы. Процесс модификации полимерных материалов ВЧ-плазмой пониженного давления в настоящее время требует дальнейших исследований и разработки физических основ.

На данный момент разработана модель камеры с образцом, проведены численные эксперименты, получены результаты распределения концентрации электронов в вакуумной камере.

Список литературы

1. Абдуллин, И.Ш. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения. / И.Ш. Абдуллин, В.С. Желтухин, Н.Ф. Кашапов – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000. – 348 с.

РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ВЧ-ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ МАТЕРИАЛАМ

Данил Сергеевич Тарасов, Александр Юрьевич Шемахин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

Ключевые слова: ВЧ-плазма, математическое моделирование, пониженное давление

ВЧ-плазма низкого давления применяется для изменения свойств материалов различной природы с целью придания им новых качеств. Этот процесс способствует повышению прочности, надежности и долговечности изделий. В настоящее время физические основы процесса модификации полимерных материалов ВЧ-плазмой низкого давления остаются малоизученными. Исследование данного процесса, создание физических основ технологии модификации, разработка математических моделей управления технологией, а также получение оптимальных режимов работы ВЧ-плазменной установки представляют собой важные междисциплинарные задачи.

Наиболее перспективным методом электрофизической модификации является воздействие потока плазмы ВЧЕ-разряда низкого давления на материалы. Процесс модификации полимерных материалов ВЧ-плазмой низкого давления требует дальнейших исследований, а также разработки физических основ этого процесса.

Разработана модель камеры с образцом, проведены численные эксперименты, получены результаты распределения потенциала электромагнитного поля в вакуумной камере.

Список литературы

1. Абдуллин, И.Ш. Высокочастотная плазменно-струйная обработка материалов при пониженных давлениях. Теория и практика применения. / И.Ш. Абдуллин, В.С. Желтухин, Н.Ф. Кашапов – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 2000.-348 с.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫБОРА ПАРАМЕТРА КАНАЛОВ СВЯЗИ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММИРУЕМОГО РАДИО

Александра Игоревна Протопопова, Олег Николаевич Шерстюков

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: alexleto1410@gmail.com, Oleg.Sherstyukov@kpfu.ru

Ключевые слова: машинное обучение, программируемое радио, каналы связи.

В данном исследовании проводится анализ использования технологии машинного обучения в контексте определения оптимальных параметров каналов связи с помощью программируемого радио.

Пример практического сценария может включать ситуацию, когда программируемое радио должно передавать данные в условиях, где некоторые радиоканалы подвержены сильным помехам или изменениям. Машинное обучение может помочь системе динамически адаптироваться к таким изменениям, выбирая наилучшие параметры передачи в каждый момент времени.

Кроме того, можно провести эксперименты на реальных программируемых радиоустройствах, собрав данные о производительности различных методов машинного обучения в условиях реального времени. Эти данные могут послужить основой для дальнейшей оптимизации и развития системы выбора параметров каналов связи.

В процессе применения машинного обучения для определения выбора параметров каналов связи с использованием программируемого радио, можно использовать следующие примеры методов — обучение с подкреплением, нейронные сети, кластеризация.

ОБЗОР СПОСОБОВ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РАЗВИТИЯ ПОМЕХОУСТОЙЧИВОЙ ПЕРЕДАЧИ СИГНАЛА

Константин Юрьевич Коваленко, Лейсан Шамилевна Муртазина, Евгений Юрьевич Рябченко

Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: kintonk@yandex.ru, Springdownpour@gmail.com, Reug@mail.ru

Ключевые слова: нейронные сети, помехоустойчивое кодирование, информация, каналы, связь

Сегодня нейронные сети применяются во многих областях науки и искусства. В том числе они могут быть применены в целях помехоустойчивого кодирования радиосигнала и для подавления шума, ведь постоянно происходит увеличение требований к скорости и надёжности передачи информации. В некоторых случаях нейронные сети способны работать быстрее и эффективнее.

Если говорить о физическом уровне, нейронные сети активно применяются в избавлении от шумов, а также, возможно, способны улучшить точность демодулирования модулированного сигнала, в частности, SEFDM сигнала с помощью линейного декодера на основе нейронных сетей. Переходя к кодированию, можно отметить, что нейросети способны улучшить декодирование линейных блочных кодов, в каком-то смысле это возврат к первичному алфавиту, где декодер также вовлечён в исправление ошибок. Дополнительно нейронные сети способны классифицировать неизвестный сигнал по типам модуляции для меняющего сигнала, а также классифицировать сигналы другого происхождения по признакам. Более того, нейронные сети, используя присущее им умение запоминать скрытые закономерности, способны выступать в роли высокоуровневого агента и вместо прямого декодирования выбирать метод кодирования самостоятельно при изменении внешних условий: отношение сигнал/шум, изменение частоты модуляции.

Нейронные сети хорошо себя показывают в разных областях, в том числе радиотехнике. На данный момент ведутся исследования, которые открывают новые применения данной технологии, которая может дать сильное развитие различным областям. Применение нейросетей в целях помехоустойчивой передачи сигнала можно разделить на несколько групп, начиная с физического уровня и заканчивая кодированием сигнала.

- 1. Arab, H.. A Hybrid LSTM-ResNet Deep Neural Network for Noise Reduction and Classification of V-Band Receiver Signals / H. Arab, I. Ghaffari, R.M. Evina, S.O. Tatu, S. Dufour // IEEE Access. 2022. Volume 10. P. 14797–14806.
- 2. Almazrouei, E.. A Deep Learning Approach to Radio Signal Denoising / E. Almazrouei, G. Gianini, N. Almoosa, E. Damiani, // 2019 IEEE Wireless Communications and Networking Conference Workshop (WCNCW), Marrakech, Morocco. 2019. DOI: 10.1109/WCNCW.2019.8902756
- 3. Семенова, А.И.. Особенности применения нейронных сетей для демодуляции SEFDM сигналов / А.И. Семенова, С.В. Завьялов // Научно-Техническая Конференция Санкт-Петербургского Нто Рэс Им. А.С. Попова, Посвященная Дню Радио. 2021. №1 (76). С. 115—118.
- 4. Драко, А.М. Особенности нейросетевого декодирования линейных блочных кодов / А.М. Драко, Д.М. Романенко // Труды БГТУ. Минск : БГТУ, 2015. № 6 (179). С. 166-170.
- 5. Кузнецов А. В. Применение нейросетевых методов для обработки сигналов в каналах с помехами: дис. ... канд. техн. наук / А. В. Кузнецов. Москва, 2020. 20 с.
- 6. Криксина, А.А. Применение нейросетевых технологий для организации выбора оптимального метода помехоустойчивого кодирования в канале связи / А.А. Криксина, А.В. Левенец // Информационные технологии XXI века Хабаровск, 2018.

КРАТКОСРОЧНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПОЛНОГО ЭЛЕКТРОННОГО СОДЕРЖАНИЯ ИОНОСФЕРЫ ПРИ ПОМОЩИ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Артем Михайлович Аппалонов, Олег Николаевич Шерстюков

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: artem309 97@mail.ru

Ключевые слова: ионосфера, полное электронное содержание, карты ПЭС, солнечная активность, факторный анализ, метод главных компонент, машинное обучение

Анализ динамики ионосферы остается актуальной задачей радиофизики и радиотехники на протяжении последних десятилетий. Состояние ионосферы в значительной степени влияет на прохождение радиосигналов широкого диапазона частот и, как следствие, на функционирование многих радиотехнических устройств таких как, например, глобальные спутниковые системы радионавигации [1]. Полное электронное содержание (ПЭС) частиц в единичном атмосферном столбе получается путем сопоставления задержки наклонного пути распространения сигнала на двух частотах (1,545 и 1,226 ГГц).

Эмпирические модели получения полного содержания электронов в ионосфере Земли показывают удовлетворительные результаты прогнозирования в спокойной геомагнитной обстановке. Однако, при магнитных возмущениях наблюдается существенное снижение точности предсказания таких моделей [2]. Это связано со изменением активности Солнца и соответствующими параметрами, которые, данные модели не учитывают.

В связи с этим, целью данной работы является уточнение прогноза в условиях повышенной солнечной активности, используя матричное разложение и различные геомагнитные параметры при помощи методов машинного обучения.

Для обучения и тестирования моделей нами были выбраны глобальные карты ПЭС, полученные лабораторией JPL (NASA Jet Propulsion Laboratory), которая является одной из пяти ведущих аналитических лабораторий, обеспечи-

вающих построение глобальных карт абсолютного вертикального значения ПЭС ионосферы путем интерполяции данных, получаемых на мировой сети приемников IGS. Прогностические модели, построение по таким картам ПЭС, являются наиболее приемлемым с практической точки зрения способом, позволяющим обеспечить потребителей информацией о пространственно-временном распределении ПЭС [3].

В качестве признаков на вход моделей машинного обучения подвались следующие данные: лаги значений вариаций первой временной главной компоненты (2 дня), а также текущий месяц и день, текущий показатель F10.7, Кр и числа солнечных пятен. Прогнозирование производилось на день вперед.

После подбора модели на тренировочных данных, наилучшим образом себя проявила гибридная модель из комбинации различных градиентных бустингов и деревьев решений (ExtraTreesRegressor, Random Forest, XGBoost, CatBoost, LightGBM) – выходы каждого алгоритма усреднялись (взвешенно) и так получался итоговый результат.

Данные были разбиты следующим образом -90 % (55000 записей) для обучения и 10 % (5500 записей) для теста.

В итоге на тестировании получились следующие метрики качества прогноза:

- MAE (mean absolute error, средняя абсолютная ошибка) 1.82
- RMSE (root mean square error, средняя квадратическая ошибка) -6.51
- SMAPE (symmetric mean absolute percentage error, взвешенная абсолютная процентная ошибка) 0.22
 - R2 (коэффициент детерминации) 0.87

- 1. Пашинцев, В.П. Прогнозирование помехоустойчивости спутниковых радиосистем по данным GPS-мониторинга ионосферы / В.П. Пашинцев, Р.Р. Ахмадеев // Электросвязь. 2015. № 11. С. 58-65
- 2. Tsagouri, I. A new short-term forecasting model for the total electron content storm time disturbances / I. Tsagouri, K. Koutroumbas, P. Elias // Journal of Space Weather and Space Climate. 2018 no. 8 p. 2–12. DOI: 10.1051/swsc/2018019.
- 3. Лаборатория JPL. URL: https://www.jpl.nasa.gov (дата обращения: 08.01.2023).
- 4. Maslennikova Yu. S., Bochkarev V. V. Principal Component Analysis of Global Maps of the Total Electronic Content // Geomagnetism and Aeronomy. 2014. Vol. 54(2), pp. 216–223. DOI: 10.1134/s0016793214020133.

ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТИ ГЕОФИЗИЧЕСКОГО КАБЕЛЯ

Рамиль Рафаэльевич Зиядиев, Олег Николаевич Шерстюков, Юлия Сергеевна Масленникова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ziyadiev96@mail.ru

Ключевые слова: скважинная телеметрия, предыскажение цифрового сигнала, QAM модуляция, каротажный кабель

Каротажный кабель вот уже много десятилетий широко применяется при геофизических исследованиях скважин, так как позволяет в режиме реального времени осуществлять контроль над скважинной измерительной аппаратурой и производить оперативный анализ регистрируемых данных. Однако развитие геофизических технологий требует существенного увеличения пропускной способности каротажного кабеля и высокой помехоустойчивости при сохранении возможности использования в скважинных условиях. Целью данной работы является увеличение скорости передачи данных по одножильному геофизическому кабелю, при помощи QAM модуляции[2] (скорость передачи по данному кабелю составляет около 30 кбит/с).

В ходе выполнения работы проведен анализ электрических характеристик геофизического кабеля, по теореме Шеннона-Хартли максимальная скорость, с которой информация может быть передана по 8-километровому, одножильному геофизическому кабелю, с полосой пропускания 3.5кГц, равна 40 кбит/с. Имея заранее известную АЧХ кабеля, можно предысказить сигнал таким образом, что полоса пропускания системы будет увеличена[1]. В нашем случае удалось расширить полосу пропускания до 70 кГц, что в свою очередь позволило сдвинуть теоретическую максимальную скорость до 370 кбит/с.

Алгоритм успешно протестирован на геофизическом кабеле. Показано, что скорость передачи данных увеличена в 11 раза и составила 350 кбит/с.

- 1. Zhao, H. A High-Speed Well Logging Telemetry System Based on Low-Power FPGA // H. Zhao, K. Song, K. Li, C. Wu, Z. Chen // IEEE Access 2021 vol. 9, pp. 8178-8191. DOI 10.1109/ACCESS.2021.3049799
- 2. Сергиенко А.Б. Цифровая обработка сигналов / А.Б. Сергиенко СПб.: Питер, 2002. 608 с.

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ КАК НОВАЯ ПАРАДИГМА ОБРАЗОВАНИЯ

Павел Анатольевич Корчагин¹, Илья Павлович Корчагин²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: Pavel.Korchagin@kpfu.ru

²Россия, Москва, ООО «ГикБреинс»

Russia, Moscow, LLC "Geekbrains"

E-mail: pkor2008@gmail.com

Ключевые слова: искусственный интеллект, образование, обучение, парадигма, информационные технологии.

Технологии искусственного интеллекта (ИИ) находят широкое применение в различных областях, включая сферу образования. Это направление развития общества получает активную поддержку государства, которое признают его потенциал и перспективность для будущего развития образовательной системы.

Использование технологий ИИ в обучении создаёт предпосылки для формирования новой образовательной парадигмы. Особенностями этой парадигмы являются возможности индивидуализации обучения, автоматизации рутинных задач преподавателей, обеспечение быстрого доступа к знаниям.

Можно выделить перспективные направления применения ИИ в образовании: разработка интеллектуальных обучающих систем, основанных на технологиях обработки естественного языка и машинного обучения, создание виртуальных ассистентов и тьюторов для поддержки учебного процесса, генерация и оценка качества учебного контента, мониторинг успеваемости и подбор индивидуальных траекторий обучения, автоматизация проверки знаний и оценивания результатов обучения.

Для успешного внедрения технологий искусственного интеллекта (ИИ) в образование необходимо решить ряд задач, связанных с организационными и методическими аспектами. В первую очередь, требуется совершенствование нормативной базы, чтобы обеспечить правовую и регуляторную поддержку использования ИИ в образовательных процессах.

Кроме того, необходимо разработать этические правила использования данных, связанных с ИИ. Сбор, хранение и обработка данных студентов и преподавателей являются неотъемлемой частью использования ИИ в образовании.

Использование ИИ позволяет адаптировать образование под индивидуальные потребности студентов, предоставляя им инструменты и ресурсы, необходимые для успешного обучения.

РАЗВИТИЕ АЛГОРИТМОВ ЛОКАЦИИ СЕЙСМИЧЕСКИХ СОБЫТИЙ В СКВАЖИНЕ ПО ДАННЫМ DAS С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОПТИМИЗАЦИОННОГО ПОДХОДА

Булат Владимирович Емельянов¹, Олег Николаевич Шерстюков¹, Василий Александрович Рыжов²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

²ООО «Интеллектуальные автоматизированные системы»

LLC «Intelligent Automated Systems»

E-mail: emelyanov.bulat.91@mail.ru

Ключевые слова: локация, распределенное акустическое зондирование, машинное обучение, микросейсмическое событие.

Обнаружение, местоположения и характеристика источников микросейсмических событий является весьма актуальной областью изучения. Точное обнаружение и положение местоположения микросейсмических событий необходимо для отслеживания активных разломов и распространения трещин внутри пласта. Стремительное развитие микросейсмических технологий диктует необходимость создания современных технологий мониторинга микросейсмических событий и обработки полученных микросейсмических данных. DAS (distributed accosting sensing) распределенное акустическое зондирование технология использования оптического волокна в качестве линейного набора сейсмических приборов. Исследования показали, что DAS можно использовать для мониторинга микросейсмической активности во время гидроразрыва пласта [1].

Настоящая работа посвящена развитию методов локации для выявления микросейсмических событий в эксплуатационном фонде скважин в нефтегазовой отрасли. Регистрация осуществлялась в процессе закачки воды в скважину, а также с кратковременной остановкой закачки воды. Решая задачу оптимизации функционала невязки в качестве алгоритма минимизации функции потерь выбран градиентный стохастический спуск, который показал лучшие значения невязок. В результате разработанного алгоритма подобраны параметры модели, которые позволили выявить микросейсмическое событие. Алгоритм успешно протестирован на экспериментальных данных DAS.

Список литературы

1. Wu, Shaojiang WuMicroseismic source locations with deconvolution migration / Shaojiang Wu, Yibo Wang // Geophys.J.Int - 2018. -V. 212. -P 2088-2115.

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОСТОЯНИЯ СЕНСОРНОЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ТРАНСПОРТНОГО СРЕДСТВА

Дмитрий Владимирович Бриский

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: briskiydmitry@mail.ru

Ключевые слова: методы прогнозирования, временные ряды, оценка прогнозирования, радиотехническая система, сенсорная система

Предсказание состояния радиотехнической системы автомобиля можно рассматривать как обработку многомерных временных рядов, коими являются данные датчиков, которые в один момент времени и определяют состояние системы.

Важным этапом является предварительная обработка данных, необходимо производить предварительную оценку данных на основе их статистических показателей, выполнить нормировку, определить стационарность данных и при необходимости выполнить преобразования приведения к стационарному ряду, заполнить пропуски и только затем строить модели предсказания [1, с. 202].

Лучшим содержательным разделением набора данных является разделение, где 75-85% данных используются для обучения модели, а остальные — для тестирования и/или прогнозирования. Рассмотрев способы оценки производительности методов прогнозирования, сделан вывод, что не существует одного лучшего показателя и лучше придерживаться более практичного и прагматичного взгляда [2, с. 15-16] — использовать набор показателей, включающий МАЕ, МАРЕ, МdAPE, MSE, RMSE, RMSLE, R2.

При сравнении методов прогнозирования определено, что классические методы предсказания из группы методов ARMA, а также методы, в основе которых лежит нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью (LSTM) являются предпочтительными ввиду того, что они показывают наилучшие результаты и являются гибкими для различного рода набора данных.

- 1. Peixeiro, M. Time Series Forecasting in Python / M. Peixeiro Manning Publications Co, 2022. 458 p.
- 2. Hyndman, R.J. Another Look at Measures of Forecast Accuracy / R.J. Hyndman, A.B. Koehler // International Journal of Forecasting 2006 V. 22(4). doi: 10.1016/j.ijforecast.2006.03.001

КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ СИСТЕМЫ МОНИТОРИНГА И ДИАГНОСТИКИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЕТЕЙ

Дмитрий Валерьевич Сарычев, Аркадий Васильевич Карпов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: sarychev1607@gmail.com, arkadi.karpov@kpfu.ru

Ключевые слова: компьютерная модель, линии электропередачи, двухступенчатая система диагностики, коэффициент битовых ошибок.

В работе представлена компьютерная модель диагностики и мониторинга линий электропередачи с древовидной топологией, реализующая двухступенчатую систему определения мест возникновения неисправностей на основе анализа отражённых сигналов [1].

Целью данного исследования является разработка и анализ эффективности двухступенчатой системы диагностики состояния линий электропередачи.

Двухступенчатая система диагностики линий электропередачи включает два основных этапа. На первом этапе методом локационного зондирования определяется расстояние от начала линии до места возникновения неисправности. На втором этапе на основе измерения коэффициента битовых ошибок в информационной сети производится локализация конкретного ответвления сети, где произошло повреждение.

Приведены результаты моделирования для конфигураций электрической сети с различным количеством ответвлений от магистрали. Проведен анализ зависимости эффективности локализации мест неисправностей от величины коэффициента битовых ошибок в сети. Выполнен анализ зависимости показателей надёжности диагностики от количества ответвлений и значения коэффициента ошибок. Показано, что с увеличением числа боковых ответвлений точность определения места неисправности по уровню битовых ошибок снижается.

Список литературы

1. Karpov, A. Computer Model of "Smart Grid" for Power Transmission Lines with Tree-Like Topology / Karpov, A. Sarychev, D. Kalabanov, S. // International Russian Smart Industry Conference (SmartIndustryCon) . — Sochi, Russian Federation : IEEE Xplore, 2023. — P. 600-605.

РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ БИТОВОЙ ОШИБКИ В СИСТЕМАХ МЕТЕОРНОЙ ГЕНЕРАЦИИ СЛУЧАЙНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Амир Ильдарович Сулимов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: amir.sulimov@kpfu.ru

Ключевые слова: метеорное распространение радиоволн, ионосфера, случайный процесс, случайная последовательность, квантование сигнала

Стохастическая природа метеорного канала связи позволяет использовать его для генерации в двух заданных пунктах связи A и B идентичных случайных последовательностей [1]. Однако, вследствие неабсолютной взаимности метеорного канала, генерируемые в A и B случайные последовательности содержат битовые ошибки, поэтому неидентичны. Для практического применения важной задачей является оценка вероятности возникновения битовых ошибок.

Методом имитационного моделирования, согласно работе [2], получены зависимости вероятности битовой ошибки от уровня корреляции метеорных радиоотражений, регистрируемых в пунктах A и B. Показано, что полученные путем моделирования вероятности превосходят результаты расчетов по теории узкополосных случайных процессов [3]. Предполагается, что ошибка расчетов объясняется наличием дополнительной (неучтенной) квазидетерминированной компоненты невзаимности канала AB, обусловленной ветровым сносом метеорных следов в течение регистрации радиоотражений.

- 1. Sulimov, A. Secure Key Distribution based on Meteor Burst Communications / A. Sulimov, A. Karpov // Proceedings of the 11th International Conference on Security and Cryptography (SE-CRYPT-2014), Vienna, Austria. 2014. pp. 445-450.
- 2. Sulimov, A.I. Analysis and Simulation of Channel Nonreciprocity in Meteor-Burst Communications / A.I. Sulimov, A.V. Karpov, I.R. Lapshina, R.G. Khuzyashev // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2017. vol. 65. iss. 4. pp. 2009-2019.
- 3. Галиев, А.А. Экспериментальное исследование вероятностных свойств дифференциальной фазы отклика многолучевой среды / А.А. Галиев, А.И. Сулимов, А.В. Карпов // Радиотехника. 2023. т.87. № 12. с. 88-98.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ СИГНАЛОВ В МНОГОЛУЧЕВОМ РАДИОКАНАЛЕ

Айдар Ахатович Галиев, Амир Ильдарович Сулимов, Аркадий Васильевич Карпов, Руслан Рустемович Латыпов, Реваз Фархатович Халиуллин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal university E-mail: ajdaragaliev@kpfu.ru

Ключевые слова: многолучевой канал, случайная двоичная последовательность, пространственная корреляция.

Случайные замирания радиосигнала в многолучевых средах могут быть использованы для формирования идентичных случайных двоичных последовательностей в разнесенных пунктах связи для целей защиты информации. Важным свойством многолучевого радиоканала является пространственная декорреляция, которая означает, что любой пассивный злоумышленник, расположенный на расстоянии более половины длины волны от любого из пунктов, испытывает некоррелированное многолучевое затухание. Такой радиус пространственной корреляции достигается в идеализированных средах с большим количеством равномерно расположенных рассеивателей. В реальных же средах количество рассеивателей ограничено и имеет место мощный сигнал прямой видимости. Поэтому оценка радиуса пространственной корреляции в реальных средах имеет важное значение для безопасности систем разнесенной генерации случайных двоичных последовательностей.

В данной работе представлены результаты экспериментального исследование пространственной корреляции амплитудно-фазовых характеристик радиосигнала в различных средах, таких как помещение и лес. Экспериментальные зависимости получены как для случая продольного, так и поперечного разнесении приемных антенн относительно оси радиолинии. Рассмотрены факторы, влияющие на быстроту пространственной декорреляции характеристик сигнала.

ОЦЕНКА ЭНТРОПИИ ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОЛУЧЕВОГО РАДИОКАНАЛА

Александр Вячеславович Епонешников, Амир Ильдарович Сулимов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ALVEponeshnikov@kpfu.ru

Ключевые слова: теория информации, случайный процесс, случайная последовательность, распространение радиоволн, многолучевый канал

Случайные характеристики федингующего многолучевого канала могут использоваться для генерации в двух пунктах связи A и B идентичных случайных последовательностей [1]. Скорость генерации зависит от энтропии наблюдаемой характеристики X регистрируемого радиосигнала. Многообещающим является использование импульсной характеристики канала, что делает актуальной задачу разработки математической модели для вычисления ее энтропии.

Согласно определению К. Шеннона [2] дифференциальная энтропия случайной векторной величины $\overline{\mathbf{X}} = \{h_{AB}(\tau_1), h_{AB}(\tau_2), ..., h_{AB}(\tau_n)\}$, где n – количество парциальных лучей, а $h_{AB}(\tau_i)$ – амплитуда отклика канала AB, дошедшая до приемника с задержкой τ_i , определяется по формуле:

$$H(X) = -\int_{R^n} w(\overline{\mathbf{X}}) \cdot \log_2 w(\overline{\mathbf{X}}) d^n \overline{\mathbf{X}}.$$
 (1)

Таким образом, задача вычисления энтропии сводится к определению математической модели совместной плотности вероятности $w(\overline{\mathbf{X}})$. Разработана математическая модель многомерной плотности вероятности относительных задержек отклика канала с использованием метода характеристических функций. Результаты проведенных расчетов совпадают с известными вероятностными моделями экспоненциального распределения и гамма-распределения.

- 1. Zeng, K. Physical layer key generation in wireless networks: challenges and opportunities / K. Zeng // IEEE Communications Magazine. 2015. vol. 53(6). pp. 33–39.
- 2. Шеннон, К.Э. Работы по теории информации и кибернетике / Клод Элвуд Шеннон. М.: Изд-во иностранной литературы, 1963. 827 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ МЕТЕОРНЫХ РАДИООТРАЖЕНИЙ

Артур Олегович Савастьянов, Амир Ильдарович Сулимов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: amir.sulimov@kpfu.ru

Ключевые слова: метеорное распространение радиоволн, ионосфера, рассеяние радиоволн, разнесенный радиоприем, корреляция

Метеорная радиосвязь основана на рассеянии радиоволн метрового диапазона на естественных ионизированных неоднородностях, образованных пролетом метеорных частиц в нижних слоях ионосферы (80-120 км). Стохастическая природа метеорного канала связи позволяет использовать его для генерации в пунктах А и В идентичных случайных последовательностей [1]. Для практического применения важной проблемой является оценка радиуса корреляции случайных последовательностей, генерируемых метеорным методом в близкорасположенных пунктах связи, например, в пунктах В и С.

Методом имитационного моделирования, согласно работе [2], получены профили азимутальной и пространственной корреляционной функций для фазы метеорных радиоотражений, регистрируемых в двух разнесенных антеннах В и С на радиолинии Москва-Казань протяженностью 720 км. Выявлена сезонная и суточная изменчивость профилей пространственной корреляции характеристик метеорных радиоотражений. Показано, что характерный радиус корреляции фазы составляет более 1 км. При этом относительный уровень корреляции в различных азимутальных позициях антенны С отличается не более чем на 10%.

- 1. Sulimov, A. Secure Key Distribution based on Meteor Burst Communications / A. Sulimov, A. Karpov // Proceedings of the 11th International Conference on Security and Cryptography (SE-CRYPT-2014), Vienna, Austria. 2014. pp. 445-450.
- 2. Sulimov, A.I. Analysis of Joint Channel Coexistence Time at Space-Diversity Radio Reception of Meteor Reflections / A.I. Sulimov, A.V. Karpov, S.A. Kalabanov, O.N. Sherstyukov //IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2019. Vol. 67. iss. 2. pp. 1161-1169.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОЛУЧЕВОЙ СРЕДЫ ГОРОДСКОЙ ЗАСТРОЙКИ МЕТОДОМ ТРАССИРОВКИ ЛУЧЕЙ

Реваз Фархатович Халиуллин, Амир Ильдарович Сулимов

Poccuя, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail:sven456634@gmail.com, asulimo@gmail.com

Ключевые слова: беспроводная связь, многолучевое распространение, импульсная характеристика канала, трассировка лучей, модель ослабления сигнала.

Высокая точность моделирования радиосистемы достигается методом трассировки лучей [1]. Данный подход позволяет локализовать значимые рассеиватели радиосигнала для заданной геометрии радиолинии [2] и адаптировать параметры радиосистемы для компенсации эффекта фединга.

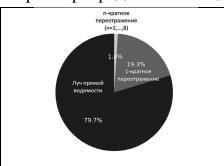


Рис. 1. Вклад n-кратных переотражений в импульсную характеристику

На рисунке 1 показан вклад п-кратных (n=0, ...,8) переотражений в мощность принимаемого сигнала. Расчеты проведены для случая прямой видимости на основе импульсной характеристики, построенной по топографическому плану г. Казани для радиолинии длиной 105 м с высотами передатчика h_{Tx} =30 м и приемника h_{Rx} =2 м.

Из представленных результатов следует (см. рис. 1), что вклад лучей в импульсную характеристику с двумя и более переотражениями незначителен, что позволяет пренебречь ими.

- 1. Zhengqing Y. Ray tracing for radio propagation modeling: Principles and applications / Zhengqing Y., Magdy F. I.// IEEE Access. -2015. V. 3, PP. 1089-1100. doi: https://doi.org/10.1109/ACCESS.2015.2453991.
- 2. Obeidat, H. Channel Impulse Response at 60 GHz and Impact of Electrical Parameters Properties on Ray Tracing Validations / H. Obeidat et al. // Electronics. 2021. V. 10, No. 4 P. 393. doi: https://doi.org/10.3390/electronics10040393.

РАСЧЕТ И ПОСТРОЕНИЕ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ ОРБИТ МЕТЕОРНЫХ ПОТОКОВ ПО ДАННЫМ РАДАРНЫХ НАБЛЮДЕНИЙ В КФУ

Алексей Викторович Изюмченко 1 , Сергей Александрович Калабанов 1 , Рашид Аминович Ишмуратов 2

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: alexey.iz@mail.ru, kazansergei@mail.ru

²Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет
Russia, Kazan, Kazan state power engineering university
E-mail: rash-i@mail.ru

Ключевые слова: метеор, радиант, программный комплекс, элементы орбит.

Метеорные явления представляют непосредственный интерес как в плане прогнозирования метеорной опасности для космической отрасли, так и изучения эволюции комет в Солнечной системе [1]. В рамках данного направления исследований был разработан программный комплекс для расчета и построения орбит метеорных потоков по данным радарных наблюдений в КФУ [2, 3]. Проведенный анализ полученных результатов указывает на определенное группирование элементов орбит метеорных потоков в зависимости от их значений. Так, по соотношениям расстояний перигелия и наклонений орбит выделяются группы: 1) орбиты с наклонением i<55° и перигелий q<0.4 а.е.; 2) орбиты с наклонением 65<i<87 и перигелий 0.75<q<1.15 . Также выделяются группирования по соотношениям расстояний перигелия и афелия. При анализе зависимостей пространственной ориентации плоскости орбиты с углом наклона орбиты метеорного потока наблюдается примерно равномерное распределение.

- 1. Kalabanov, S. Observations of meteor showers with the meteor radar of KFU / S. Kalabanov, D. Korotyshkin, R. Ishmuratov, O. Sherstykov. F. Valiullin // Contrib. Astron. Obs. Skalnate Pleso. 2021. Vol.51. pp.207-220. DOI: 10.31577/CAOSP.2021.51.3.207
- 2. Жаров, В.А. Сферическая астрономия / В.А. Жаров Фрязино, 2006 с. 460.
- 3. Калабанов, С.А. Разработка программного комплекса для расчета и построения индивидуальных орбит метеороидов / С.А. Калабанов, А.В. Изюмченко, Р.А. Ишмуратов // Итог. научно-практич. конф. Казанского федерального университета. Сборник избранных тезисов. Казань, Изд-во КФУ. 2023. С.99.

СПОСОБЫ НАХОЖДЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МАСС И РАЗМЕРОВ МЕТЕОРОИДНЫХ ЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ МЕТЕОРНЫХ РАДИООТРАЖЕНИЙ

Сергей Александрович Калабанов ¹, Алексей Викторович Изюмченко ¹, Рашид Аминович Ишмуратов²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university,
E-mail:, kazansergei@mail.ru, alexey.iz@mail.ru

²Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет
Russia, Kazan, Kazan state power engineering university

E-mail: rash-i@mail.ru

Ключевые слова: метеор, радиант, индекс массы метеороидной частицы.

Распределение метеороидов по массе или размерам дает общее представление о происхождении и эволюции частиц в Солнечной системе. Прямое измерение масс или размеров частиц затруднительно при небольших размерах метеороидов. Так, обнаружение крупных частиц за пределами атмосферы в настоящее время ограничено объектами размером примерно 1м и более. При меньших размерах частиц, необходимы оценки, полученные на основе статистических измерений радиолокационными и оптическими измерениями.

Одним из важных статистических методов нахождения распределения масс служит оценка индекса масс. Предполагается, что кумулятивный индекс масс α описывается степенным законом $dN \propto m^{-\alpha} dm$ [1]. Здесь dN — количество метеоров в диапазоне масс от m до dm. Видно, что чем больше масса частицы, тем она малочисленнее.

Для радарной системы фиксируются радиоотражения с электронной плотностью следа выше определенного порога q_{min} , что соответствует массе частицы выше определенного порога m. Для данной скорости V, пороговая масса частицы соответствует минимальной электронной плотности следа по закону $q_{min} \propto m_V \ V^b$. Для скорости в интервале от V до V+dV число метеоров N_V , превышающих заданную массу m_V выражается законом: $N_V(m>m_V) \propto m_V^{-a} \propto (q_{min})^{-a} \ V^{ab}$. Здесь b -постоянный коэффициент. Имея данные по плотности следа и количеству метеоров можно оценить соотношение размеров и массы частиц по радарным данным.

Список литературы

1. Drolshagen, G. Comparison of Meteoroid Flux Models for Near Earth Space / G. Drolshagen, V. Dikarev, M. Landgraf, H. Krag, W. Kuiper / Earth Moon Planet – 2008 – V. 102. – P.191-197 – DOI 10.1007/s11038-007-9199-6

СТРУКТУРНАЯ СХЕМА ТЕСТОВОГО ПРИЕМОПЕРЕДАТЧИКА НА ОСНОВЕ GSM МОДЕМА ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ УРОВНЯ ПРИЕМНОГО РАДИОСИГНАЛА

Родион Валерьевич Сысолятин¹, Сергей Александрович Калабанов¹, Рашид Аминович Ишмуратов²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university
E-mail: rodionchik27@gmail.com, kazansergei@mail.ru

²Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет
Russia, Kazan, Kazan state power engineering university,
E-mail: rash-i@mail.ru

Ключевые слова: лабораторный эксперимент, модем, беспроводные сети, помехоустойчивость.

Исследование влияния естественных и искусственных шумов и помех на процесс передачи данных в современных беспроводных сетях, таких как GSM, Wi-Fi, Bluetooth, является актуальной задачей, поскольку они могут серьезно влиять на надежность и качество связи. Ошибки передачи данных могут приводить к потере информации или некорректной работе устройств, приложений и сервисов, использующих беспроводные сети [1]. В рамках обозначенной цели предлагается структурная схема тестового приемопередатчика на основе GSM модема для измерения уровня приемного радиосигнала, которая включает в себя несколько основных блоков [2]. Ключевую роль в управлении всей системой, обработке данных и координации работы различных компонентов играет микропроцессор. GSM модем отвечает за связь с беспроводной сетью и обмен данными. Данные для анализа могут проходить как по COM порту, так и по USB в зависимости от конкретной настройки и задачи системы. Разработанный тестовый приемопередатчик позволит измерять и исследовать характеристики приемного радиосигнала, что имеет практическое и теоретическое значение для дальнейшего развития и оптимизации современных беспроводных сетей.

- 1. Сергиенко, А.Б. Цифровая обработка сигналов / А.Б. Сергиенко СПб: Питер, 2002. 608 с.
- 2. Kalabanov, S. GSM-based control and data collection system / S. Kalabanov, R. Shagiev, R. Ishmuratov // Proceeding of 2021 IEEE East-West Design and Test Symposium EWDTS. Batumi, Georgia. 2021. pp. 1-5.

КОНФОРМАЦИОННЫЙ ОБМЕН В ЦИКЛОСПОРИНЕ C, РАСТВОРЕННОМ В АЦЕТОНИТРИЛЕ

Гузель Амировна Миннуллина, Сергей Владимирович Ефимов, Владимир Васильевич Клочков

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: g.minnullina2010@yandex.ru

Ключевые слова: циклоспорин, ЯМР, цис-транс изомеризация, химический обмен, EXSY.

Циклоспорин – циклический пептид, состоящий из 11 аминокислот и имеющий множество актуальных и потенциальных применений: например, циклоспорин А (CsA) широко используется в иммуносупрессивной терапии при трансплантации органов [1]. Существуют аналоги CsA, обладающие такими же свойствами, но с более слабыми побочными эффектами. Эксперименты с циклоспорином С (CsC) показали, что он обладает сильной иммуносупрессивной активностью, но при этом остается менее нефротоксичным, чем CsA [2].

В данной работе с помощью одно- и двумерной спектроскопии ядерного магнитного резонанса были изучены процессы конформационного обмена в циклоспорине С путем анализа сигналов ЯМР атомов Thr2 NH, Val5 NH, Ala7 NH и Mle9 Н α в ацетонитриле. Энергетический барьер, разделяющий две основные конформации, наблюдаемые в полярном растворе, составил 77 ± 2 кДж/моль. Разница в энергии между стабильными конформациями, найденная из одномерных спектров, составила примерно $8 \cdot 10^2$ Дж/моль из анализа сигнала Mle9 Н α и (4.2-5.4) \cdot 10^3 Дж/моль из анализа сигналов NH. Эти данные свидетельствуют о цистранс изомеризации, происходящей в одном или нескольких участках основной цепи пептида.

- 1. Hamawy, M. An Overview of the Actions of Cyclosporine and FK506 / M. Hamawy, S. Knechtle // Transplantation Reviews. 2003. Vol. 17. No. 4. P. 165-171.
- 2. Sadeg, N. In Vitro and In Vivo Comparative Studies on Immunosuppressive Properties of Cyclosporines A, C, D and Metabolites M1, M17 and M21 / N. Sadeg, C. Pham-Huy, P. Rucay et al. // Immunopharmacology and Immunotoxicology. 1993. No. 15. P. 163-177.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР ФИБРИЛЛООБРАЗУЮЩИХ ПЕПТИДНЫХ ФРАГМЕНТОВ БЕЛКА СЕМЕНОГЕЛИН1

Д.А. Осетрина, А.Р. Юльметов, А.Г. Бикмуллин, Т.А. Мухаметзянов, Э.А. Клочкова, К.С. Усачев, В.В. Клочков, Д.С. Блохин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University d.sanchugova@yandex.ru

Четыре пептидных фрагмента белка семеногелин1 (SEM1) (SEM1(45-107), SEM1(49-107), SEM1(68-107), SEM1(86-107)) образуют амилоидные фибриллы в семенной жидкости. Они являются катионными мостиками, уменьшающими электростатическое отталкивание между заряженными поверхностями как ооцитов и сперматозоидов, так и вирионов вируса иммунодефицита человека и клеток-мишеней. Понимание процессов фибриллообразования SEM1 основано на изучении нативных структур четырех пептидных фрагментов.

В данной работе впервые были найдены пространственные структуры всех четырех пептидов в мономерной форме (SEM1(45-107), SEM1(49-107), SEM1(68-107), SEM1(86-107)) и структуры N-доменов трех из них: SEM1(45-67), SEM1(49-67), SEM1(68-85). В качестве методов исследования использовались спектроскопия ядерного магнитного резонанса высокого разрешения, спектроскопия кругового дихроизма и молекулярное моделирование. Показано, что пептидные фрагменты белка SEM1 имеют неупорядоченную вторичную структуру, но содержат спиральные участки (α ,3₁₀-спирали), которые могут участвовать в фибриллообразовании, а отсутствие жесткой структуры пептидов способствует их адаптации к различным условиям формирования фибрилл.

Дополнительно было проведено моделирование димера SEM1(68-107) с помощью молекулярной динамики в программе GROMACS и метадинамики с использованием библиотеки PLUMED для GROMACS. В течение всего времени моделирования структура димера оставалась стабильной, но наблюдались конформационные изменения: оба пептида в димере имеют стабильные спиральные участки (72D-77D, 90L-93T), имеется изгиб основной цепи - β -петля (81K-85Y). Описанные конформационные изменения в структуре димера SEM1(68-107) характерны для формирования зародышевого ядра в период лагфазы олигомеризации амилоидного пептида.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (Д.С. Блохин, проект № 20-73-10034).

АНАЛИЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ЗАМЕЩЕНИЯ КОСТНОЙ ТКАНИ

А.А. Петрова, Ф.Ф. Мурзаханов, Г.В. Мамин, О.И. Гнездилов, М.Р. Гафуров

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University

Синтетический гидроксиапатит кальция (ГА) с химической формулой $Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$ широко используется в медицинских целях из-за его хорошей биосовместимости и максимального химического сходства с натуральной костью. Однако применение чистого ГА в современной имплантологии ограничено из-за его низких прочностных характеристик и нерастворимости. Синтез биорезорбируемых композиционных материалов (органоминеральных композитов), является одной из сложных проблем в регенеративной медицине и наук о материалах. В данной работе мы применили подходы электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и ядерного магнитного резонанса (ЯМР) для изучения свойств органоминеральных композитных пленок [1], синтезированных in situ в растворе биорезорбируемого полимера поливинилпирролидон (ПВП) в ИМЕТ РАН им. А.А. Байкова (г. Москва).

Применение ЭПР в двух частотных диапазонах позволило с высокой точностью определить спектроскопические параметры фотоиндуцированных радиационноиндуцированных парамагнитных центров (ПЦ) на основе азота в ГА, ПВП и композите ПВП-ГА. Показано, что ПВП существенно не влияет на ЭПР-параметры радиационных ПЦ и их времена релаксации в ГА. Фотоиндуцированные ПЦ были обнаружены только в ПВП. В спектрах ¹Н ЯМР в композитах с вращением под магическим углом наблюдаются два сигнала (4,7 м.д. и 2,15 м.д.), приписанных "свободной" воде и гидроксильным группам, соответственно; для ³¹Р наблюдалась одиночная линия. ЯМР-релаксационные измерения для ¹Н и ³¹Р показали, что релаксационные затухания представляют собой многокомпонентные процессы, которые могут быть описаны тремя вкладами (временами) поперечной релаксации. Полученные результаты показывают, что методы магнитного резонанса могут быть использованы для контроля качества синтеза композитов ПВП-ГА и, потенциально, для отслеживания процессов их резорбции [1].

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ грант № 23-63-10056.

Список литературы

1. Petrova, A. Magnetic Resonance Based Analytical Tools to Study Polyvinylpyrrolidone—Hydroxyapatite Composites / A. Petrova, G. Mamin, O. Gnezdilov, I. Fadeeva, O. Antonova, A. Forysenkova, V. Antoniac, J. Rau, and M. Gafurov // Polymers - 2023. — Vol.15, Is.22. — 4445. — DOI: 10.3390/polym15224445

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОСФАТОВ КАЛЬЦИЯ С ПРИМЕСНЫМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ ЭЛЕМЕНТАМИ МЕТОДАМИ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

М. А. Садовникова ¹, Г. В. Мамин ¹, Ф. Ф. Мурзаханов ¹, Н. В. Петракова ², М. Р. Гафуров ¹.

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Москва, Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Russia, Moscow, A.A. Baikov Institute of Metallurgy and Material Science,
Russian Academy of Sciences

E-mail: margaritaasadov@gmail.com

Ключевые слова: фосфаты кальция, электронный парамагнитный резонанс, редкоземельные ионы, гадолиний.

Биоматериалы на основе фосфатов кальция (Φ K), благодаря химическому и механическому сходству с костным минералом, используются для замены и восстановления поврежденных частей опорно-двигательного аппарата, для систем доставки лекарств и генов, в качестве покрытие для титановых костных имплантатов и в качестве наполнителя биокомпозитов. Замена ионов Ca^{2+} в структуре Φ K другими ионами значительно влияет на размер, кристалличность, растворимость, термическую стабильность, поверхностные характеристики и адсорбционную активность частиц Φ K.

Ионы гадолиния (Gd^{3+}) в структуре ФК могут выступать в качестве контрастных веществ для магнитно-резонансной томографии, а замещение ионов кальция в решетке ФК на ионы церия (Ce^{3+} и/или Ce^{4+}) представляет интерес, поскольку соединения, содержащие ионы Ce нашли применение в медицине в качестве антибактериальных средств.

В нашем исследовании мы демонстрируем возможности различных методов непрерывного и импульсного электронного парамагнитного резонанса для комплексного исследования ФК допированного редкоземельными элементами (Gd, Ce). Полученные результаты могут быть использованы для качественного и количественного контроля включения редкоземельных элементов в структуру ФК, а также могут служить основой для квантовохимического моделирования кристаллической решетки и физико-химических свойств при создании материалов с желаемыми свойствами и функциональностью.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ грант № 23-63-10056.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ АСПЕКТЫ РЕГУЛЯЦИИ ТРАНСЛЯЦИИ БАКТЕРИИ STAPHYLOCOCCUS AUREUS БЕЛКАМИ СЕМЕЙСТВА АВС-F

К. С. Усачев¹, А. Д. Биктимиров¹, Е. С.Кучаев^{1, 2}, Э.А. Клочкова², А. Э. Гималетдинова¹, Д. Р. Исламов¹, Ш. З. Валидов², М. М. Юсупов ^{1, 2}

¹Россия, Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

² Россия, Казань, Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань

Russia, Kazan, Zavoisky Physical-Technical Institute FRC Kazan Scientific Center of RAS E-mail: k.usachev@kpfu.ru

Ключевые слова: трансляция, биосинтез белка, Staphylococcus aureus, созревание рибосомы, факторы сборки, МУРР, РСА.

Появление новых штаммов микроорганизмов с множественной устойчивостью к существующим антибиотикам – одна из актуальнейших проблем для современного здравоохранения. Одним из возможных способов борьбы с инфекциями является разработка и создание новых высокоселективных ингибиторов, направленных на специфические белки и аппарат синтеза белка патогенных микроорганизмов. Система белков гибернации рибосомы обеспечивает выживание клеток в условиях голодания, а также препятствует связыванию с антибиотиками. Это дает клеткам патогена шанс пережить курс антибиотикотерапии. В настоящее время на разных видах эубактерий получены данные о роли систем гибернации рибосом. Объединение этих данных при исследовании арсенала гибернационных белков одного вида такого как патогенная бактерия Staphylococcus aureus поможет создать более полное представление о взаимодействии рибосомальных факторов стационарной фазы, с другой стороны, может выявить новые мишени, которые позволят снизить жизнеспособность этого патогена. В геноме S. aureus было обнаружено 15 незаменимых белков, которые принадлежат к суперсемейству низкомолекулярных ГТФаз. Особый интерес представляют белки Etta, Era и YsxC, которые необходимы для роста клеток.

Методами малоуглового рентгеновского рассеяния и рентгеноструктурного анализа нами была установлена пространственная структура и определены отличия в строении белков Era и YsxC из *S. aureus*, что открывает более детальное понимание молекулярных механизмов, лежащих в основе работы ГТФаз в *S. aureus* и других микроорганизмах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 21-74-20034).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И DFT ИССЛЕДОВАНИЯ **β**-ЕНАМИНОНА

Амина Фирдусовна Шайдуллина, Людмила Ивановна Савостина, Алсу Ринатовна Шарипова, Александр Николаевич Туранов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university

Россия, Казань, Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань

Russia, Kazan, Zavoisky Physical-Technical Institute FRC Kazan Scientific Center of RAS E-mail: shaidullina.amina@yandex.ru

Ключевые слова: DFT, β-енаминон.

В работе проводилось исследование структуры 1-phenyl-3-(quinolin-8-ylamino)prop-2-en-1-one экспериментальными методами ЯМР и УФ спектроскопии и методом функционала плотности. β -енаминоны являются универсальными реагентами и удобными строительными блоками для синтеза N-гетероциклов. Благодаря наличию двойной связи, β -енаминоны имеют *cis*- и *trans*- изомеры, а также несколько таутомеров.

Были проведены расчеты по поиску оптимальной геометрии всех изомеров и таутомеров β-енаминона в программном пакете ORCA с помощью функционала CAM-B3LYP и базисного набора def2-TZVP. Результаты показали, что энергетически более устойчивой формой является *cis*-изомер. Проводились расчеты спектров поглощения для исследуемых структур без учета растворителя и изучение взаимодействия *cis*- изомера с различными растворителями. На рис.1 представлены оптимальные геометрии *cis*- и *trans*- изомеров.

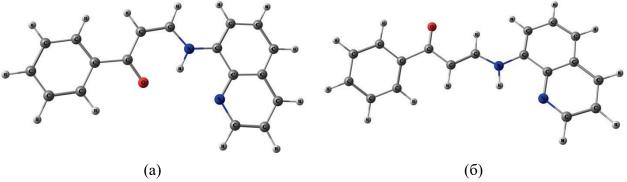


Рис. 1 Оптимизированные геометрии *cis-* (а) и *trans-*(б) изомеров, рассчитанные методом DFT без учета растворителя

Результаты исследования методом функционала плотности согласуются с экспериментальными данными.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ УФ ДИАПАЗОНА НА КЛЕТКИ КЕРАТИНОЦИТОВ И ФИБРОБЛАСТОВ

Я. Хамдан, Д. А. Макарова, Н. Шамсутдинов, П. В. Зеленихин, А. С. Низамутдинов, А. А. Буглак, Т. А. Телегина

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: yara.hamda.z@gmail.com

Ключевые слова: ультрафиолет, витилиго, фибробласты, лазер, цитокины, маркеры

Витилиго — заболевание депигментации, характеризующееся потерей эпидермальных меланоцитов [1]. причем одним из наиболее эффективных методов лечения является экспозиция узкополосным ультрафиолетом В [2]. В данной работе исследуется влияние УФ-лазерного излучения различной длины волны, длительности импульса и времени облучения на клетки кожи человека HSF. Нами было использовано лазерное излучение активной среды ${\rm Li}({\rm Lu},{\rm Y}){\rm F}:{\rm Ce+Yb}$ [3]. Результаты, полученые при МТТ-тесте сразу после облучения, показывают снижение жизнеспособности клеток HSF в зависимости от длины волны, длительности импульса и времени облучения, которые существенно отличаются от образца без обработки. В результате исследования проточной цитометрии непосредственно после облучения мы установили, что $80.8 \pm 6.9\%$ клеток имеют поврежденную мембрану и только $6.2 \pm 2.2\%$ достигают стадии позднего апоптоза. Подтверждение этой гипотезы мы наблюдали через 24 часа после облучения с помощью МТТ-теста для клеток, облученных лазером с длиной волны 325 нм в течение 15 минут; выживаемость клеток составила $106 \pm 4\%$.

В настоящее время мы изучаем литературу о цитокинах и маркерах витилиго, чтобы решить, над какими из них мы можем работать для достижения цели работы.

- 1. Esmat, S. Phototherapy and Combination Therapies for Vitiligo / S. Esmat S. et al // Dermatol Clin. 2017. –No. 35. P. 171-192.
- 2. De Souza, R.O. Photochemoprotective effect of a fraction of a partially purified extract of Byrsonima crassi-folia leaves against UVB-induced oxidative stress in fibroblasts and hairless mice / R.O. De Souza et al // Journal of Photo-chemistry and Photobiology B: Biology. –2018. No. 178. P. 53-60.
- 3. Farukshin, I.I. Ultra-short UV lasing in multifunctional Ce:LiY $_{0.3}$ Lu $_{0.7}$ F $_4$ active medium / I.I. Farukshin I.I. et al // Optical Materials Express. -2016. -V.6., No. 4. -P. 1131-1137.

СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЕРСПЕКТИВНЫХ АГЕНТОВ КОМБИНИРОВАННОЙ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ Сео.5 Y 0.35 Tbo.15 F 3, КОНЪЮГИРОВАННЫХ С ПРЕПАРАТОМ РАДАХЛОРИН ПОСРЕДСТВОМ ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА

А.И. Хусаинова, А. С. Низамутдинов, Н. И. Шамсутдинов, С. Калиниченко, Д. И. Сафин, М. Гафуров, Е. В. Лукинова, С. В. Зинченко, П. В. Зеленихин, М. Пудовкин.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: khusainova.alina2000@mail.ru

Для лечения онкологических заболеваний существует перспективный метод фотодинамической терапии, при которой происходит активация светом молекул фотосенсибилизатора, способных накапливаться в опухоли и повреждать ее за счет активных форм кислорода [1,2]. Для увеличения глубины проникновения существует метод комбинированной ФДТ. Молекулу фотосенсибилизатора связывают с наночастицей-сцинтиллятором. Спектр поглощения фотосенсибилизатора должен перекрываться со спектром излучения наночастицы. Далее происходит преобразование энергии в генерацию АФК. Целью настоящей работы являлось исследование спектрально-кинетических характеристик и биологической активности перспективных нанокомпозитов на основе наночастиц $Ce_{0.5}Y_{0.35}Tb_{0.15}F_3$, конъюгированных с препаратом Радахлорин посредством поливинилпиролидона.

Наночастицы фторидов редкоземельных элементов были получены с помощью метода соосаждения. Все образцы имели ожидаемую гексагональную структуру CeF_3 со средним диаметром наночастиц около 14 ± 1 нм. Затем осуществлялось покрытие $Ce_{0.5}Y_{0.35}Tb_{0.15}F_3$ поливинилпирролидоном. Для оценки токсичности был проведен МТТ-тест с использованием клеток A549. Было выявлено, что при последовательном увеличении количества молекул радахлорина в коллоиде выживаемость клеток A549 снижается. Была обнаружена рентгениндуцированная цитотоксичность. В частности, для коллоида при концентра-

ции радахлорина 0.12 после рентгеновского облучения выживаемость составила 12%.

Исследованные спектрально-кинетические характеристики люминесценции наночастиц $Ce_{0.5}Y_{0.35}Tb_{0.15}F_3$ (λ = 541 нм), конъюгированных с радахлорином с использованием покрытия из поливинилпирролидона показали эффективную безызлучательную передачу энергии от Tb^{3+} к радахлорину. Максимальный коэффициент передачи энергии составил около 82%. Предположительно, молекула красителя с наночастицей гораздо лучше связывается в присутствии поливинилпирролидона. Среднее расстояние между поверхностью наночастиц и радахлорином составляло R_0 = 4,5 нм. Увеличение концентрации радахлорина приводило к сокращению расстояния между наночастицами и радахлорином. После добавления воды это расстояние не меняется (только для образцов с ПВП-покрытием). Это означает, что конъюгаты стабильны в наших экспериментальных условиях.

- 1. Korbelik, M. Distribution of Photofrin between tumour cells and tumour associated macrophages / M. Korbelik, G. Krosl, P.L. Olive, D.J. Chaplin // Br. J. Cancer. 1991. Vol. 64, No. 3. P. 508–512.
- 2. Дмитриева, М.В. Анализ липосомальной лекарственной формы нового фотосенсибилизатора хлоринового ряда / М.В. Дмитриева, Е.В. Санарова, А.П. Полозкова и др. // Российский биотерапевтический журнал. 2013. Т. 12., № 2. С. 28.

РАЗВИТИЕ ПОЗНАВАТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ К ИЗУЧЕНИЮ ФИЗИКИ У СЛАБОУСПЕВАЮЩИХ УЧАЩИХСЯ СТАРШИХ КЛАССОВ

Альбина Феннуровна Зарипова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: sabina.gainulova@yandex.ru

Ключевые слова: слабоуспевающий ученик, познавательный интерес, внеурочная деятельность, индивидуализация учебной деятельности, учебнопознавательная деятельность.

В современном школьном образовании особый акцент сделан на обеспечении свободного и гармоничного развития личности каждого ребёнка, на предоставлении ему возможности реализации своих индивидуальных способностей, на получении полноценного качественного образования. На сегодня отмечаются проблемы в реализации поставленных задач: резкое снижение общего и психического здоровья школьников; усиление отрицательной мотивации учащихся в учебной деятельности; наличие в общеобразовательных учреждениях обучающихся, испытывающих затруднения в освоении образовательных программ; увеличение количества детей, имеющих отклонения в поведении и относящихся к группе риска школьной дезадаптации.

Решение данных проблем невозможно без выявления причин, без широкой образовательной практики, направленной на предупреждение и преодоление школьной неуспеваемости обучающихся. В настоящее время специалисты отмечают рост числа детей с проблемами общего поведения и качества обучения в целом. Они отмечают, что негативные изменения экологической и социально-экономической ситуации в стране ухудшают соматическое и нервно-психическое здоровье школьников, а в условиях интенсификации обучения и перегруженности школьных программ значительно возрастает число неуспевающих. Однако никак нельзя сбрасывать со счета и социально-психологический фактор неуспеваемости. Ведь ребенок обучается в

коллективе, в котором постоянно происходит подкрепляемое оценками учителя сравнение детей между собой. Неуспевающий ученик выставляется как бы на «обозрение» сверстников и практически ежедневно переживает ситуацию неуспеха. Все это, естественно не способствует его личностному становлению и развитию. Становится очевидным, что часть вины за такое большое количество двоечников ложится на плечи педагогов [1].

Перед учителем становится вопрос: как заинтересовать учащегося или как развить интерес к получению и усовершенствованию знаний. И практически каждый день перед учителем возникает проблема поиска педагогических средств активизации познавательной деятельности учащихся.

Список литературы

1. Вайндорф-Сысоева, М.Е. Педагогика: учебное пособие для среднего профессионального образования и прикладного бакалавриата / М.Е. Вайндорф-Сысоева, Л.П. Крившенко. — М.: Издательство Юрайт, 2014. — 197 с.

КОЛЛАБОРАЦИЯ ФИЗИКИ И ИЗОБРАЗИТЕЛЬНОГО ИСКУССТВА ВО ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ МЛАДШИХ ШКОЛЬНИКОВ

Валерия Игоревна Юрова Гузель Ильдаровна Гарнаева

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: yurovavaleria@mail.ru

Ключевые слова: коллаборация, физика, изобразительное искусство, пропедевтика, начальная школа, познавательная деятельность, познавательный интерес.

Физика является одной из основополагающих наук об окружающем нас мире. Но, к сожалению, между изучением физики в качестве составляющей курса окружающего мира в начальной школе и началом обучения по общему курсу физики в седьмом классе имеет место довольно долгий перерыв. И это мешает формированию у школьников единой естественнонаучной картины мира и приводит к снижению познавательного интереса обучающихся к предметам естественно-научного цикла.

У педагогов есть отличная возможность в рамках пропедевтических курсов осуществить процесс формирования и развития познавательного интереса к изучению физики у обучающихся. Подобные курсы помогают детям не только расширить свой кругозор, но и сформировать у них увлечения и интересы, которые могут стать основой для дальнейшего развития в конкретной области.

В статье Красновой А. А. отмечается, что включение в образовательный процесс различных пропедевтических курсов является неотъемлемой частью современной концепции развития школьного образования [3]. Творческий и занимательный характер организации учебной деятельности в рамках пропедевтических курсов, на наш взгляд, является эффективным фактором формирования познавательного интереса у обучающихся.

Концепция разработанного нами пропедевтического курса заключается в коллаборации физики и изобразительного искусства. Идея создания подобного курса возникла поскольку, на самом деле, физические законы играют важную

роль в создании и восприятии произведений искусства. А искусство, в свою очередь, помогает разнообразить процесс обучения физике. Наши занятия охватывают несколько разделов курса физики и направлены на знакомство школьников с молекулярными, механическими, электрическими и оптическими явлениями. Для курса нами была собрана целая подборка занимательных красочных физических опытов и экспериментов, интересных творческих заданий и необычных техник рисования [1,2]. В основе представленных техник лежат проявления различных физических явлений (смешение красок – диффузия, монотипия – взаимодействие молекул, рисование брызгами – инерция, пуантилизм – оптическое смешение цветов, граттаж – трение и т.д.). Волшебство проводимых опытов объясняется детям в доступной им форме.

В рамках апробации разработанного курса нами было проведено большое количество занятий и мастер-классов для школьников на различных площадках (в Институте физики КФУ, в общеобразовательных школах, в рамках научнопопулярного проекта «РКОНаука в КФУ»). После проведения каждого занятия мы получаем огромный положительный отклик от школьников и их родителей.

- 1. Давыдова, Г.Н. Нетрадиционные техники рисования в детском саду. Часть 1 / Г.Н. Давыдова // М.: Издательство Скрипторий, 2003.-2007.-80 с.
- 2. Давыдова, Г.Н. Нетрадиционные техники рисования в детском саду. Часть 2 / Г.Н. Давыдова // М.: Издательство Скрипторий, 2003.-2007.-72 с.
- 3. Краснова, А.А. Роль элективных курсов по физике в реализации требований ФГОС / А. А. Краснова // НАУКА и ТЕХНОЛОГИИ: ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ и ПРИМЕНЕ-НИЯ: сборник статей Международной научно-практической конференции, Петрозаводск, 19 января 2023 года. Петрозаводск: Международный центр научного партнерства «Новая Наука» (ИП Ивановская И.И.), 2023. С. 126-131.

РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ К КОМПЛЕКСУ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ ПО ДИФРАКЦИИ ФРЕНЕЛЯ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССОВ ПРОФИЛЬНОГО УРОВНЯ ИЗУЧЕНИЯ ФИЗИКИ

Леонид Анатольевич Нефедьев Гузель Ильдаровна Гарнаева Эльмира Ильгамовна Низамова Эльвера Дамировна Шигапова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: guzka-1@yandex.ru

Ключевые слова: волновая оптика, виртуальная лабораторная работа, компьютерное моделирование, профильное обучение физике.

В федеральной рабочей программе среднего образования «Физика (углубленный уровень)» в разделе «Планируемые результаты освоения программы по физике на уровне среднего общего образования» в качестве предметных результатов обучения для учащихся 11 класса указаны следующие умения:

- проводить опыты по проверке предложенной гипотезы: планировать эксперимент, анализировать полученные результаты и делать вывод о статусе предложенной гипотезы;
- приводить примеры вклада российских и зарубежных ученыхфизиков в развитие науки, в объяснение процессов окружающего мира, в развитие техники и технологий [1].

Для формирования этих умений на более высоком уровне авторы предлагают дополнить процесс обучения физике выполнением комплекса виртуальных лабораторных работ «Дифракция Френеля». В методическом пособии к комплексу раскрываются теоретические аспекты дифракции в сходящихся

лучах, метода зон Френеля и метода векторных диаграмм для определения амплитуды результирующего колебания в точке рассмотрения. Кратко представлены биографии ученых, их научные достижения и вклад в разработку данной тематики. К выполнению предлагаются следующие виртуальные лабораторные работы: дифракция света на отверстии, дифракция света на диске, дифракция света на бесконечной полуплоскости, дифракция света на проволоке [2].

- 1. Федеральная рабочая программа среднего образования «Физика (углубленный уровень)» URL: https://edsoo.ru/wp-content/uploads/2023/08/24 ФРП-Физика-10-11-классы угл.рdf (дата обращения: 09.02.2024).
- 2. Нефедьев, Л.А. Виртуальный лабораторный практикум по дифракции света для учащихся 11-х классов. Часть 1. Дифракция Френеля. [Электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л.А. Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова, И.С. Шайхулин. Казань: Издательство Казанского университета. 2023. . URL: https://kpfu.ru/portal/docs/F1262710891/Ch_1_Difrak_Frenelya.pdf (дата обращения: 09.02.2024).

УЛУЧШЕНИЕ ВНИМАНИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ФИЗИКИ СРЕДСТВАМИ ЦИФРОВЫХ ИНСТРУМЕНТОВ

Руслан Зуфарович Аскаров, Гузель Ильдаровна Гарнаева

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan Federal University E-mail: ruslan ask@bk.ru

Ключевые слова: внимание на уроке, цифровые инструменты, обучение физике, средства визуализации.

Внимание и обучение являются неразрывными элементами образовательного процесса на уроках физики, поэтому учителя постоянно задаются вопросом, как наилучшим образом привлечь и улучшить внимание обучающихся.

Одним из методов улучшения внимания обучающихся на уроках физики является применение цифровых технологий. Наиболее полезными данные технологии могут быть при визуализации физических явлений в процессе выполнения лабораторных работ в случаях, когда отсутствует необходимое оборудование или изучаемые явления являются сложными [1].

Так, при изучении темы «Типы оптических спектров» в 9 и 11 классах и последующем выполнении лабораторной работы «Наблюдение сплошного и линейчатого спектров» возникают трудности при визуализации спектров излучения атомов водорода, неона и гелия при отсутствии спектральных трубок и высоковольтного индуктора. Решить данную проблему, а также привлечь и улучшить внимание обучающихся, может информационная система «Электронная структура атомов», которая позволяет получить графическое представление цветных спектрограмм и диаграмм Гротриана для всех атомных систем по заданному элементу и набору параметров [2].

- 1. Московцева, Н.А. Использование цифровых технологий на уроках физики: проблемы и перспективы / Н.А. Московцева // Цифровая трансформация современного образования. 2020. С. 300-303.
- 2. Казаков, В.Г. Информационная система «Электронная структура атомов» / В.Г. Казаков, А.С. Яценко, В.В. Казаков, В.С. Ковалев // НИУ НГУ, ИАиЭ СО РАН. URL: http://grotrian.nsu.ru (дата обращения: 09.02.2024).

ВИРТУАЛЬНЫЙ ЛАБОРАТОРНЫЙ КОМПЛЕКС «ДИФРАКЦИЯ ФРАУНГОФЕРА» ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ УЧАЩИХСЯ 11 КЛАССА

Леонид Анатольевич Нефедьев, Гузель Ильдаровна Гарнаева Эльмира Ильгамовна Низамова, Эльвера Дамировна Шигапова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: guzka-1@yandex.ru

Ключевые слова: волновая оптика, виртуальная лабораторная работа, компьютерное моделирование, профильное обучение физике.

При организации урочной деятельности учитель не всегда может представить основной или ввести дополнительный материал в том объеме, который давал бы возможность полностью сформировать представления о рассматриваемом явлении. В этом случае возникает необходимость в организации внеурочной деятельности в виде работы кружка, факультатива, интенсивного курса [1].

Для организации внеурочной деятельности учащихся 11 класса профильного уровня обучения авторы предлагают использовать разработанный ими комплекс виртуальных лабораторных работ «Дифракция Фраунгофера». В ходе освоения комплекса рассматриваются теоретические аспекты дифракции в параллельных лучах, применение метода векторных диаграмм для распределения интенсивности на экране наблюдения, затрагиваются вопросы дифракции рентгеновского излучения на кристаллической решетке, дифракции в мутных средах, разрешающей способности оптических приборов. Кратко знакомятся с биографией ученых, их научными достижениями и вкладом в разработку данной тематики. Выполняются такие виртуальные лабораторные работы как: дифракция света на одной щели, дифракция света на двух щелях, дифракция света на многих щелях [2].

- 1. Шефер, О.Р., Проектирование внеурочной деятельности обучающихся по физике: учебное пособие / О.Р. Шефер; Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет. [Челябинск]: Южно Уральский научный центр РАО, 2022. 130 с.
- 2. Нефедьев, Л.А. Виртуальный лабораторный практикум по дифракции света для учащихся 11-х классов. Часть 2. Дифракция Фраунгофера. / Л.А. Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова, И.С. Шайхулин. Казань: Издательство Казанского университета. 2024.

ОРГАНИЗАЦИЯ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ФИЗИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 8 КЛАССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАБОРА "АЗБУКА ФИЗИКИ"

Денис Сергеевич Ирисов, Екатерина Николаевна Ахмедшина, Алсу Альбертовна Гайнутдинова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ekanika8@gmail.com

Ключевые слова: внеурочная деятельность, лабораторные работы, набор «Азбука физики».

Под внеурочной деятельностью следует понимать образовательную деятельность, осуществляемую в формах, отличных от классно-урочной, и направленную на достижение планируемых результатов освоения основных образовательных программ основного общего образования [1].

Разработанная авторами программа внеурочной деятельности по физике для обучающихся 8 классов, ориентирована на учащихся основной школы, проявляющих интерес к физике, интересующихся физическими опытами, конструированием, изготовлением лабораторных и демонстрационных приборов, наблюдениями физических явлений природы [2]. Основной формой проведения занятий является кружок по физике, где школьники выполняют лабораторные работы с помощью учебно-образовательного набора "Азбука физики". В комплект данного набора входят предметы и оборудование для проведения опытов по разделу «Электричество».

Авторы предлагают учащимся проделать следующие лабораторные работы такие, как: «Закон Ома для участка цепи», «Последовательное и параллельное соединение резисторов», «Измерение ЭДС и внутреннего сопротивления источника тока», «Закон Джоуля-Ленца». Каждая лабораторная работа сопровождается четким методическим руководством к выполнению лабораторной работы и вопросами для самопроверки, что способствует закреплению материала по разделу «Электричество».

- $1.~\Phi\Gamma OC$ «Основное общее образование». URL: https://fgos.ru/fgos/fgos-ooo (дата обращения: 09.02.2024).
- 2. Попова, А.В. Проблемы организации внеурочной деятельности по физике / А.В. Попова, С.А. Холина // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: педагогика. 2020. С. 95-101.

ПРИМЕНЕНИЕ ЦИФРОВОГО ИНСТРУМЕНТАРИЯ ДЛЯ ОСУЩЕСТВЛЕНИЯ ПАТРИОТИЧЕСКОГО ВОСПИТАНИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОБУЧЕНИИ ФИЗИКЕ

Елена Юрьевна Фадеева Гузель Ильдаровна Гарнаева Эльмира Ильгамовна Низамова Эльвера Дамировна Шигапова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: Lenoktggpy@mail.ru

Ключевые слова: патриотическое воспитание, патриотизм, личностные результаты обучения, обучение физике, цифровой инструментарий.

Сегодня система образования претерпевает ряд изменений и усовершенствований, определяются актуальные образовательные цели, отвечающие требованиям современного социума [1]. В современном педагогическом образовании делается акцент на воспитательной работе, формировании мотивированной и направленной заинтересованности в обучении. Одним из ключевых аспектов воспитательного процесса выступает патриотическое воспитание, основная цель которого — формирование активной жизненной позиции, статуса гражданина и патриота своего государства [2].

Уроки физики представляют собой благоприятную платформу для реализации подобных идей, поскольку позволяют продемонстрировать значимость науки для общественного развития и вклад физиков-ученых в научнотехнический прогресс [3].

Использование цифровых технологий может способствовать его более эффективному осуществлению патриотического воспитания обучающихся [4]. Одним из примеров использования цифровых инструментов в патриотическом воспитании обучающихся является создание интерактивных мультимедийных календарей, презентаций, видеороликов, посвященных истории развития физики и ее роли в развитии науки и техники. Такие презентации могут включать в

себя информацию о выдающихся ученых, их вкладе в развитие физики и его влиянии на общество и страну. Также цифровые инструментарии позволяют организовывать виртуальные экскурсии по музеям науки и техники, знакомя обучающихся с историческими экспонатами и достижениями отечественной науки. Это может быть полезно для формирования у обучающихся чувства гордости за свою страну и осознания роли науки в ее развитии. Таким образом, изучение физики дает возможность уже с первых уроков познакомить учащихся с именами наших соотечественников, посвятивших свою жизнь служению России, с достижениями российской науки. А применение же цифровых технологий позволяет увидеть разнообразные эксперименты, проведенные нашими соотечественниками, узнать о новейших достижениях современной науки и посетить предприятия и музеи, рассказывающие о научных достижениях нашей большой страны.

- 1. Паспорт национального проекта "Образование" URL: https://edu.gov.ru/application/frontend/skin/default/assets/data/national_project/main/Паспорт национального проекта Образование.pdf (дата обращения: 09.02.2024).
- 2. Паспорт федерального проекта «Патриотическое воспитание граждан Российской Федерации» URL: https://spokatt.kalach.obr55.ru/lokalnye-akty/vospitatelnaya-rabota/Паспорт ПРОЕКТ (федеральный).pdf (дата обращения: 09.02.2024).
- 3. Никулина, Т.В. Патриотическое воспитание на уроках физики / Т.В. Никулина. // Молодой ученый. -2017. -№ 24 (158). C. 366-369.
- 4. Нефедьев, Л.А. Формирование у будущих учителей физики умения использовать цифровой инструментарий для осуществления патриотического воспитания обучающихся / Л.А Нефедьев, Г.И. Гарнаева, Э.И. Низамова, Э.Д. Шигапова, Е.Ю. Фадеева // Международный форум KAZAN DIGITAL WEEK 2023. Сборник материалов, часть 1. С. 888-893.

РАЗВИТИЕ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ КОМПЕТЕНЦИИ У ОБУЧАЮЩИХСЯ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ СРЕДСТВАМИ ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Азат Хемдемов

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: akhemdemov@gmail.com

Ключевые слова: обучающихся с ограниченными возможностями здоровья, физический эксперимент, исследовательская деятельность.

В современном мире проблема ухудшения здоровья детей встает очень остро. Это связано с ухудшением экологии, с поведением родителей ребенка и с многими факторами. Увеличивается число детей с ограниченными возможностями здоровья.

Самым главным приоритетом в работе с такими детьми является индивидуальный подход с учетом специфики психики и здоровья каждого ребенка. Поэтому учитель должен уметь применять различные методы и формы по отношению к каждому конкретному ученику, используя творческий подход и современные технологии, из которых на первый план выходят коррекционно-развивающие [1].

Обучение физике детей с нарушениями здоровья особенно актуально в настоящее время в силу того, что сегодня важно не столько дать ребенку как можно больший багаж знаний, сколько обеспечить его общекультурное, личностное и познавательное развитие, вооружить таким важным умением, как умение учиться.

Формирование предметных образовательных результатов у детей с OB3 с помощью физического эксперимента требует особого подхода, который учитывает их индивидуальные особенности и потребности. Необходимо подбирать упражнения, использовать простые и понятные инструкции и объяснения, создавать условия для социальной интеракции и сотрудничества, использовать конкретные примеры и демонстрации.

Список литературы

1. Борисова Н. В. Инклюзивное образование: ключевые понятия / Н.В. Борисова, С.А. Прушинский. - М.: Перспектива; Владимир: Транзит-ИКС, 2009. - 47 с.

УСПЕВАЕМОСТЬ ИНОСТРАННЫХ СТУДЕНТОВ ПО ФИЗИКЕ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ В СЛУЧАЕ АДАПТАЦИИ ИХ К ПРОЦЕССУ ОБУЧЕНИЯ В КФУ

Рустам Маратович Мустафин

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: tatarstan.republic@yandex.ru

Ключевые слова: успеваемость, иностранные студенты, процесс адапташии.

Высокий уровень конкуренции на рынке международных образовательных услуг, проявляющийся в отставании России по количеству иностранных студентов от США, Великобритании, Франции, Германии и Австралии, настоятельно требует оптимизации организационных аспектов учебного процесса для студентов-иностранцев, совершенствования методики преподавания им, прежде всего, дисциплин, относящихся к базовой части основной профессиональной образовательной программы [1].

Особенно важным здесь является подготовка студентов в контексте технических дисциплин и дисциплин физико-математического направления, которые находятся в стадии постоянного развития, аккумулируя результаты научнотехнического прогресса. Именно поэтому актуальной является проблема организации учебной деятельности в процессе преподавания физики студентаминостранцам в российских вузах [2].

На примере преподавания физики рассмотрены мероприятия, направленные на решение организационных и методических проблем, возникающих при реализации традиционных методов обучения студентов-иностранцев: чтение лекций, решение задач, выполнение лабораторных работ.

- 1. Serway, R.A. Principles of physics / R.A. Serway, J.W. Jewett Jr. Belmont: Brooks/Cole Thomson Learning, 2005. 1206 pp.
- 2. Смирнова, З.М. Англо-русское билингвальное пособие по физике / З.М. Смирнова. М.: Издатель Карпов Е.В., 2010.

РАЗРАБОТКА УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ПОСОБИЯ К ЛАБОРАТОРНЫМ РАБОТАМ ПО ФИЗИКЕ ДЛЯ УЧАЩИХСЯ 9 КЛАССОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НАБОРА "АЗБУКА ФИЗИКИ"

Екатерина Николаевна Ахмедшина, Денис Сергеевич Ирисов, Дмитрий Сергеевич Гиляров

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ekanika8@gmail.com

Ключевые слова: лабораторная работа, обучение физике, набор «Азбука физики», учебно-методическое пособие.

Учебно-образовательный набор "Азбука физики", разработанный в Институте физики КФУ, включает в себя комплект оборудования, позволяющий познакомиться с основными разделами физики и предназначенный для проведения лабораторных работ для учащихся в школе.

Учебно-образовательный набор "Азбука физики" успешно используется для проведения лабораторных работ для учащихся 9 классов по разделу «Механика» по таким темам, как: «Равноускоренное прямолинейное движение», «Изучение движения тела, брошенного горизонтально», «Изучения движения тела по окружности», «Измерение жесткости пружины», «Измерение коэффициента трения скольжения», «Изучение закона сохранения механической энергии», «Изучение равновесия тела под действием нескольких сил», «Математический маятник».

Набор «Азбука физики» размещен в чемодане из прочного пластика и содержит в себе все необходимые учебно-методические материалы по ее выполнению к каждой лабораторной работе, содержащие: название, цели лабораторной работы; краткое изложение теории изучаемых явлений; описание экспериментальной установки; приведение методики эксперимента; обработка результатов эксперимента; контрольные вопросы.

Правильно организованные лабораторные занятия позволяют преодолеть разрыв между теорией и практикой, показать более очевидную связь, существующую между наукой и техникой, более очевидно подчеркнуть важную мысль, что законы, изучаемые в курсе физики, являются отображением реальной, окружающей нас действительности [1].

Список литературы

1. Бражников, М.А. Развитие лабораторного метода обучения физике в России / М.А. Бражников, Н.С. Пурышева // Наука и школа. — 2023. — №3 — С. 167-181.

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ЧАТ-БОТ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ ДЕТЕЙ С НАРУШЕНИЕМ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ТЕМЫ «МЕХАНИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ И ВОЛНЫ» В 9 КЛАССЕ

Екатерина Николаевна Ахмедшина, Эльмира Ильгамовна Низамова, Ирина Евгеньевна Коробова

Россия, Казань, Казанский федеральный университет Russia, Kazan, Kazan federal university E-mail: ekanika8@gmail.com

Ключевые слова: технологии чат-бот, обучение физике.

В современном мире использование технологии чат-бот нашло отражение в образовании, а также во многих других сферах деятельности [1].

Авторами предлагается использовать чат-бот с речевой поддержкой для детей с нарушением зрения при изучении темы «Механические колебания и волны» в 9 классе, который способен автоматизировать процесс проведения домашних заданий, контрольных мероприятий и отправку результатов тестирования преподавателю. Ученики регулярно в течение изучения данной темы могут обращаться к чат-боту. Чат — бот помогает автоматизировать процесс выполнения домашних заданий, снабжает методическими материалами учащихся, контролирует их выполнение. Использование аудиовизуальных средств совершенствует процесс образования и сокращает время для получения необходимой информации. Данный чат-бот доносит краткую дозированную информацию. Снабжают учащихся интересующей их информацией, а также производит сбор обратной связи. С помощью чат-бота учащиеся мгновенно и в любое время суток могут получить доступ к материалам по теме, не затрачивая массу времени на ее поиски. Он также помогает преподавателю, освобождая его от ряда рутинных задач, автоматизируя задачи, тем самым сэкономив время и силы на творческую и важную работу.

Таким образом, чат-бот является весьма полезным инструментом в организации образовательного процесса, а также удобным и интересным в использовании как для учащихся, так и для учителя.

Список литературы

1. Что такое чат-бот: основные функции, назначение и эффективность использования в бизнесе // Твой Компьютер - Новости ПК, Smart TV, Windows, Android, iOS, Word, Excel. – URL: https://tvoykomputer.ru/chto-takoe-chat-bot-osnovnye-funkcii-i-naznachenie/ (дата обращения 11.11.2023).

Электронное научное издание сетевого распространения

ИТОГОВАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПРОФЕССОРСКО-ПРЕПОДАВАТЕЛЬСКОГО СОСТАВА ИНСТИТУТА ФИЗИКИ КАЗАНСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА

Казань, 23 января – 6 февраля 2024 г.

Сборник избранных тезисов

Подписано к использованию 12.03.2024. Гарнитура «Times New Roman». Заказ 59/3.

Издательство Казанского университета

420008, г. Казань, ул. Профессора Нужина, 1/37 тел. (843) 206-52-14 (1704), 206-52-14 (1705)